

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA
Programa de Pós-Graduação em Física

**VIDRO DE SPIN E
ANTIFERROMAGNETISMO COM
INTERAÇÃO DE PAREAMENTO BCS LOCAL[‡]**

Carla Judite Kipper

Dissertação realizada sob a orientação do Prof. Dr. Sergio Garcia Magalhães, apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da UFSM em preenchimento final dos requisitos para a obtenção do grau de Mestre em Ciências.

Santa Maria

2005

[‡]Trabalho parcialmente financiado pelo CNPQ

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

A comissão examinadora, abaixo assinada, aprova a dissertação

VIDRO DE SPIN E ANTIFERROMAGNETISMO COM
INTERAÇÃO DE PAREAMENTO BCS LOCAL

elaborada por
Carla Judite Kipper

como requisito para a obtenção do grau de
Mestre em Física

Comissão examinadora:

Sergio Garcia Magalhães

Celso Arami Marques da Silva

Gilberto Luiz Ferreira Fraga

Santa Maria, 12 de julho de 2005.

Agradecimentos

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

- ao professor Sergio Garcia Magalhães pelo incentivo, pela orientação e pela sua dedicação;

- aos meus colegas de Laboratório e de sala de estudos, pelo bom relacionamento, pelas nossas discussões sobre física e por todo e qualquer auxílio durante esta etapa;

- à minha família pelas horas de ausência e pela confiança depositada.

Resumo

Neste trabalho investiga-se a competição entre vidro de spin (SG), antiferromagnetismo (AF) e formação de pares do tipo BCS (PARES) no espaço real. O modelo consiste em um acoplamento Ising juntamente com um termo BCS local que favorece a dupla ocupação dos sítios. Neste modelo composto por duas sub-redes, o acoplamento ocorre unicamente entre spins localizados em sub-redes diferentes. O termo que acopla os spins é uma variável aleatória J_{ij} com uma distribuição de probabilidade gaussiana, sendo a média dada por $-J_0/N$ e a variância por J^2/N . O problema é formulado em termos das integrais funcionais, onde as variáveis de spin são escritas como combinações bilineares dos campos de Grassmann. Utilizando o método das réplicas e a aproximação estática para as funções correlação spin-spin, obtemos o potencial grande canônico por sítio. Os resultados são apresentados através de diagramas de fases T/J versus g/J para vários valores de J_0 . Em todos os diagramas, quando g/J é suficientemente grande, as soluções das equações para os parâmetros de ordem indicam a presença da fase de formação de pares. À medida que diminui o valor de g/J , o problema apresenta como solução antiferromagnetismo e/ou vidro de spin, dependendo da razão J_0/J . Para altas temperaturas e qualquer valor de J_0 , temos solução paramagnética, com m e q nulos. Para valores de $J_0 \leq 1,5J$, aparece a solução vidro de spin em temperatura $T_f = 0,96J$. No intervalo de $1,5J < J_0 \leq 1,7J$ surge uma fase antiferromagnética entre as soluções paramagnética e vidro de spin. Quando $J_0 > 1,7J$ a solução vidro de spin desaparece.

Abstract

In this work the competition among spin glass(SG), antiferromagnetism (AF) and BCS pairs formation (PAIR) in real space is investigated. The model consists of an Ising spin glass term and a local BCS term that favors double site occupation. This model is composed by two sublattices, but only spins in different sublattices can interact. The Ising coupling is a random variable J_{ij} that follows a gaussian probability distribution with average $-J_0/N$ and variance J^2/N . The problem is formulated in terms of functional integral formalism, where the spin operators are written as bilinear combination of Grassmann fields. Using the replica method and the static approach for the spin-spin correlation functions, we obtain the grand-canonical potential. The results are presented in phase diagrams which show T/J versus g/J for several values of J_0/J (where T is the temperature and g is the pairing strength interaction). The order parameters solution indicate the PAIR phase (double occupation of sites) when g/J is sufficiently high. As the value of g/J decreases, the problem presents antiferromagnetic or spin glass solution, that depends on the ratio J_0/J . For high temperatures and any value of J_0 , we obtain paramagnetic solution. For values of $J_0 \leq 1.5J$, the SG solution appears at temperature $T_f = 0.96J$. In the range $1.5J < J_0 \leq 1.7J$, the AF phase appears between the paramagnetic and spin glass solutions. The spin glass solution is not found when $J_0 > 1.7J$.

Sumário

1	Introdução	1
2	Vidro de Spin	5
2.1	Definição de Vidro de Spin	5
2.2	Experimentos e Teoria	8
2.3	Supercondutividade, Vidro de Spin e Antiferromagnetismo	14
3	Métodos utilizados	20
3.1	Segunda Quantização	21
3.2	Estados Coerentes	24
3.3	Integrais de Caminho Fermiônicas	28
3.4	Vidro de Spin Fermiônico em duas sub-redes	34
4	Formulação do Problema	45
4.1	Modelo	45
4.2	Linha de Almeida-Thouless	59
5	Resultados	62
5.1	Resultados variando J_0	63
5.1.1	Estudo dos Parâmetros de Ordem com g/J pequeno	63
5.1.2	Estudo dos Parâmetros de Ordem com g/J grande	65
5.1.3	Análise dos Diagramas de Fases	67
6	Conclusão	73

Apêndice A	76
Apêndice B	80
Apêndice C	82

Capítulo 1

Introdução

Os vidros de spin foram conhecidos de modo mais amplo depois da metade da década de 70, devido a um conjunto de observações experimentais e teóricas que sugeriram um novo e não convencional estado magnético. O sistema vidro de spin consiste numa rede de momentos magnéticos ou spins com interações de troca. O vidro de spin mais característico consiste numa liga de impurezas magnéticas diluídas numa matriz de metal nobre, como Mn em Cu. A interação com os elétrons de condução do metal gera a interação de troca, de longo alcance e com sinal variável, entre os spins localizados em posições aleatórias. Este tipo de sistema apresenta um congelamento desordenado dos momentos magnéticos e um comportamento nada convencional a baixas temperaturas (Fisher e Hertz, 1993).

Enormes esforços foram empreendidos com o intuito de compreender e explicar essa nova fase magnética. Através de novos experimentos procurou-se identificar e discutir a exata natureza do comportamento observado. Por sua vez, abordagens teóricas buscaram demonstrar, da melhor e da forma mais simples, um modelo que descrevesse tal estado, fornecendo-nos uma quantidade de novos conceitos e teorias para tratar desses sistemas desordenados.

Estudos experimentais mais recentes mostram a possível existência de vidro de spin num contexto ainda mais complexo. Por exemplo, supercondutores de altas temperaturas críticas, como o *LaSrCuO*, apresentam a possibilidade de ocorrência de fases supercondutoras, vidro de spin e antiferromagnética, sendo cada uma delas

determinadas pela concentração da dopagem na amostra utilizada (Chou et al., 1995 e Scalapino et al., 1995). Por outro lado, a competição entre supercondutividade e vidro de spin também pode ser verificada em sistemas de férmions pesados (Spille et al., 1988). Sabe-se também que supercondutores convencionais dopados com impurezas magnéticas podem apresentar uma coexistência entre supercondutividade e vidro de spin (Davidov et al., 1977).

Devido as evidências experimentais de sistemas onde as fases vidro de spin, antiferromagnéticos e supercondutores são observados, surgiu o interesse em elaborar modelos teóricos para estudar mecanismos que conduzissem a uma competição entre estas fases.

O modelo proposto por Edwards e Anderson (EA) (1975) produziu um grande avanço nos estudos teóricos do vidro de spin, atribuindo para a fase vidro de spin um parâmetro de ordem q_{EA} . Dando seqüência a este trabalho precursor, Sherrington e Kirkpatrick (SK) (1975), tornaram solúvel a teoria, supondo que as interações possuem alcance infinito entre os spins. Na seqüência, Almeida e Thouless (1978) constataram que a solução obtida pelo modelo de campo médio SK com simetria de réplicas é instável. Consequentemente, o ansatz ¹ de simetria de réplicas não seria suficiente para capturar a complexidade do problema.

A presença de uma solução vidro de spin também foi analisada no contexto da mecânica quântica. Um primeiro estudo do vidro de spin quântico desenvolvido por Bray e Moore (1980a) apresentou o modelo quântico de Heisenberg com interações aleatórias de longo alcance, descrevendo os spins como operadores quânticos, utilizando o método das réplicas e a aproximação estática. Posteriormente, Theumann e Vieira Gusmão (1984) introduziram uma versão fermiônica para descrever o modelo de Ising quântico para o vidro de spin SK. Utilizando o formalismo de integrais de caminho fermiônicas para tratar a função de partição os resultados obtidos na aproximação estática concordaram de forma qualitativa com o modelo SK clássico.

No intuito de entender teoricamente a coexistência entre supercondutividade e vidro de spin, alguns esforços teóricos foram feitos nos últimos anos baseados no for-

¹O termo ansatz é empregado no sentido de fazer uma tentativa.

malismo introduzido por Theumann e Gusmão. Num destes trabalhos, Magalhães e Theumann (1999) estudaram o vidro de spin fermiônico em que existe também um termo de interação de pareamento BCS entre férmions localizados de spins opostos no “half-filling”. Este pareamento é feito quando a ocupação média é de um férmion por sítio, originando uma competição entre os ordenamentos “supercondutor”²(formação de pares de Cooper no espaço real) e vidro de spin. O mesmo problema foi analisado por Feldmann e Oppermann (1999) onde foram permitidas variações no potencial químico. Outras abordagens tentaram aprofundar este tipo de análise; Magalhães e Schmidt (2000) analisaram o modelo de Heisenberg fermiônico na presença de um campo magnético na direção z . Um estudo do vidro de spin Ising fermiônico com interação BCS, na presença de campo transversal (na direção x) foi realizado por Magalhães e Zimmer (2005) no “half-filling”. No entanto, em nenhuma das referências citadas anteriormente foi analisada a competição entre “supercondutividade” e vidro de spin com a presença de antiferromagnetismo.

Neste trabalho apresentamos resultados obtidos em modelos quânticos de vidros de spin fermiônicos com interação de pareamento BCS, onde os operadores de spin são representados por combinações bilineares de férmions localizados, utilizando técnicas de integração funcional com variáveis de Grassmann que anticomutam. Usaremos as técnicas e métodos encontradas nos trabalhos anteriores, buscando encontrar diagramas de fases que nos permitam analisar a competição que ocorre entre as soluções vidro de spin, antiferromagnética, paramagnética e formação de pares de Cooper no espaço real.

A competição entre os efeitos é estudada em um modelo de Ising com um termo BCS local, que possui duas subredes, onde o acoplamento aleatório J_{ij} , definido como uma distribuição Gaussiana, com a média dada por $-J_0/N$ e a variância por J^2/N , ocorre unicamente entre spins localizados em subredes diferentes. O termo BCS induz a formação de pares, ou seja, à dupla ocupação dos sítios. O propósito desta dissertação é entender como ocorre a solução vidro de spin em competição com as fases termodinâmicas antiferromagnética e de formação de pares, no contexto do

²O termo “supercondutor” está entre aspas devido ao modelo se referir apenas a formação de pares nos sítios da rede.

modelo previamente mencionado.

A dissertação possui os seus capítulos elaborados da forma como segue abaixo.

Discutimos no capítulo 2 um resumo das principais propriedades experimentais e os estudos teóricos que caracterizam o estado vidro de spin. Apresentamos, também, um breve relato da coexistência e competição entre vidro de spin, antiferromagnetismo e supercondutividade.

No capítulo 3 tratamos do formalismo de integrais de caminho fermiônicas e sua aplicação nos modelos de Ising fermiônico.

Através dos métodos discutidos no capítulo anterior, o capítulo 4 traz o desenvolvimento detalhado dos cálculos analíticos no tratamento do modelo de vidro de spin fermiônico com interação de pareamento tipo BCS no espaço real. Escrevendo o potencial grande canônico do problema, obtemos os parâmetros de ordem, possibilitando estudar os tipos de transições que ocorrem entre as soluções encontradas.

Os resultados obtidos encontram-se no capítulo 5. É feita uma discussão e uma análise das soluções numéricas para o conjunto de equações dos parâmetros de ordem, expostas através de gráficos dos parâmetros e através dos diagramas de fases.

Por fim chegamos no capítulo 6, onde se conclui e enfatiza os resultados obtidos, dando também uma perspectiva para futuros desdobramentos do que foi desenvolvido aqui.

Capítulo 2

Vidro de Spin

Vidro de spin é um tipo de estado condensado encontrado em sistemas que é intrinsecamente distinto das formas convencionais de ordenamentos magnéticos clássicos. Neste capítulo faremos a apresentação do estado magnético vidro de spin e a sua relação com a supercondutividade e o antiferromagnetismo, bem como da competição entre essas fases, tema de estudo desta dissertação.

A organização deste capítulo se dá de maneira que a seção 2.1 conceitua e descreve o sistema vidro de spin. Apresentamos na seção 2.2 uma caracterização experimental deste estado magnético e também a teoria introduzida pelo modelo SK para tratar o vidro de spin. A seção 2.3 aborda sistemas supercondutores que podem apresentar o vidro de spin, exibindo alguns resultados experimentais e trabalhos teóricos que mostram a competição entre supercondutividade, vidro de spin e antiferromagnetismo.

2.1 Definição de Vidro de Spin

A forma mais simples de conceituar a fase magnética vidro de spin é descrevê-lo como um sistema composto por um conjunto de spins que, em estados de baixa temperatura, apresentam seus momentos magnéticos congelados em alguma estrutura desordenada, de forma tal que os spins estejam em competição uns com os outros. Neste congelamento não se observa ordenamento de longo alcance, o que é dife-

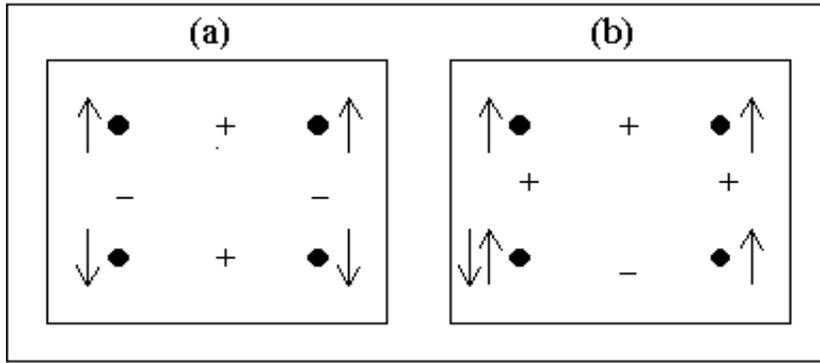


Figura 2.1: Representação de uma unidade de rede quadrada, onde os pontos pretos são os sítios. A interação entre os spins é $+$ ou $-$, devido a variável aleatória de troca $+J$ (ferromagnética) e $-J$ (anti-ferromagnética), respectivamente. (a) unidade não frustrada; (b) unidade frustrada.

rente de qualquer tipo de modelo uniforme ou periódico que estamos acostumados a encontrar em estruturas magnéticas convencionais, como ferromagnética ou anti-ferromagnética. Para produzir tal estado dois ingredientes são necessários: ocorrer uma competição entre as diferentes interações entre os momentos magnéticos, no sentido de que nenhuma configuração dos spins seja favorecida entre as demais (a este fenômeno damos o nome de frustração); e também, que estas interações devam se dar de forma aleatória, ou seja, a transição do congelamento para a ordem vidro de spin se dá com um ordenamento no qual os spins alinham-se em direções totalmente aleatórias.

O conceito de frustração ou competição entre as interações descreve a incapacidade que o sistema apresenta em satisfazer simultaneamente todas as interações que ocorrem entre os spins da rede. Para ilustrar o conceito de frustração vamos considerar uma unidade elementar de uma rede quadrada onde as interações entre os spins são independentes e iguais a $\pm J$, sendo J uma variável aleatória. Quando o número de interações positivas for par (ver figura 2.1-a) é possível encontrar algumas configurações, onde todas as interações entre os spins são satisfeitas. Isto é observado quando se fixa um spin e se realiza um ciclo no sentido horário ao redor da unidade para determinar os valores assumidos pelos próximos spins, não encontramos conflito nas interações. Por outro lado, se o número de interações positivas

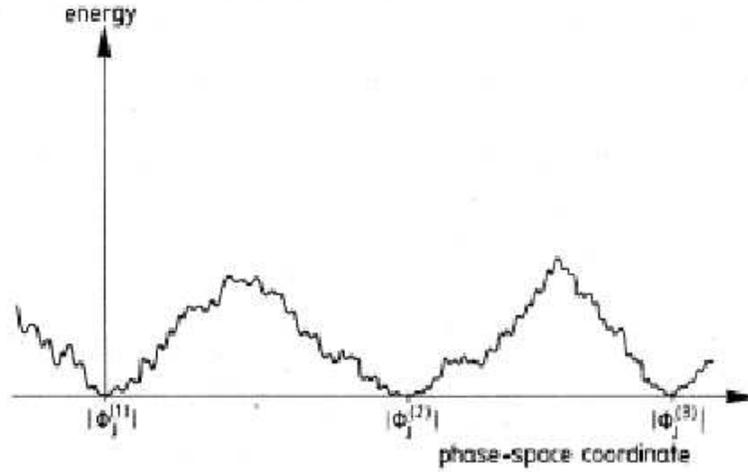


Figura 2.2: Gráfico da energia livre em função da coordenada do espaço de fase. O espaço de fases de um vidro de spin possui estados degenerados (vales), isto é, microestados acessíveis ao sistema (extraído de Binder e Young, 1986).

for ímpar (ver figura 2.1-b) e realizando o mesmo ciclo anterior com um spin fixo, verificamos que o último spin não consegue satisfazer as interações a ele impostas, caracterizando portanto a frustração, a inabilidade do sistema em satisfazer todas as ligações simultaneamente. Desse modo a unidade de rede frustrada, no estado fundamental, terá um conjunto de estados degenerados, criando no espaço de fase uma representação de muitos vales, como a mostrada na figura (2.2), onde podemos visualizar de forma qualitativa o comportamento da energia livre \mathcal{F} .

A figura (2.2) nos mostra vários vales (estados), onde os mínimos são separados por barreiras, que podem se tornar infinitas no limite termodinâmico, tornando o acesso a outro vale impossível. Em cada vale podem existir ainda vários sub-vales que determinam um mínimo local para \mathcal{F} . Sendo a barreira finita, somente o estado com mais baixo valor de \mathcal{F} representa um estado estável, e os demais são configurações meta-estáveis da magnetização, ou seja, estados instáveis. Quando $T > T_f$ (T_f é a temperatura de congelamento), a estrutura de muitos vales desaparece, e \mathcal{F} passa a ter somente um único mínimo.

Classicamente os materiais que apresentam uma fase vidro de spin são os metais nobres, chamados hospedeiros, como o Au, Ag, Cu e Pt, nos quais diluimos

muito fracamente impurezas magnéticas, que são dadas pelos metais de transição iônicos, como Mg ou Fe. Os momentos das impurezas produzem uma polarização nos elétrons de condução do metal hospedeiro que estão ao seu redor. Esta polarização será positiva para algumas distâncias e negativa para outras. O spin da impureza sentirá um campo magnético localizado, produzido pela polarização dos elétrons de condução do hospedeiro. A polarização é provocada pela própria impureza e o spin tende a alinhar-se ao longo do campo. As impurezas estão dispostas, por definição, de forma aleatória na rede. Onde as interações são positivas o alinhamento paralelo dos momentos magnéticos (ferromagnético) é favorecido. Onde as interações são negativas constatamos que o alinhamento dos momentos é anti-paralelo (antiferromagnético). Estes materiais exibem aleatoriedade e competição entre as interações, características fundamentais na obtenção do sistema vidro de spin.

2.2 Experimentos e Teoria

Para caracterizar o comportamento dos sistemas vidros de spin experimentalmente devemos ressaltar algumas propriedades que os destacam, como os momentos magnéticos se congelam abaixo de uma determinada temperatura crítica T_f e a ausência de ordenamento magnético periódico de longo alcance.

Na figura 2.3 apresentamos dados experimentais da susceptibilidade pela temperatura para diversos sistemas que possuem o estado vidro de spin. Os gráficos apresentam um pico característico na susceptibilidade devido ao congelamento dos momentos magnéticos, indicando o valor da temperatura de congelamento dos spins. O pico observado sugere uma transição de fase de segunda ordem entre um estado, também desordenado, paramagnético, e o estado vidro de spin. À medida que aumentamos a temperatura, os momentos magnéticos locais, que respondiam às flutuações térmicas de forma desordenada, se congelam de maneira aleatória também desordenada (temperatura crítica T_c), deixando de variar com o aumento da temperatura. Essa transição na temperatura T_c faz com que o grau de ordenamento dos spins sofra uma alteração sem que haja uma variação descontínua, onde o parâmetro

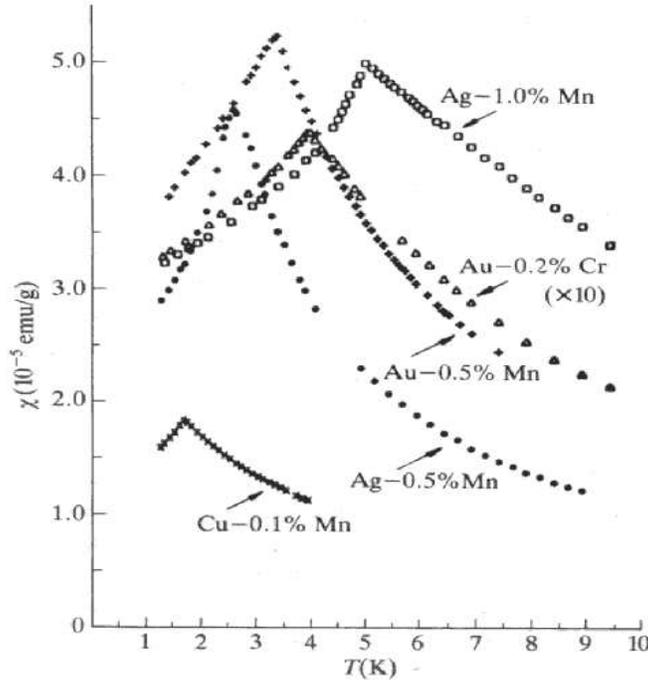


Figura 2.3: Susceptibilidade ac do Cu-0,1% Mn (\times), Ag-0,5% Mn (\bullet), Au-0,5% Mn ($+$), Au-0,2% Cr (\triangle) e Ag-1,0% Mn (\square) em função da temperatura, para um campo magnético $H=20$ Oe e frequência de 100 Hz (Fisher e Hertz, 1993).

magnetização tende continuamente a zero na temperatura de transição. Nestes estados, chamados desordenados, devemos nos ater a magnetização espontânea local, dada por

$$m_i = \langle S_i \rangle, \quad (2.1)$$

que no caso do vidro de spin é diferente de zero para um dado sítio i , mas acaba desaparecendo quando calculamos a magnetização média. A evidência experimental da magnetização espontânea por sítio não ser nula marca a temperatura de transição para a fase vidro de spin, provocando uma redução no valor da susceptibilidade. A temperatura de congelamento é dependente da frequência do campo magnético aplicado, sendo portanto definida no limite quando a frequência tende a zero.

O gráfico da figura (2.4) nos mostra mais claramente o comportamento da susceptibilidade em termos de sua dependência com a frequência. O pico na susceptibilidade marca a temperatura T_f e, numa escala ampliada, deixa de ser tão agudo, se tornando mais arredondado e deslocando-se para temperaturas mais baixas de

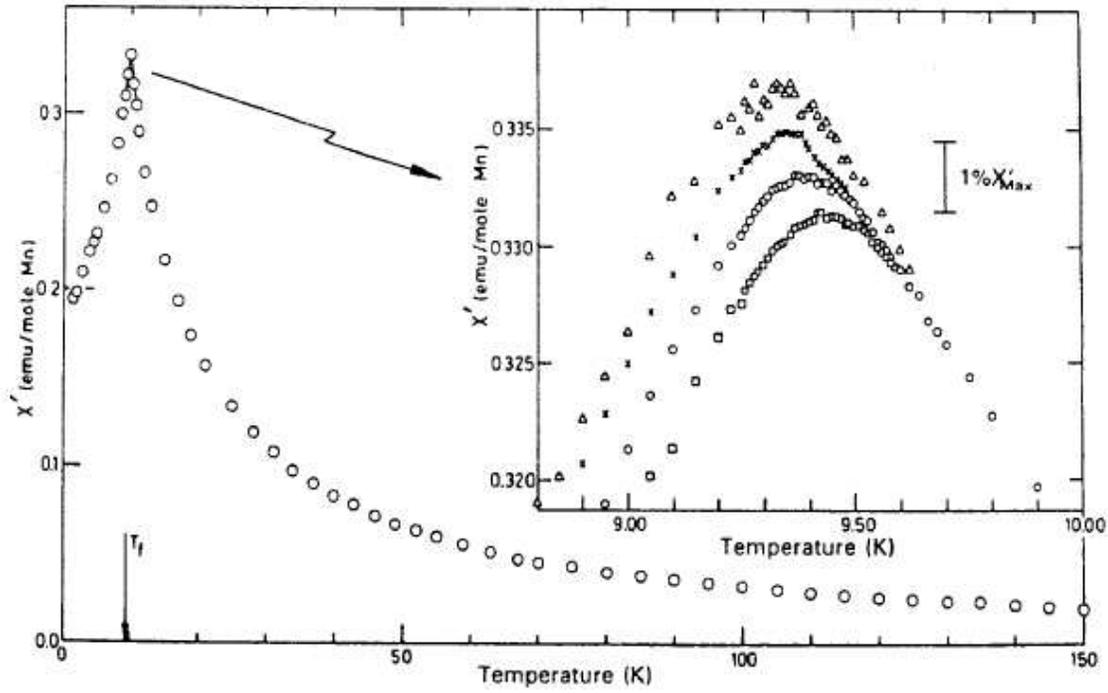


Figura 2.4: Susceptibilidade ac em campo zero para o Cu-0,94% Mn como função da temperatura, com frequências: 1,33 kHz(\square), 234 Hz (\circ), 10,4 Hz (\times) e 2,6 Hz (\triangle) (extraído de Mydosh, 1996).

acordo com o decréscimo da frequência. Usualmente, esta característica não é esperada nem tampouco encontrada em ordenamentos de longo alcance, como nas fases ferromagnéticas ou antiferromagnéticas.

A origem dos resultados encontrados nas medidas de susceptibilidade mostradas nas figuras (2.3) e (2.4) está no fato de que o vidro de spin possui muitos modos configuracionais possíveis que se equivalem. O arranjo dos spins em um determinado estado depende das condições iniciais com as quais o experimento foi realizado, tais como a intensidade e a frequência do campo magnético aplicado na amostra e, também, no modo como a amostra foi resfriada, como por exemplo com qual velocidade ou se foi feito em campo magnético zero ou muito intenso.

O estudo teórico pioneiro sobre vidro de spin foi realizado por Edwards e Anderson (1975), com a proposta de substituir as interações de troca RKKY, que representam os momentos magnéticos aleatoriamente distribuídos no metal hospedeiro, pela disposição nos sítios de uma rede com invariância translacional. A desordem

é representada pela interação de troca J_{ij} entre os spins, considerada como uma variável independente e aleatória, com uma distribuição de probabilidades que depende da separação entre os sítios $\vec{R}_j - \vec{R}_i$. Os autores propuseram para este sistema um hamiltoniano do tipo:

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

onde a soma percorre os pares de vizinhos mais próximos, ou seja, para os primeiros vizinhos J_{ij} segue uma distribuição de probabilidades Gaussiana e o spin S_i assume os valores ± 1 (tratando-se portanto de um modelo de Ising). A variável aleatória J_{ij} acopla os spins S_i no sistema estudado.

A energia livre do sistema escrita através do logaritmo da função de partição, será dada por:

$$F(J_{ij}) = -k_B T \ln \mathcal{Z}(J_{ij}) , \quad (2.3)$$

onde $F(J_{ij})$ é uma variável extensiva, isto é, acessível à medidas, de modo que quando efetuada a média sobre a desordem

$$F \equiv \langle F(J_{ij}) \rangle_{J_{ij}} = \int dJ_{ij} P(J_{ij}) F(J_{ij}) , \quad (2.4)$$

tendo $P(J_{ij})$, descrito por uma distribuição de probabilidades.

O fato da função logarítmica da equação (2.4) possuir uma variável aleatória no seu interior, dificulta muito os cálculos da média. A técnica, chamada de método das réplicas (Edwards e Anderson, 1975), é utilizada para solucionar a questão, e faz uso da aproximação

$$\mathcal{Z}^n = \exp(n \ln \mathcal{Z}) \approx 1 + n \ln \mathcal{Z} , \quad (2.5)$$

adequada quando $n \rightarrow 0$, para substituir o logaritmo de $\mathcal{Z}(J_{ij})$ pela expressão

$$\ln \mathcal{Z}(J_{ij}) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\mathcal{Z}^n(J_{ij}) - 1}{n} , \quad (2.6)$$

onde $\mathcal{Z}^n(J_{ij})$ pode ser escrito em termos de n réplicas idênticas, que descrevem o sistema real, sendo n inteiro e positivo:

$$\mathcal{Z}^n(J_{ij}) = \prod_{\alpha=1}^n \mathcal{Z}_{\alpha}(J_{ij}) = \prod_{\alpha=1}^n \text{Tr} \exp \left(-\frac{1}{k_B T} \sum_{\alpha=1}^n H(S^{\alpha}, J_{ij}) \right) , \quad (2.7)$$

com a função de partição da réplica α dada por $\mathcal{Z}_\alpha(J_{ij})$. A média sobre o sistema original é agora a média sobre cada um dos sistemas replicados. Isto nos leva ao acoplamento entre diferentes réplicas do sistema. Este método nos possibilita tratar de maneira eficaz a média sobre a desordem.

É necessário neste ponto introduzir a noção de parâmetro de ordem, com o objetivo de caracterizar o estado vidro de spin. Tal parâmetro serve para descrever a termodinâmica, já que abaixo de uma temperatura crítica ocorre uma transição de fase. Conseqüentemente, como há duas fases diferentes, abaixo e acima da temperatura crítica, que são descontínuas analiticamente, necessitamos de diferentes funções de variáveis termodinâmicas para descrevê-las. O parâmetro de ordem serve portanto para caracterizar a diferença existente entre uma fase e outra.

Todavia, antes de introduzirmos o parâmetro de ordem de Edwards e Anderson (1975) para o vidro de spin, precisamos discutir a quebra de simetria sofrida pelo sistema. Como exemplo clássico de quebra de ergodicidade podemos olhar para um ferromagneto de Ising, onde abaixo da temperatura de Curie ocorre uma magnetização espontânea. Neste exemplo o sistema encontra-se em um estado onde todos os spins apresentam a mesma probabilidade de apontar tanto para cima como para baixo. Em mecânica estatística reproduzimos este comportamento restringindo o espaço de fases, ou seja, quebrando a ergodicidade, optando por uma das duas magnetizações. Para obter este efeito aplica-se um campo H , fazendo-o tender a zero após aplicar o limite termodinâmico. Um sistema é dito não ergódico, e portanto não simétrico, quando restringimos uma parte da configuração do espaço de fases.

Para o sistema vidro de spin, de acordo com a representação de muitos vales, são muitos os estados termodinâmicos possíveis (vales), em que o sistema poderá ser encontrado. Com o intuito de projetar o sistema em um vale específico, em mecânica estatística associamos a cada um dos estados termodinâmicos a um apropriado peso estatístico. Neste caso não existe uma relação direta entre os vales, como no caso de um ferromagneto, pois a probabilidade ocorre de forma aleatória. Para trabalhar com os valores médios relacionados aos estados associados, decompomos o espaço de fases em micro-estados.

No caso do parâmetro de ordem q_{EA} , proposto no trabalho de Edwards e Anderson (1975), o estado vidro de spin se caracteriza pelo congelamento dos spins transcorrido um longo período de tempo. Há uma probabilidade não nula de encontrar os spins nas mesmas direções, o que é representado pela expressão

$$q_{EA} = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \langle S_i(0)S_i(t) \rangle_t \rangle_{J_{ij}} , \quad (2.8)$$

onde esta média ocorre sobre a desordem e está relacionada com o tempo na forma

$$\langle S(0)S(t) \rangle_t = \frac{1}{t} \int_0^t dt' S(0)S(t') . \quad (2.9)$$

Se obtemos um valor não nulo para o parâmetro de ordem $q_{EA} \neq 0$, o sistema se encontra no estado vidro de spin.

Na perspectiva da representação de muitos vales podemos reescrever a equação (2.8) supondo que, no limite de $N \rightarrow \infty$, o sistema congela em um determinado estado termodinâmico l , devido ao crescimento infinito das barreiras que separam os vales. Após decorrido este longo período de tempo o sistema terá percorrido todos os micro-estados acessíveis possíveis do vale l . Como o teorema ergódico se aplica substituímos a média temporal pela média termodinâmica do vale l . Representaremos q_{EA} pela média da magnetização espontânea ao quadrado de um vale l , onde esta média é assumida sobre todos os vales. Temos, então

$$q_{EA} = \langle \sum_l P_l \langle S_i^l \rangle^2 \rangle_{J_{ij}} , \quad (2.10)$$

onde P_l é o peso estatístico presente em cada vale.

Quando invertemos a ordem nos limites da equação (2.8), podemos definir um novo parâmetro q que irá conter as contribuições interativas entre os vales, devido ao fato do limite $t \rightarrow \infty$ ter sido tomado antes das barreiras entre os vales crescerem infinitamente ($N \rightarrow \infty$). Este parâmetro mede o quadrado da magnetização espontânea de equilíbrio e é dado por:

$$q = \langle \langle S_i \rangle^2 \rangle_{J_{ij}} = \langle \langle \sum_l P_l \langle S_i^l \rangle \rangle^2 \rangle_{J_{ij}} . \quad (2.11)$$

Se compararmos os dois parâmetros (2.10) e (2.11), vemos que eles são iguais quando possuem um único vale. Por fim, de acordo com o método das réplicas, a

equação (2.11) pode ser escrita da seguinte forma

$$q = q^{\alpha\beta} = \langle \langle S_i^\alpha S_i^\beta \rangle \rangle_{J_{ij}}, \quad (2.12)$$

com $\alpha \neq \beta$. Utilizando a simetria entre as réplicas, todos os $q^{\alpha\beta}$ são iguais, tornando as equações (2.10) e (2.11) idênticas, caracterizando um único estado termodinâmico e portanto,

$$q = q_{EA} = q_{\alpha\beta}; \quad \text{com } \alpha \neq \beta. \quad (2.13)$$

No mesmo ano ao trabalho pioneiro de Edwards e Anderson surge uma nova proposta para a interação de troca presente na equação (2.2). Sherrington e Kirkpatrick (SK) (1975), baseando-se na teoria de campo médio para ferromagnetos puros. Nesta interpretação as interações de troca são de longo alcance e constantes, atuando sobre todos os spins, mas escalonadas de acordo com o número de spins do sistema. Nesta teoria, para o hamiltoniano (2.2), é atribuída uma interação de troca de longo alcance J_{ij} , que segue uma distribuição de probabilidades gaussiana, onde a direção S^z dos spins é a única componente levada em conta, e os somatórios sobre os sítios i e j estendem-se a todos os pares de sítios da rede. Com o desenvolvimento do modelo SK, que é solúvel analiticamente, grandes avanços ocorreram no estudo do vidro de spin em uma teoria de campo médio.

2.3 Supercondutividade, Vidro de Spin e Antiferromagnetismo

Alguns experimentos realizados na última década do século passado mostram a existência da competição entre as fases de ordenamento magnético e a supercondutividade. Entre eles está o estudo realizado por Chou et al. (1995) apresentado na figura (2.5). Baseando-se em dados experimentais relativos ao supercondutor $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ onde observou-se uma competição entre as fases supercondutoras de alta temperatura e o vidro de spin. Este material exibe uma supercondutividade para altas temperaturas quando $x > 0,05$, onde neste ponto a resistividade cai para zero. No gráfico (2.5-a) vemos o começo da irreversibilidade na temperatura de

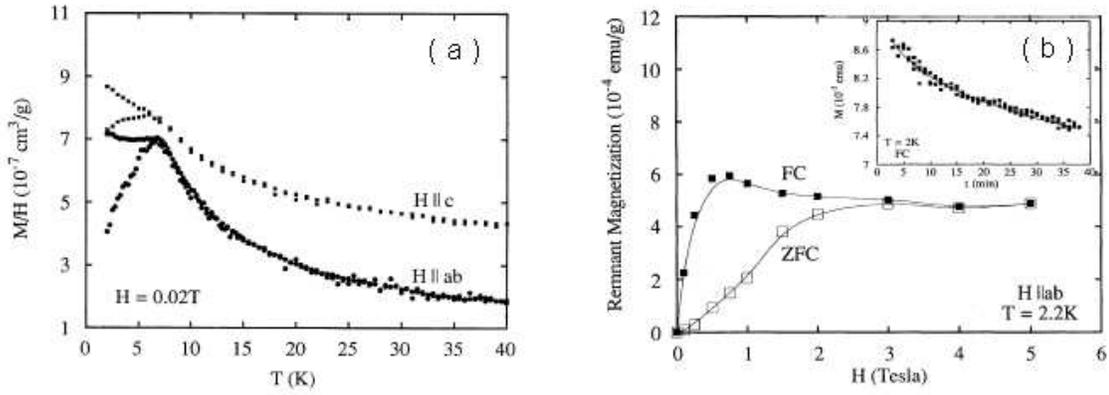


Figura 2.5: (a) Magnetização versus temperatura para $La_{1,96}Sr_{0,04}CuO_4$ para um campo de $0,02T$ aplicado perpendicular ($H||c$) e paralelo ($H||ab$) ao plano CuO_4 . As medidas feitas resfriando-se a amostra, onde se aplica um campo finito e um campo zero, para baixas temperaturas, divergem, indicando uma irreversibilidade. (b) Gráfico da magnetização remanente pelo campo magnético aplicado. A medida é efetuada 1h após ter sido desligado o campo. O gráfico menor mostra a dependência temporal da magnetização a partir do momento em que o campo foi desligado (retirado de Chou et al., 1995).

congelamento T_f . Quando é feita a medida da magnetização resfria-se a amostra de $T \gg T_f$ para $T \ll T_f$, com campo zero; aplica-se então um campo de $0,02T$ juntamente com o aumento da temperatura. Existe uma dependência entre o comportamento exibido pelo material relacionado com a prévia preparação do mesmo para o experimento. Neste caso as curvas de magnetização diferem uma da outra. Na figura (2.5-b) estão os resultados do estudo sobre magnetização remanente para $T < T_f$, onde os processos de resfriamento com e sem campo são apresentados.

O diagrama de fases experimental exposto na figura (2.6) nos mostra que este composto $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ apresenta uma fase antiferromagnética para $x \leq 0,02$, uma fase supercondutora de altas temperaturas para $x > 0,05$ e uma fase vidro de spin intermediária entre as fases.

O estudo desenvolvido por Spille et al. (1988) para o composto $Ce_{1-x}Gd_xCu_{2,2}Se_2$ nos mostra que a coexistência entre supercondutividade e vidro de spin também podem ser encontrada em férmions pesados, onde o pico na susceptibilidade dependente da frequência caracteriza a fase vidro de spin.

Alguns sistemas supercondutores convencionais (SC) dopados com impurezas

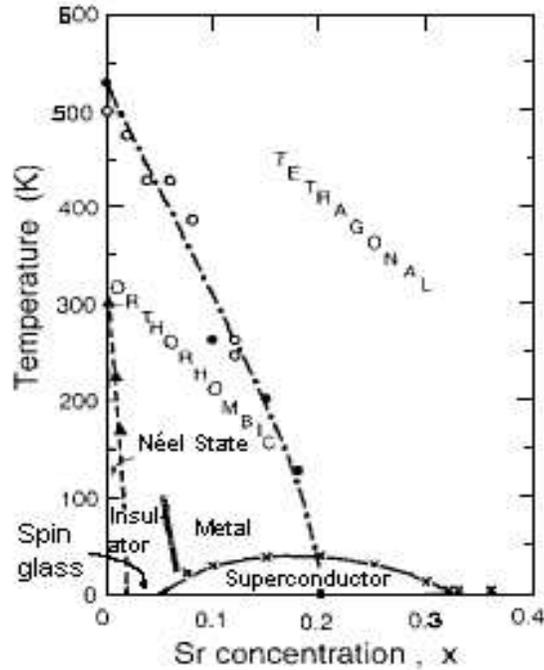


Figura 2.6: Diagrama de fases para $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ (retirado de Scalapino, 1995).

magnéticas apresentam uma coexistência entre ordem magnética e supercondutividade. O trabalho realizado por Davidov et al. (1977) que caracteriza um estado magnético como uma fase vidro de spin, apresentou um pico similar aos da figura (2.3) (através da análise da susceptibilidade em função da temperatura), devido a certas dopagens de impurezas magnéticas, dadas pela concentração de x em Gd presentes no composto $Gd_xTh_{1-x}Ru_2$. Na figura (2.7) temos o diagrama de fases para o $Gd_xTh_{1-x}Ru_2$, onde para uma baixa concentração de Gd , encontramos uma transição da fase paramagnética para uma supercondutora. A fase supercondutora desaparece para uma concentração de Gd acima de 13 %, ocorrendo na temperatura T_m que marca a transição para o vidro de spin. Existem outros compostos como o $Gd_xCe_{1-x}Ru_2$ (Fischer e Peter, 1973), o $Gd_xLa_{3-x}In$ (Crow et al., 1966, 1967), o Gd_xLa_{1-x} (Finnemore et al., 1965, 1968) e o $Gd_xLa_{1-x}Al_2$ (Maple, 1968), que também apresentam competição entre supercondutividade e vidro de spin.

Podemos utilizar a teoria BCS para explicar os principais fenômenos físicos microscópicos associados à supercondutividade. Esta teoria descreve, de forma

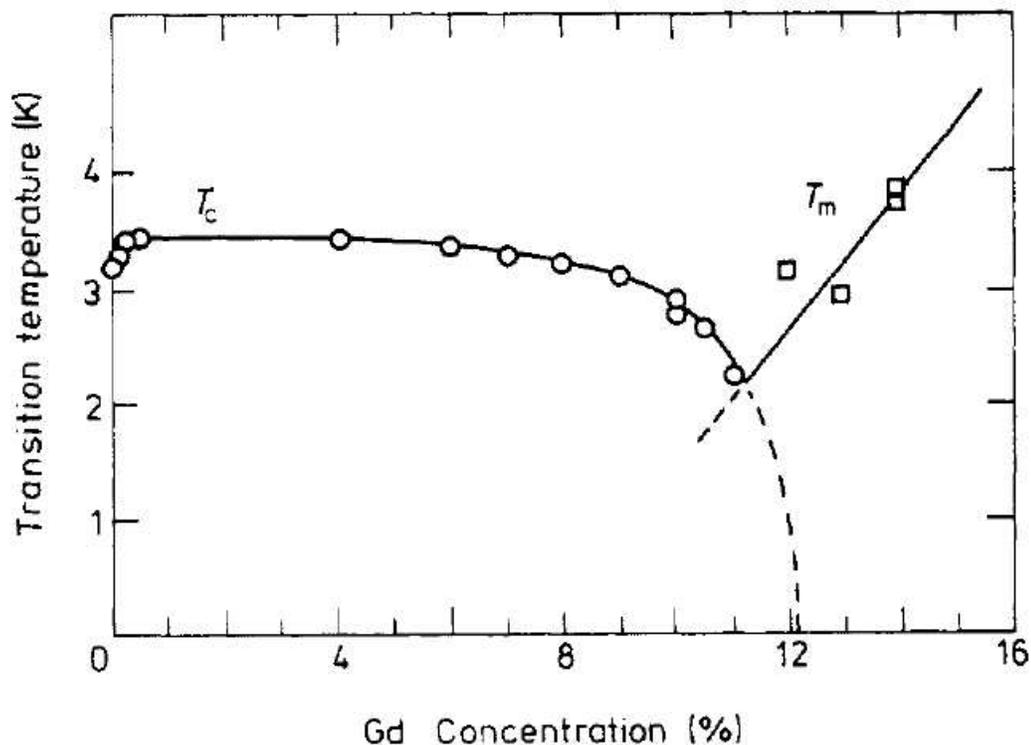


Figura 2.7: Gráfico da temperatura de transição para a supercondutividade, T_c , e a temperatura de transição ao vidro de spin, T_m , como funções da concentração de Gd numa amostra de $Gd_xTh_{1-x}Ru_2$. Essa figura foi retirada do trabalho de Davidov et al. (1977).

satisfatória, os materiais supercondutores convencionais dopados com impurezas magnéticas em temperaturas baixas. Estes supercondutores convencionais são caracterizados pela formação de pares de elétrons que interagem indiretamente via rede. A interação ocorre devido as vibrações da rede cristalina, resultando na emissão de uma partícula chamada fónon. Quando um elétron se desloca na rede constituída por íons positivos, fracamente ligados a rede, ocorre, devido a atração coulombiana, uma ligeira distorção da rede nas vizinhanças do elétron. A densidade de cargas positivas ao redor do elétron aumenta fazendo com que outro elétron que por ali passar seja atraído. Isto deverá ocorrer em um intervalo de tempo menor que o tempo de relaxação do sistema (que é o tempo de emissão de um fónon). Já que o sistema deformado é instável e a atração deve superar a repulsão coulombiana entre os dois elétrons. Portanto, a ocupação dos orbitais nos níveis de energia, para um

sistema de muitos elétrons com temperatura finita, deve ser ou por pares de elétrons com spins contrários ou permanecer vazio, sem elétrons. Esta formação de pares de elétrons ligados é conhecida como pares de Cooper.

Os estudos teóricos dos supercondutores (SC) de baixas temperaturas dopados com impurezas magnéticas são caracterizados pela utilização da teoria BCS, responsável pela formação de pares. Um modelo teórico foi proposto por Nass et al. (1981) para tratar os SC utilizando um hamiltoniano BCS, acrescentando entre os spins localizados e os elétrons de condução, uma interação de troca $s - d$.

Recentemente, Magalhães e Theumann (1999), tendo como base o modelo proposto por Nass et al. (1981), estudaram a competição entre vidro de spin e formação de pares de Cooper numa visão fermiônica. Magalhães e Theumann consideraram um hamiltoniano efetivo onde os momentos magnéticos são representados por combinações bilineares de operadores fermiônicos. Os elétrons de condução interagem via um termo de troca efetivo $s - d$ (J_{sd}), com as impurezas magnéticas localizadas aleatoriamente, dando lugar a uma interação de pares efetiva BCS entre os spins localizados, aqui representados por férmions. O modelo equivalente do problema está representado no hamiltoniano abaixo, dada pela interação aleatória entre os spins localizados e uma interação que favorece à formação de pares BCS no espaço real, ou seja, a dupla ocupação dos sítios, entre os férmions localizados:

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \frac{g}{N} \sum_{i,j} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\uparrow}, \quad (2.14)$$

onde $c_{j\sigma}^\dagger$ e $c_{j\sigma}$ são os operadores de criação e destruição, respectivamente, de férmions localizados no sítio j que apresentam uma projeção de spin σ . O primeiro termo do Hamiltoniano (2.14) representa o modelo SK e responde pela fase vidro de spin, já o segundo termo corresponde ao modelo BCS, cuja variação na intensidade de g induz à formação de pares de Cooper.

A fase antiferromagnética é uma solução encontrada em uma classe de materiais que não apresenta magnetização macroscópica em baixas temperaturas. Esta fase se caracteriza microscopicamente por ter seus spins ordenados num arranjo antiparalelo, onde os domínios são regiões que apresentam magnetização em direções opostas

se cancelando. Devido a aproximação de campo médio, cada spin sofre a ação da magnetização média de todos os outros spins, ou no caso do modelo de Ising, sofre a ação dos vizinhos mais próximos. Neste caso, o termo de interação de troca entre os spins J_{ij} é um termo de interação negativa, o que favorece o alinhamento antiparalelo dos spins que estão em subredes diferentes. Isto ocorre abaixo da temperatura de ordenação dos spins denominada temperatura de Néel T_N . A susceptibilidade apresenta um pico não muito acentuado na temperatura de transição (T_N), semelhante a mostrada na figura (2.3).

O trabalho realizado nesta dissertação se propõe a unir o estudo que relaciona os estados onde ocorrem formação de pares BCS e vidro de spin, através do hamiltoniano (2.14), aplicando-o para o caso de duas sub-redes, com o objetivo de observar a competição entre as fases existentes no sistema.

Capítulo 3

Métodos utilizados

Para alcançar os objetivos propostos na introdução utilizaremos métodos matemáticos e propriedades físicas de sistemas quânticos. Será introduzido o formalismo que trata a função de partição de um sistema fermiônico composto de muitas partículas idênticas. Para estes sistemas físicos são definidos operadores de criação e destruição, os quais especificam o estado de uma partícula. Os operadores do hamiltoniano, que representa o sistema, são expressos na forma da segunda quantização.

Este capítulo está organizado de modo a apresentar na seção 3.1 o formalismo desenvolvido para descrever sistemas formados por muitas partículas, chamado de segunda quantização. Na seção 3.2 faremos um breve estudo dos autoestados dos operadores de destruição, denominados de estados coerentes, cuja representação para a mecânica quântica de muitas partículas é a mais apropriada. Estendemos seu desenvolvimento até a formulação das integrais de caminho fermiônicas presentes na seção 3.3. Visando melhorar a compreensão dos assuntos abordados anteriormente, é importante utilizar algumas propriedades relacionadas a álgebra de Grassmann, esta álgebra será discutida em detalhes no Apêndice A. Como base bibliográfica para a primeira parte do capítulo 3 foi utilizado o tratamento de Negele e Orland (1988), que discute os métodos teóricos e físicos desenvolvidos para sistemas quânticos de muitos corpos.

A técnica desenvolvida na seção 3.3 será utilizada para caracterizar o vidro de spin fermiônico [31], e descrevê-lo detalhadamente na seção 3.4. Baseando-se no

método das integrais de caminho fermiônicas e num modelo quântico de spins interagentes, os efeitos quânticos na transição vidro de spin são igualmente investigados.

3.1 Segunda Quantização

Um formalismo análogo à representação de coordenadas, para a mecânica quântica, foi desenvolvido para sistemas quânticos de muitas partículas idênticas. Nestes sistemas com um número infinito de graus de liberdade são definidos operadores de criação (c_α^\dagger) e destruição (c_α) que especificam o estado de cada partícula. Quando os operadores de interesse físico são expressos em termos destes operadores de criação e destruição dizemos que são representados em segunda quantização. Estes operadores criam e destrõem partículas em um estado específico, que podemos chamar de α e representam o estado do sistema. Em virtude disso, necessitamos construir uma base onde será desenvolvida a álgebra destes operadores, ou seja, funções de onda sobre as quais eles atuam. As funções de onda são expressas como produtos tensoriais de funções de ondas de partículas únicas ($|\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N\rangle = |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \otimes \dots \otimes |\alpha_N\rangle$) e pertencem ao espaço de Hilbert H_N ($H_N = H \otimes H \otimes \dots \otimes H$) onde H é o espaço de Hilbert para uma partícula. Fisicamente, o espaço H_N é gerado por combinações lineares dos produtos de funções de onda de partícula única

$$\Psi_N = \sum_{i=1}^N a_i \phi_{\alpha_1}(\vec{r}_1) \phi_{\alpha_2}(\vec{r}_2) \dots \phi_{\alpha_N}(\vec{r}_N) . \quad (3.1)$$

O estado do sistema poderá ser representado por uma combinação linear das funções de ondas não interagentes. Sendo as partículas indistinguíveis umas das outras e o número total de estados ocupados igual ao número de partículas N do sistema as informações essenciais estarão contidas no número de partículas que ocupam cada estado.

Um férmion é uma partícula com um spin semi-inteiro, como o elétron (com spin $1/2$), por exemplo. Em se tratando de sistemas fermiônicos, o princípio de exclusão de Pauli requer que a função de onda mude de sinal na troca de qualquer par de

férmions, ou seja,

$$\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) = -\psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1) . \quad (3.2)$$

A consequência é que não mais que um férmion pode ocupar um dado estado quântico, sendo admissível somente que o estado esteja vazio, com uma única partícula, ou duas partículas com spins contrários. O espaço fermiônico de Hilbert \mathcal{F}_N^1 é formado pelas funções de onda que apresentam estas propriedades de anti-simetria.

A ação destes operadores c_α^\dagger e c_α sobre um determinado estado $|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle$ que pertence ao espaço \mathcal{F}_N , corresponde a uma partícula no estado α_1 , uma no estado α_2 , e assim por diante até por fim uma no estado α_N . É conveniente que o estado esteja em uma base ortonormal, cujas relações dos operadores atuando nestes estados é dada por

$$c_\alpha^\dagger |\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle = \begin{cases} |\alpha \alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle & \text{se o estado } |\alpha\rangle \notin |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle \\ 0 & \text{se o estado } |\alpha\rangle \in |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle \end{cases} , \quad (3.3)$$

onde fisicamente o operador c_α^\dagger adiciona uma partícula no estado $|\alpha\rangle$, no estado em que este opera, e

$$c_{\alpha_p} |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle = \begin{cases} |\alpha_1 \cdots \alpha_{p-1} \alpha_{p+1} \cdots \alpha_N\rangle & \text{se } |\alpha_p\rangle \in |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle \\ 0 & \text{se } |\alpha_p\rangle \notin |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle \end{cases} , \quad (3.4)$$

que ao atuar em qualquer estado aniquila a partícula deste estado. Na ausência de partículas no estado $|\alpha\rangle$, c_α será zero.

O operador c_α^\dagger atua sobre o espaço \mathcal{F}_{N+1} , não operando dentro de um espaço \mathcal{F}_N , como vê-se na equação (3.3), consequentemente, definimos o espaço de Fock \mathcal{F} como a soma direta dos espaços fermiônicos:

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \cdots \oplus \mathcal{F}_N \oplus \cdots . \quad (3.5)$$

Também é útil definirmos o estado de vácuo, denotado por $|0\rangle$, que representa um estado sem partículas, sendo $\mathcal{F}_0 = |0\rangle$ e $\mathcal{F}_1 = H$. Verificamos com a equação (3.3) que qualquer elemento da base poderá ser gerado por sucessivas ações do operador

¹ \mathcal{F}_N é o espaço que contém as funções de onda anti-simétricas do espaço H_N , definido como sendo simplesmente o N-ésimo produto tensorial de partícula única no espaço de Hilbert H .

de criação no vácuo, como mostra a expressão $|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n\rangle = c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger \cdots c_{\alpha_n}^\dagger |0\rangle$. Convenientemente utilizaremos $\{|0\rangle, |\alpha_1\rangle, |\alpha_1 \alpha_2\rangle, \cdots\}$ como base para o espaço \mathcal{F} .

As propriedades de anti-simetria dos estados de muitas partículas, ou seja, das funções de onda de um sistema fermiônico, impõem relações de anticomutação entre os operadores de criação e destruição, no formalismo de segunda quantização. Para qualquer estado $|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n\rangle$ e qualquer estado de partícula única $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ encontramos uma relação cuja atuação é válida para qualquer estado

$$\begin{aligned} c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n\rangle &= |\alpha \beta \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n\rangle \\ &= \zeta |\beta \alpha \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n\rangle \\ &= \zeta c_\beta^\dagger c_\alpha^\dagger |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n\rangle, \end{aligned} \quad (3.6)$$

e

$$\begin{aligned} c_\alpha c_\beta^\dagger |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n\rangle &= c_\alpha |\beta \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n\rangle \\ &= \delta_{\alpha\beta} |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n\rangle + \sum_{i=1}^n \zeta^i \delta_{\alpha\alpha_i} |\beta \alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_i \cdots \alpha_n\rangle \\ &= \delta_{\alpha\beta} |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n\rangle + \zeta c_\beta^\dagger c_\alpha |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n\rangle \\ &= (\delta_{\alpha\beta} + \zeta c_\beta^\dagger c_\alpha) |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n\rangle, \end{aligned} \quad (3.7)$$

com

$$c_\beta^\dagger c_\alpha |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n\rangle = \sum_{i=1}^n \zeta^{i-1} \delta_{\alpha\alpha_i} |\beta \alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_i \cdots \alpha_n\rangle, \quad (3.8)$$

sendo $\zeta = -1$ para férmions, satisfazendo a equação do operador

$$\begin{aligned} c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger &= \zeta c_\beta^\dagger c_\alpha^\dagger, & \text{e} \\ c_\alpha c_\beta^\dagger &= \zeta c_\beta^\dagger c_\alpha + \delta_{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Assim as relações podem ser satisfeitas da seguinte forma

$$\{c_\alpha^\dagger, c_\beta^\dagger\} = c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger - \zeta c_\beta^\dagger c_\alpha^\dagger = c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger - (-1) c_\beta^\dagger c_\alpha^\dagger = c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger + c_\beta^\dagger c_\alpha^\dagger = 0, \quad (3.10)$$

$$\{c_\alpha, c_\beta\} = c_\alpha c_\beta - \zeta c_\beta c_\alpha = c_\alpha c_\beta - (-1) c_\beta c_\alpha = c_\alpha c_\beta + c_\beta c_\alpha = 0, \quad (3.11)$$

e

$$\{c_\alpha, c_\beta^\dagger\} = c_\alpha c_\beta^\dagger - \zeta c_\beta^\dagger c_\alpha = c_\alpha c_\beta^\dagger - (-1) c_\beta^\dagger c_\alpha = c_\alpha c_\beta^\dagger + c_\beta^\dagger c_\alpha = \delta_{\alpha\beta} \quad (3.12)$$

levando em conta que definimos o operador c_α como adjunto do operador c_α^\dagger , satisfazendo uma relação adjunta à encontrada em (3.9). A sobreposição de dois estados fermiônicos, uma base ortonormal e seu estado antisimétrico, poderá, enfim, ser calculado da forma

$$\langle \beta_1 \cdots \beta_N | \alpha_1 \cdots \alpha_M \rangle = \begin{cases} \sum_p (-1)^p \langle \beta_1 | \alpha_{p1} \rangle \cdots \langle \beta_N | \alpha_{pN} \rangle & \text{para } N = M \\ 0 & \text{para } N \neq M \end{cases}, \quad (3.13)$$

onde as possíveis permutações são dadas por p .

3.2 Estados Coerentes

Os estados coerentes são definidos como auto-estados dos operadores de criação e destruição. Sua base é análoga a base dos auto-estados dos operadores de posição e momento em mecânica quântica. Sua idéia é similar à dedução das integrais de caminho de Feynman, todavia, agora determinando as integrais de caminho fermiônicas para sistemas de muitos corpos.

Para encontrar os auto-estados dos operadores de criação e destruição, usando os mesmos princípios das integrais de Feynman, e tratando o problema fermiônico numa abordagem de segunda quantização, nós podemos expandir um vetor geral do espaço de Fock, denotado por $|\phi\rangle$, na forma

$$|\phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\alpha_1 \cdots \alpha_n} \phi_{\alpha_1 \cdots \alpha_n} |\alpha_1 \cdots \alpha_n\rangle, \quad (3.14)$$

onde $|\phi\rangle$ tem necessariamente seu componente com um número mínimo de partículas. Ao aplicarmos o operador de criação no vetor, o número mínimo de partículas em $|\phi\rangle$ é acrescido por uma partícula. Assim, o estado resultante poderá não ser um múltiplo do estado original e, portanto, um operador de criação não pode ter um auto-estado no espaço de Fock. Por outro lado, obtemos sucesso na construção de

um auto-estado do operador destruição, a ação deste operador sobre vetor (3.14) decresce o número máximo de partículas por um. Como $|\phi\rangle$ pode conter componentes com todos os números de partículas, a priori nada proíbe a existência de auto-estados do operador de destruição. Portanto, os estados coerentes são definidos como auto-estados unicamente dos operadores de destruição.

Os operadores fermiônicos apresentam relações de anticomutação que são muito relevantes na obtenção dos estados coerentes fermiônicos, definidas nas relações encontradas nas equações (3.11), (3.10) e (3.12). A fim de acomodar a característica incomum de anticomutação dos operadores precisamos introduzir variáveis anticomutadoras, denominadas variáveis de Grassmann (ver Apêndice A). Logo, para construir estados coerentes para férmions, que são auto estados do operador destruição, é necessário usar relações de anticomutação. A álgebra relacionada a estas relações é chamada álgebra de Grassmann $\{\phi_\alpha, \phi_\alpha^*\}$, que traz a seguinte associação entre os operadores:

$$c_\alpha \leftrightarrow \phi_\alpha \quad ; \quad c_\alpha^\dagger \leftrightarrow \phi_\alpha^* \quad ; \quad (3.15)$$

e especificando as relações de comutação para tratar expressões contendo a combinação das variáveis com os operadores, teremos:

$$(\phi_\alpha c_\alpha)^\dagger = c_\alpha^\dagger \phi_\alpha^* \quad ; \quad (\phi_\alpha^* c_\alpha^\dagger)^\dagger = c_\alpha \phi_\alpha \quad . \quad (3.16)$$

Após definirmos uma álgebra de Grassmann para a construção dos estados fermiônicos, podemos então construir o espaço generalizado de Fock, como o espaço constituído pelo conjunto de combinações lineares de estados pertencentes ao espaço de Fock \mathcal{F} , com coeficientes nas variáveis de Grassmann. Qualquer vetor $|\psi\rangle$ no espaço generalizado de Fock pode ser escrito como

$$|\psi\rangle = \sum_\alpha \eta_\alpha |\phi_\alpha\rangle, \quad (3.17)$$

onde η_α representam variáveis de Grassmann e $|\phi_\alpha\rangle$ vetores do espaço de Fock.

Definimos um estado coerente fermiônico, pertencente ao espaço generalizado de Fock, na forma:

$$|\phi\rangle = e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha c_\alpha^\dagger} |0\rangle = \prod_\alpha (1 - \phi_\alpha c_\alpha^\dagger) |0\rangle, \quad (3.18)$$

onde ϕ_α são variáveis de Grassmann. A segunda igualdade da equação acima foi obtida através do fato de que qualquer função analítica definida sobre a álgebra de Grassmann é linear (propriedade A.5).

Verificando se a equação (3.18) define um estado coerente, temos

$$c_\beta|\phi\rangle = c_\beta \prod_{\alpha} (1 - \phi_\alpha c_\alpha^\dagger)|0\rangle, \quad (3.19)$$

usando a relação $\phi_\alpha c_\alpha^\dagger \phi_\beta c_\beta^\dagger = \phi_\beta c_\beta^\dagger \phi_\alpha c_\alpha^\dagger$ para $\alpha \neq \beta$, e ainda as propriedades de anticomutação, $c_\beta|\phi\rangle$ assume a forma

$$c_\beta|\phi\rangle = \prod_{\alpha \neq \beta} (1 - \phi_\alpha c_\alpha^\dagger) c_\beta (1 - \phi_\beta c_\beta^\dagger) |0\rangle, \quad (3.20)$$

reescrevendo o último termo e utilizando a relação $\phi_\beta \phi_\beta = 0$, temos

$$\begin{aligned} c_\beta (1 - \phi_\beta c_\beta^\dagger) |0\rangle &= 0 + \phi_\beta c_\beta c_\beta^\dagger |0\rangle = \phi_\beta |0\rangle \\ &= \phi_\beta (1 - \phi_\beta c_\beta^\dagger) |0\rangle. \end{aligned} \quad (3.21)$$

O estado $|\phi\rangle$ representa um estado coerente se a igualdade $c_\beta|\phi\rangle = \phi_\beta|\phi\rangle$ for encontrada. Efetuando uma substituição da expressão (3.21) em (3.20), encontramos

$$\begin{aligned} c_\beta|\phi\rangle &= \prod_{\alpha \neq \beta} (1 - \phi_\alpha c_\alpha^\dagger) \phi_\beta (1 - \phi_\beta c_\beta^\dagger) |0\rangle \\ &= \phi_\beta \prod_{\alpha} (1 - \phi_\alpha c_\alpha^\dagger) |0\rangle \\ &= \phi_\beta |\phi\rangle, \end{aligned} \quad (3.22)$$

e portanto, o vetor (3.18) representa um estado coerente.

Para expandir qualquer vetor do espaço generalizado de Fock em termos dos estados coerentes utilizamos o operador unitário \mathcal{I} . Este operador nos ajuda na dedução das integrais de caminho fermiônicas, isto é, obter através dos estados coerentes uma integral funcional para o operador de muitos corpos. Utilizando as variáveis de Grassmann ϕ_α^* , ϕ_α e os estados coerentes $|\phi\rangle$ e $\langle\phi|$, podemos escrever o operador unitário da seguinte forma:

$$\mathcal{I} = \int \prod_{\alpha} d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_{\alpha} \phi_\alpha^* \phi_\alpha} |\phi\rangle \langle\phi|. \quad (3.23)$$

Tomando dois vetores quaisquer da base \mathcal{F} , onde a igualdade abaixo seja válida

$$\langle \alpha_1 \cdots \alpha_n | \mathcal{I} | \beta_1 \cdots \beta_m \rangle = \langle \alpha_1 \cdots \alpha_n | \beta_1 \cdots \beta_m \rangle , \quad (3.24)$$

podemos dizer que \mathcal{I} é unitário, e a identidade (3.24) se confirma para os demais vetores do espaço, os quais são combinações lineares dos elementos da base \mathcal{F} . A expressão encontrada para o lado esquerdo de (3.24) usa a propriedade do autovalor dos estados coerentes (3.21), pela qual obtemos

$$\langle \alpha_1 \cdots \alpha_n | \phi \rangle = \langle 0 | c_{\alpha_n} \cdots c_{\alpha_1} | \phi \rangle = \phi_{\alpha_n} \cdots \phi_{\alpha_1} , \quad (3.25)$$

e as equações adjuntas análogas com a forma

$$\langle \phi | \beta_1 \cdots \beta_m \rangle = \phi_{\beta_1}^* \cdots \phi_{\beta_m}^* . \quad (3.26)$$

Deste modo, temos

$$\langle \alpha_1 \cdots \alpha_n | \mathcal{I} | \beta_1 \cdots \beta_m \rangle = \int \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha}^* d\phi_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}} \langle \alpha_1 \cdots \alpha_n | \phi \rangle \langle \phi | \beta_1 \cdots \beta_m \rangle , \quad (3.27)$$

e utilizando em conjunto as equações (3.25) e (3.26), a equação (3.27) poderá ser escrita na forma

$$\langle \alpha_1 \cdots \alpha_n | \mathcal{I} | \beta_1 \cdots \beta_m \rangle = \int \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha}^* d\phi_{\alpha} (1 - \phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}) \phi_{\alpha_n} \cdots \phi_{\alpha_1} \phi_{\beta_1}^* \cdots \phi_{\beta_m}^* . \quad (3.28)$$

O resultado obtido para o cálculo da integral na expressão (3.28) leva em conta dois casos que são: $n \neq m$ e $n = m$. No caso $n \neq m$, para um estado particular δ (ver equações (A.1), (4.5) e (A.9)), os resultados se assemelham a

$$\int d\phi_{\delta}^* d\phi_{\delta} (1 - \phi_{\delta}^* \phi_{\delta}) \begin{cases} \phi_{\delta}^* \\ \phi_{\delta} \end{cases} = \begin{cases} 0 \\ 0 \end{cases} , \quad (3.29)$$

se $n \neq m$ a solução é nula, portanto $\langle \alpha_1 \cdots \alpha_n | \mathcal{I} | \beta_1 \cdots \beta_m \rangle = 0$. As possíveis integrais, no caso de $n = m$, com solução para um estado particular δ , são escritas

$$\int d\phi_{\delta}^* d\phi_{\delta} (1 - \phi_{\delta}^* \phi_{\delta}) \begin{cases} \phi_{\delta}^* \phi_{\delta} \\ \phi_{\delta} \phi_{\delta}^* \\ 1 \end{cases} = \begin{cases} 1 \\ 0 \\ 1 \end{cases} . \quad (3.30)$$

A integral na equação (3.28) será distinta de zero se cada estado δ estiver ocupado ou desocupado simultaneamente em $\langle \alpha_1 \cdots \alpha_m |$ e $|\beta_1 \cdots \beta_n\rangle$, o que requer que $n = m$

e que $\{\alpha_1 \cdots \alpha_n\}$ seja alguma permutação P de $\{\beta_1 \cdots \beta_n\}$. Neste caso, a integral é calculada facilmente escrevendo $\phi_{\alpha_n} \cdots \phi_{\alpha_1} \phi_{\beta_1}^* \cdots \phi_{\beta_n}^* = (-1)^P \phi_{\alpha_n} \cdots \phi_{\alpha_1} \phi_{\alpha_1}^* \cdots \phi_{\alpha_n}^*$, onde $(-1)^P$ foi acrescentado para satisfazer as relações de anticomutação ocorridas em $\phi_{\beta_1}^* \cdots \phi_{\beta_n}^*$. Anticomutando as variáveis de Grassmann um número par de vezes, deixamos $\phi_{\alpha_n} \cdots \phi_{\alpha_1} \phi_{\alpha_1}^* \cdots \phi_{\alpha_n}^*$ em uma forma equivalente a (3.30), tal que $\phi_{\alpha_n} \cdots \phi_{\alpha_1} \phi_{\alpha_1}^* \cdots \phi_{\alpha_n}^* = \phi_{\alpha_1} \phi_{\alpha_1}^* \phi_{\alpha_2} \phi_{\alpha_2}^* \cdots \phi_{\alpha_n} \phi_{\alpha_n}^*$, com (3.28) assumindo como resultado a expressão:

$$\langle \alpha_1 \cdots \alpha_n | \mathcal{I} | \beta_1 \cdots \beta_m \rangle = \begin{cases} (-1)^P & \text{se } n = m \text{ e } \{\alpha_1 \cdots \alpha_n\} = \{\beta_{P1} \cdots \beta_{Pn}\} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (3.31)$$

O lado direito da equação (3.24) pode ser calculado de acordo com a expressão (3.13), quando consideramos a ortonormalidade dos vetores da base \mathcal{F} . Então, encontramos

$$\langle \alpha_1 \cdots \alpha_n | \beta_1 \cdots \beta_m \rangle = \begin{cases} (-1)^P & \text{se } n = m \text{ e } \{\alpha_1 \cdots \alpha_n\} = \{\beta_{P1} \cdots \beta_{Pn}\} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (3.32)$$

Obtemos dessa forma uma identidade quando comparamos as equações (3.31) e (3.32), e concluímos que \mathcal{I} é um operador unitário.

Um resultado prático é o cálculo do elemento de matriz de um operador $U(c_\alpha^\dagger, c_\alpha)$, em que os operadores de criação estão à esquerda dos de destruição, sendo $|\phi\rangle$ e $|\phi'\rangle$ estados coerentes, dado pela expressão

$$\langle \phi | U(c_\alpha^\dagger, c_\alpha) | \phi' \rangle = \langle \phi | \phi' \rangle U(\phi_\alpha^*, \phi'_\alpha) \quad (3.33)$$

Através da equação (3.18), obtemos o elemento de matriz do operador $U(c_\alpha^\dagger, c_\alpha)$ em termos das variáveis de Grassmann ϕ_α^* e ϕ'_α , dado por

$$\langle \phi | U(c_\alpha^\dagger, c_\alpha) | \phi' \rangle = e^{\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi'_\alpha} U(\phi_\alpha^*, \phi'_\alpha) \quad (3.34)$$

3.3 Integrais de Caminho Fermiônicas

O uso da integral de caminho de Feynmann pode ser estendido para sistemas de muitas partículas. Esta técnica nos permite escrever a função de partição em um tratamento de segunda quantização, ou seja, descrita em termos dos operadores de criação e destruição, onde estes operadores são substituídos por variáveis

de Grassmann. Para o caso de fermions que possui operadores que anticomutam, estabelece-se de modo natural o ordenamento temporal dos mesmos. Esta propriedade sera utilizada no desenvolvimento dos calculos.

Inicialmente, escrevemos a funcao de particao no ensemble grande canonico, que descreve um sistema em equilıbrıo com um reservatorio simultaneamente de partıculas e termico, com o qual ele pode trocar partıculas. A descricao dos estados em que o sistema e o reservatorio possuem energia total e numero de partıculas fixas, nos leva a uma probabilidade de observar o sistema com energia E e numero de partıculas N dado por $\exp[-\beta(E - \mu N)]$. Alem da energia media do sistema, o numero medio de partıculas e fixo e controlado pelo potencial quımico μ . Representamos a funcao de particao pela expressao:

$$Z = Tr \exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})] , \quad (3.35)$$

onde a energia do sistema e dada pelo operador hamiltoniano escrito em segunda quantizacao $\hat{H} = \hat{H}(c_\alpha^\dagger, c_\alpha)$, μ o potencial quımico, β o inverso da temperatura e $\hat{N} = \sum_\alpha c_\alpha^\dagger c_\alpha$ o operador numero, cuja soma em α percorre todos estados.

O estado $\{|n\rangle\}$ define uma base ortonormal no espaco de Fock. Podemos entao, calcular o traco, ou seja, a soma dos elementos da matriz diagonal, elementos estes que sao os autovalores do operador atuando em uma base discreta, obtemos

$$Z = \sum_n \langle n | \exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})] | n \rangle . \quad (3.36)$$

Construindo a funcao de particao com base nos estados coerentes fermionicos, introduzimos o operador unitario (3.23), definido anteriormente na equacao (3.36), e obtemos

$$Z = \sum_n \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \langle n | \phi \rangle \langle \phi | \exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})] | n \rangle . \quad (3.37)$$

Os estados coerentes fermionicos sao combinacoes lineares dos elementos da base do espaco \mathcal{F} , cujos coeficientes contem numeros de Grassmann. Devido as propriedades de anticomutacao destes numeros, temos

$$\langle n | \phi \rangle \langle \phi' | n \rangle = \langle -\phi' | n \rangle \langle n | \phi \rangle . \quad (3.38)$$

Reescrevendo a equação (3.37), fazendo uso da expressão (3.38), chegamos em uma função de partição escrita na forma

$$\begin{aligned} Z &= \sum_n \int \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha}^* d\phi_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}} \langle -\phi | \exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})] | n \rangle \langle n | \phi \rangle \\ &= \int \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha}^* d\phi_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}} \langle -\phi | \exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})] | \phi \rangle, \end{aligned} \quad (3.39)$$

na base dos estados coerentes. Os operadores de segunda quantização seguem a notação $\hat{O}(c^{\dagger}, c)$, de forma que o ordenamento seja normal, o que significa que os operadores de criação ficam à esquerda dos de destruição. Desse modo, supondo $\hat{H}(c^{\dagger}, c)$ um operador em ordem normal, calculamos a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} e^{\varepsilon \hat{H}(c^{\dagger}, c)} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[\varepsilon \hat{H}(c^{\dagger}, c)]^n}{n!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varepsilon^n : [\hat{H}(c^{\dagger}, c)]^n :}{n!} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\varepsilon^n [\hat{H}(c^{\dagger}, c)]^n}{n!} - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\varepsilon^n : [\hat{H}(c^{\dagger}, c)]^n :}{n!} \\ &= : e^{\varepsilon \hat{H}(c^{\dagger}, c)} : + \varepsilon^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varepsilon^n}{(n+2)!} \{ [\hat{H}(c^{\dagger}, c)]^{n+2} - : [\hat{H}(c^{\dagger}, c)]^n : \}. \end{aligned} \quad (3.40)$$

A expressão (3.40) nos fornece os elementos de matriz de um operador $e^{\varepsilon \hat{H}(c^{\dagger}, c)}$ na base dos estados coerentes, dado por

$$\langle \phi | e^{\varepsilon \hat{H}(c^{\dagger}, c)} | \phi' \rangle = \langle \phi | \left[: e^{\varepsilon \hat{H}(c^{\dagger}, c)} : + O(\varepsilon^2) \right] | \phi' \rangle, \quad (3.41)$$

onde a equação (3.34) nos auxilia para encontrarmos a igualdade abaixo

$$\langle \phi | e^{\varepsilon \hat{H}(c^{\dagger}, c)} | \phi' \rangle = e^{\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \phi'_{\alpha}} e^{\sum_{\alpha} \varepsilon H(\phi_{\alpha}^*, \phi'_{\alpha})} + O(\varepsilon^2), \quad (3.42)$$

com aproximação na ordem de ε^2 . O operador $H(\phi_{\alpha}^*, \phi'_{\alpha})$ tornou-se então, uma função das variáveis de Grassmann ϕ_{α}^* e ϕ'_{α} .

Este resultado encontrado na equação (3.42), como alternativa para o cálculo da função de partição, se torna viável se o fator β da equação (3.39) assumir valores da ordem de ε , ou seja, subdividindo β em pequenos intervalos, que podemos associar a tempos imaginários, para que as relações de comutação dos operadores quânticos, presentes no hamiltoniano, possam ser negligenciadas. Se compararmos a função

de partição (3.39) com a soma dos elementos da diagonal da matriz do operador evolução temporal:

$$U(\phi_\alpha^* t_f; \phi_\alpha t_i) = \langle \phi_\alpha t_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(c^\dagger, c)(t_f - t_i)} | \phi_\alpha t_i \rangle, \quad (3.43)$$

vemos que a equação (3.43) se assemelha ao último termo da equação (3.39), quando impomos as condições antiperiódicas de contorno de modo a termos

$$\phi_{\alpha, t_i} = \phi_\alpha; \quad \phi_{\alpha, t_f}^* = -\phi_\alpha^*; \quad (3.44)$$

tornando possível identificar $\beta = \frac{i(t_f - t_i)}{\hbar}$ como sendo uma unidade de tempo imaginário. Desse modo, reescrevemos a função de partição como segue

$$Z = \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \langle -\phi | \exp[-(\tau_f - \tau_i)(\hat{H} - \mu \hat{N})] | \phi \rangle, \quad (3.45)$$

sendo $\beta = \tau_f - \tau_i$, onde τ representa it com as unidades redimensionadas para $\hbar = 1$. Podemos idealizar o intervalo de tempo imaginário $\beta = \tau_f - \tau_i$ como a soma de vários intervalos de tempo de tamanhos ε , conseguidas quando dividimos o intervalo em M partes iguais:

$$\varepsilon = \frac{\tau_f - \tau_i}{M}. \quad (3.46)$$

Quando fazemos $\tau_i = 0$, temos $\tau_f = M\varepsilon$, a equação (3.45) será representada na forma

$$Z = \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \langle -\phi | \left(\exp[-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})] \right)^M | \phi \rangle. \quad (3.47)$$

Introduzido $M - 1$ vezes o operador unitário (3.23) e assumindo que M é grande, podemos separar cada etapa da evolução do operador tempo imaginário da equação (3.47), estabelecendo um índice k ($k = 1, 2, \dots, M - 1$), que expressa a ordem cronológica. Portanto, a função de partição será

$$\begin{aligned} Z &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \int \prod_{k=1}^{M-1} \prod_\alpha d\phi_{\alpha, k}^* d\phi_{\alpha, k} e^{-\sum_{k=1}^{M-1} \sum_\alpha \phi_{\alpha, k}^* \phi_{\alpha, k}} \\ &\times \langle -\phi | \exp[-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})] | \phi_{M-1} \rangle \langle \phi_{M-1} | \cdots \\ &\times \cdots | \phi_1 \rangle \langle \phi_1 | \exp[-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})] | \phi \rangle. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Impondo condições de contorno antiperiódicas, dadas por

$$\phi_{\alpha,0} = \phi_{\alpha}; \quad \phi_{\alpha,M}^* = -\phi_{\alpha}^* \quad (3.49)$$

e definindo a variável $\phi_{\alpha} \equiv -\phi_{\alpha,M}$, a equação (3.48) proposta, é definida como

$$\begin{aligned} Z &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} e^{-\sum_{k=1}^M \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k}} \\ &\times \langle -\phi | \exp[-\varepsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})] | \phi_{M-1} \rangle \prod_{k=2}^{M-1} \langle \phi_k | \exp[-\varepsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})] | \phi_{k-1} \rangle \\ &\times \langle \phi_1 | \exp[-\varepsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})] | \phi \rangle. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Utilizamos a aproximação (3.42) para obter um resultado correto até segunda ordem em ε . Devido a anticomutatividade dos operadores de criação e destruição na equação (3.50) não é permitido calcular os elementos de matriz diretamente. Supomos também que $\hat{H}(c^{\dagger}, c)$ está em ordem normal, possibilitando a dedução da integral de caminho. Temos para (3.50) a seguinte aproximação:

$$\begin{aligned} Z &\approx \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} e^{-\sum_{k=1}^M \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k}} \\ &\times \langle -\phi | : \exp[-\varepsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})] : | \phi_{M-1} \rangle \exp \left\{ \sum_{k=2}^{M-1} \sum_{\alpha} [\phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1} \right. \\ &\left. + \varepsilon (H(\phi_{\alpha,k}^*; \phi_{\alpha,k-1}) - \mu\phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1}) \right\} \langle \phi_1 | : \exp[-\varepsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})] : | \phi \rangle, \end{aligned} \quad (3.51)$$

que, com as condições antiperiódicas de contorno aplicadas, se torna

$$\begin{aligned} Z &\approx \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} e^{-\sum_{k=1}^M \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k}} \\ &\times \exp \left\{ \sum_{k=2}^M \sum_{\alpha} [\phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1} - \varepsilon (H(\phi_{\alpha,k}^*; \phi_{\alpha,k-1}) - \mu\phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1})] \right\} \\ &\times \exp \left\{ \sum_{\alpha} [-\phi_{\alpha,1}^* \phi_{\alpha,M} - \varepsilon (H(\phi_{\alpha,1}^*; -\phi_{\alpha,M}) + \mu\phi_{\alpha,1}^* \phi_{\alpha,M})] \right\}. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Contudo, se evidenciarmos ε , desprezarmos os termos da ordem de ε^2 , utilizarmos a definição $\phi_{\alpha} \equiv -\phi_{\alpha,M}$ e finalmente, reagruparmos alguns termos, podemos

reescrever a última equação:

$$Z \approx \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} \times \exp \left\{ -\varepsilon \sum_{k=1}^M \sum_{\alpha} \left[\phi_{\alpha,k}^* \left(\frac{\phi_{\alpha,k} - \phi_{\alpha,k-1}}{\varepsilon} - \mu \phi_{\alpha,k-1} \right) + H(\phi_{\alpha,k}^*; \phi_{\alpha,k-1}) \right] \right\}, \quad (3.53)$$

Quando utilizamos a expressão (3.42) na equação (3.53), os operadores c^\dagger e c foram substituídos por variáveis de Grassmann, tornando-se necessário desenvolver técnicas para solucionar integrais sobre essas variáveis (ver Apêndice A). A expressão (3.53) poderá ter uma notação de trajetória, associando-se $\phi_{\alpha}^*(\tau)$ e $\phi_{\alpha}(\tau)$ com variáveis deslocadas por um passo $\phi_{\alpha,k}^*$ e $\phi_{\alpha,k-1}$, respectivamente, que vai nos permitir reescrever $H(\phi_{\alpha,k}^*; \phi_{\alpha,k-1})$ por $H(\phi_{\alpha}^*(\tau); \phi_{\alpha}(\tau))$. No limite de M tendendo ao infinito, o somatório em k poderá ser substituído por uma integral em τ , com a diferença dada por

$$\frac{\phi_{\alpha,k} - \phi_{\alpha,k-1}}{\varepsilon} = \frac{\phi_{\alpha}(\tau) - \phi_{\alpha}(\tau - \varepsilon)}{\varepsilon} = \frac{\partial}{\partial \tau} \phi(\tau). \quad (3.54)$$

Desse modo, obtemos para a função de partição a equação:

$$Z = \int_{\phi(\beta) = -\phi(0)} D(\phi_{\alpha}^*(\tau) \phi_{\alpha}(\tau)) \times \exp \left(- \int_0^{\beta} d\tau \sum_{\alpha} \left\{ \phi_{\alpha}^*(\tau) \left[\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right] \phi_{\alpha}(\tau) + H(\phi_{\alpha}^*(\tau); \phi_{\alpha}(\tau)) \right\} \right), \quad (3.55)$$

onde a primeira relação é dada pela notação:

$$\int_{\phi(\beta) = -\phi(0)} D(\phi_{\alpha}^*(\tau) \phi_{\alpha}(\tau)) = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k}. \quad (3.56)$$

Os limites de integração nos remetem às condições antiperiódicas de contorno para sistemas fermiônicos.

Para ilustrar algumas aplicações das integrais de caminho fermiônicas apresentaremos na próxima seção um estudo de revisão relativo ao vidro de spin fermiônico (Theumann e Vieira Gusmão, 1984 e Theumann et al., 2002) que utiliza a equação (3.55) na obtenção da função de partição.

3.4 Vidro de Spin Fermiônico em duas sub-redes

O modelo de vidro de spin SK foi reconhecido por muito tempo como o modelo mais apropriado da descrição de campo médio do vidro de spin. Bray e Moore (1980a) aplicaram o método das réplicas no modelo SK, generalizado para sistemas vidro de spin quânticos, ou seja, utilizando operadores quânticos para descrever os spins. No trabalho citado foram investigadas as propriedades do modelo Heisenberg quântico, cujas interações de troca são de longo alcance, acoplando todos os spins do sistema e que segue uma distribuição de probabilidades gaussiana. Através do método das réplicas, da aproximação estática e da transformação de Hubbard-Stratonovich (Sherrington, 1971), o problema efetivo foi reduzido ao de um único sítio. Usando a aproximação estática as funções de correlação spin-spin tornam-se independentes do tempo, fornecendo um limite superior para o potencial termodinâmico e na localização da temperatura de transição ao vidro de spin.

Os operadores de spins \vec{S}_j obedecem padrões nas relações de comutação, dados por

$$\vec{S}_j \times \vec{S}_k = i\delta_{j,k}\vec{S}_j, \quad (3.57)$$

onde utilizando as definições $S_j^x = S_j^+ + S_j^-$ e $S_j^y = i(-S_j^+ + S_j^-)$ (Theumann e Vieira Gusmão, 1984), podem ser reescritas e assumem as formas

$$[S_j^\pm, S_k^z] = \mp i\delta_{j,k}S_j^\pm; \quad [S_j^+, S_k^-] = 2\delta_{j,k}S_j^z. \quad (3.58)$$

Uma dependência fictícia do tempo τ nos operadores de spin $\vec{S}_j(\tau)$ foi então introduzida. Desse modo, estabelecido o ordenamento temporal da função de partição, os operadores são tratados como “c-numbers” e portanto, estes operadores serão comutáveis.

Theumann e Vieira Gusmão expressaram os operadores de spin em termos de combinações bilineares de férmions com spins, sugerindo uma formulação fermiônica que utiliza integrais de caminho (equação 3.55) para estudar o modelo de Ising quântico na obtenção do vidro de spin. Partindo deste trabalho, o hamiltoniano

estudado, para o caso de duas sub-redes, é dado pela expressão:

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{ij} J_{ij} \hat{S}_{1i}^z \hat{S}_{2j}^z - h \sum_j (\hat{S}_{1j}^z + \hat{S}_{2j}^z) . \quad (3.59)$$

Os sítios são representados pelos índices i e j e as subredes A e B pelos números 1 e 2, respectivamente; com a soma se estendendo sobre todos os N pares distintos de sítios da rede. Os operadores de spin, presentes na equação (3.59), são escritos em segunda quantização para satisfazer às relações de comutação (3.58), e expressos como combinações bilineares de férmions, dados por

$$\hat{S}_{pj}^z = \frac{1}{2} [\hat{n}_{pj\uparrow} - \hat{n}_{pj\downarrow}] , \quad (3.60)$$

onde os operadores de criação e destruição de partículas nos sítios j são dados por $\hat{n}_{pj\sigma} = c_{pj\sigma}^\dagger c_{pj\sigma}$, com σ sendo as projeções de spin ($\sigma = \uparrow$ ou \downarrow) e $p = 1$ ou 2 os índices nas duas sub-redes. Os valores assumidos por $\hat{n}_{j\sigma}$, para sistemas fermiônicos, são zero ou um. O operador fermiônico \hat{S}_{pj}^z atua sobre os estados: vazio e contendo um ou dois férmions por sítio (spins antiparalelos). Neste caso os possíveis autovalores de \hat{S}_{pj}^z serão 0 , $\pm \frac{1}{2}$ ou 0 , respectivamente. Os auto estados do operador \hat{S}_{pj}^z são quatro: vazio; \uparrow ; \downarrow ou $\uparrow\downarrow$; diferenciando-se do modelo quântico de spin de Bray e Moore, que apresenta apenas dois auto-estados com $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow [2]. Neste trabalho levamos em consideração a diferença no número de estados por sítio no cálculo da função de partição. As formulações fermiônica e quântica de spin se tornam equivalentes quando fixamos um férmion por sítio no modelo fermiônico. Restringimos, portanto, o número de férmions que podem ocupar cada sítio; para isso, usamos a restrição $\hat{n}_{pj\uparrow} + \hat{n}_{pj\downarrow} = 1$ [33] na função de partição. No trabalho de Theumann e Vieira Gusmão, o caminho sugerido foi outro ao fixar o potencial químico para que a ocupação média por sítio seja de um férmion.

Os acoplamentos aleatórios J_{ij} , são distribuídos com uma dada densidade de probabilidade que segue uma distribuição gaussiana:

$$P(J_{ij}) = \sqrt{\frac{N}{2\pi J^2}} \exp \left[\frac{-(J_{ij} + J_0/N)^2}{2J^2/N} \right] . \quad (3.61)$$

A função de partição é escrita no ensemble grande-canônico, como mostra a equação (3.35), com o traço Tr do operador sendo a soma da diagonal principal da

matriz dos autovalores, β o inverso da temperatura, o número total de partículas $\hat{N} = \sum_j (\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow})$ e μ o potencial químico. A função de partição no formalismo de integrais de caminho fermiônicas (equação 3.55) é dada neste caso por

$$\mathcal{Z} = \int D[\phi_j^* \phi_j] e^{\mathcal{A}}, \quad (3.62)$$

com a notação utilizada sendo a mesma da referência (3.56), onde acrescentamos uma soma sobre os spins, e obtemos

$$\int D[\phi_j^* \phi_j] = \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^M \prod_p \prod_j \prod_{\sigma=\uparrow, \downarrow} d\phi_{p,j,\sigma,k}^* d\phi_{p,j,\sigma,k}. \quad (3.63)$$

A ação \mathcal{A} encontrada na equação (3.62) é dada por

$$\mathcal{A} = \int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_p \sum_j \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \phi_{pj\sigma}^*(\tau) \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \mu_p \right) \phi_{pj\sigma}(\tau) - \mathcal{H}(\phi_{pj}^*(\tau), \phi_{pj}(\tau)) \right\}, \quad (3.64)$$

com $\tau = it$ representando o tempo imaginário. Os operadores fermiônicos foram substituídos, como o visto na seção 3.3, pelas variáveis de Grassmann dependentes do tempo τ : $\phi_{pj}^*(\tau)$ e $\phi_{pj}(\tau)$. As funções dependentes do tempo imaginário $\phi_{pj\sigma}(\tau)$ e $\phi_{pj\sigma}^*(\tau)$, possuem representações em séries de Fourier

$$\phi_{pj\sigma}(\tau) = \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau / \beta} \phi_{pj\sigma}(\omega_n) \quad \text{e} \quad \phi_{pj\sigma}^*(\tau) = \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n \tau / \beta} \phi_{pj\sigma}^*(\omega_n), \quad (3.65)$$

onde foram escolhidas as frequências $\omega_n = (2n+1)\pi$ de modo a satisfazer as condições de contorno anti-simétricas do problema

$$\phi_{pj\sigma}(\tau + \beta) = -\phi_{pj\sigma}(\tau) \quad , \quad \phi_{pj\sigma}^*(\tau + \beta) = -\phi_{pj\sigma}^*(\tau), \quad (3.66)$$

sendo as transformadas inversas de Fourier para as variáveis de Grassmann

$$\phi_{pj\sigma}(\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau / \beta} \phi_{pj\sigma}(\tau) \quad \text{e} \quad \phi_{pj\sigma}^*(\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{-i\omega_n \tau / \beta} \phi_{pj\sigma}^*(\tau). \quad (3.67)$$

A integral tempo imaginário τ da expressão (3.64), poderá ser substituída por um somatório sobre as frequências ω_n . Atribuímos, de modo explícito, as séries de Fourier (3.65) em cada um dos termos do hamiltoniano (3.59). Obtemos desta

transformada inversa, seguindo diretamente das propriedades de ortogonalidade, uma equação para a ação

$$\mathcal{A} = A_0 + A_{VS} , \quad (3.68)$$

sendo

$$A_0 = \sum_{pj} \sum_{\sigma, \omega_n} \phi_{j\sigma}^*(\omega_n) [i\omega_n + \beta\mu + s\beta h/2] \phi_{pj\sigma}(\omega_n) , \quad (3.69)$$

$$A_{VS} = \sum_{ij} \beta J_{ij} \sum_{\Omega_m} S_{1i}(\Omega_m) S_{2j}(-\Omega_m) , \quad (3.70)$$

e

$$S_{1j}(\Omega_m) = \sum_{\sigma, \omega_n} \sum_s \left[\frac{s}{2} \phi_{1j\sigma}^*(\omega_n + \Omega_m) \phi_{1j\sigma}(\omega_n) \right] , \quad (3.71)$$

onde $s = 1$ ou -1 se $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow , respectivamente, e ainda $S_{pj} \equiv S_{pj}^z$, com as somas sobre $\omega_n = (2n + 1)\pi$ e $\Omega_m = 2m\pi$ ($n, m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$) representando as frequências de Matsubara para férmions e bósons. Seguindo a análise do vidro de spin fermiônico feita por Theumann e Vieira Gusmão (1984), no somatório em Ω_m da equação (3.70) é mantido somente o termo onde $\Omega_m = 0$. Logo, o problema é restringido a uma aproximação estática onde se ignora as correlações no tempo dos operadores de spin.

A função de partição possui uma variável aleatória J_{ij} associada ao termo A_{VS} . Isto deverá ser considerado quando calcularmos o potencial termodinâmico. Calculando a média configuracional desse potencial temos

$$\beta\Omega = -\langle \ln(\mathcal{Z}) \rangle_{J_{ij}} , \quad (3.72)$$

logo, $\langle \dots \rangle_{J_{ij}}$ representa a média relacionada a densidade de probabilidade (3.61).

Para obtermos uma solução no cálculo da média sobre o logaritmo da função de partição da equação (3.72), devemos contornar algumas dificuldades analíticas. Isto é obtido com o auxílio do método das réplicas, que gera o potencial termodinâmico por sítio, como mostra a equação

$$\frac{\beta\Omega}{N} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[-\frac{1}{2N} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\langle \mathcal{Z}^n \rangle_{J_{ij}} - 1}{n} \right] , \quad (3.73)$$

onde a média sobre a desordem é dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(n) &\equiv \langle \mathcal{Z}^n \rangle_{J_{ij}} = \int \prod_{\alpha=1}^n D[\phi_j^{*\alpha} \phi_j^\alpha] \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{ij} dJ_{ij} \sqrt{\frac{N}{2\pi J^2}} \\ &\times \exp \left[\sum_{ij} \left(-\frac{(J_{ij} + J_0/N)^2 N}{2J^2} + \beta J_{ij} \sum_{\alpha=1}^n S_{1i}^\alpha S_{2j}^\alpha \right) + \sum_{\alpha=1}^n A_0^\alpha \right]. \end{aligned} \quad (3.74)$$

Aplicando a técnica matemática de completar quadrados na equação (3.74) e solucionando as integrais em J_{ij} , obtemos uma média sobre a função de partição replicada

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(n) &= \int \prod_{\alpha=1}^n D[\phi_j^{*\alpha} \phi_j^\alpha] \exp \left[\sum_{\alpha=1}^n A_0^\alpha \right. \\ &\quad \left. + \sum_{ij} \left(\frac{\beta^2 J^2}{2N} \left(\sum_{\alpha=1}^n S_{i1}^\alpha S_{j2}^\alpha \right)^2 - \frac{\beta J_0}{N} \sum_{\alpha=1}^n S_{i1}^\alpha S_{j2}^\alpha \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.75)$$

Que por sua vez pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(n) &= \int \prod_{\alpha=1}^n D[\phi_j^{*\alpha} \phi_j^\alpha] \exp \left\{ \sum_{\alpha=1}^n A_0^\alpha \right. \\ &\quad - \frac{\beta J_0}{2N} \sum_{\alpha=1}^n \left[\left(\sum_j S_{j1}^\alpha + \sum_j S_{j2}^\alpha \right)^2 - \sum_{p=1}^2 \left(\sum_j S_{jp}^\alpha \right)^2 \right] \\ &\quad \left. + \frac{\beta^2 J^2}{4N} \sum_{\alpha, \beta=1}^n \left[\left(\sum_j S_{j1}^\alpha S_{j1}^\beta + \sum_j S_{j2}^\alpha S_{j2}^\beta \right)^2 - \sum_{p=1}^2 \left(\sum_j S_{jp}^\alpha S_{jp}^\beta \right)^2 \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.76)$$

Linearizando o termo quadrático encontrado na equação (3.76), através da transformação Hubbard-Stratonovich (Sherrington, 1971), encontramos

$$\sqrt{\det(A)} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_j \frac{dx_j}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{1}{2} x_j A_{jk} x_k + P_j x_j \right) = \exp \left(\frac{1}{2} P_j A_{jk}^{-1} P_k \right), \quad (3.77)$$

logo, os índices repetidos denotam uma soma. O surgimento desses campos auxiliares x_j , acoplados ao sistema através da transformação, podem assumir uma interpretação relacionada com os parâmetros de ordem na formulação de integrais funcionais.

Com a ajuda da equação (3.77) o termo quadrático, presente na expressão da

função de partição replicada (3.76), poderá ser reescrito

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}(n) &= \int \prod_{\alpha=1}^n D[\phi_j^{*\alpha} \phi_j^\alpha] \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha,\beta} dQ_{\alpha\beta} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{p,\alpha,\beta} dQ_{p\alpha\beta} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha} dM_{\alpha} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \\
&\times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{p,\alpha} dM_{p\alpha} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[\sum_{\alpha=1}^n A_0^\alpha - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta}^2 - \frac{1}{2} \sum_{p\alpha\beta} Q_{p\alpha\beta}^2 - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} M_{\alpha}^2 \right. \\
&- \frac{1}{2} \sum_{p\alpha} M_{p\alpha}^2 + \frac{\beta J}{\sqrt{2N}} \sum_j \sum_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta} (S_{1j}^\alpha S_{1j}^\beta + S_{2j}^\alpha S_{2j}^\beta) \\
&+ i \frac{\beta J}{\sqrt{2N}} \sum_{p,j} \sum_{\alpha\beta} Q_{p\alpha\beta} S_{pj}^\alpha S_{pj}^\beta + i \sqrt{\frac{\beta J_0}{N}} \sum_j \sum_{\alpha} M_{\alpha} (S_{1j}^\alpha + S_{2j}^\alpha) \\
&\left. + \sqrt{\frac{\beta J_0}{N}} \sum_j \sum_{p,\alpha} M_{p\alpha} S_{pj}^\alpha \right]. \tag{3.78}
\end{aligned}$$

Trocando de ordem as integrais, juntamente com as mudanças de variáveis $Q_{\alpha\beta} = \frac{\beta J \sqrt{N}}{\sqrt{2}} q_{\alpha\beta}$, $Q_{p\alpha\beta} = \frac{\beta J \sqrt{N}}{\sqrt{2}} q_{p\alpha\beta}$, $M_{\alpha} = \sqrt{\beta J_0 N} m_{\alpha}$ e $M_{p\alpha} = \sqrt{\beta J_0 N} m_{p\alpha}$ no campo real, chega-se na expressão

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}(n) &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha\beta} dq_{\alpha\beta} \frac{\beta J \sqrt{N}}{\sqrt{4\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{p\alpha\beta} dq_{p\alpha\beta} \frac{\beta J \sqrt{N}}{\sqrt{4\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha} dm_{\alpha} \sqrt{\frac{\beta J_0 N}{2\pi}} \\
&\times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha p} dm_{\alpha p} \sqrt{\frac{\beta J_0 N}{2\pi}} \exp \left(-\frac{N \beta^2 J^2}{4} \sum_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{N \beta^2 J^2}{4} \sum_{p\alpha\beta} q_{p\alpha\beta}^2 \right. \\
&- \frac{\beta J_0 N}{2} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 - \frac{\beta J_0 N}{2} \sum_{\alpha p} m_{\alpha p}^2 \left. \right) \int \prod_{\alpha=1}^n D[\phi_j^{*\alpha} \phi_j^\alpha] \exp \left(\sum_{\alpha=1}^n A_0^\alpha \right. \\
&+ \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_j \sum_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} (S_{1j}^\alpha S_{1j}^\beta + S_{2j}^\alpha S_{2j}^\beta) + i \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{pj} \sum_{\alpha\beta} q_{p\alpha\beta} S_{pj}^\alpha S_{pj}^\beta \\
&\left. + i \beta J_0 \sum_j \sum_{\alpha} m_{\alpha} (S_{j1}^\alpha + S_{j2}^\alpha) + \beta J_0 \sum_j \sum_{\alpha p} m_{\alpha p} S_{jp}^\alpha \right), \tag{3.79}
\end{aligned}$$

onde temos o problema original reduzido a um único sítio, com interações entre as réplicas, como mostra a equação (3.79). Suprimindo a dependência do sub-índice j dos operadores, por se tratar de um sítio apenas, podemos representar a função de

partição replicada, na forma

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(n) &= \mathcal{N} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha} dm_{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha p} dm_{\alpha p} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha\beta} dq_{\alpha\beta} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha\beta p} dq_{\alpha\beta p} \\ &\times \exp \left[-N \left(\frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha} (m_{\alpha})^2 + \frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha p} (m_{\alpha p})^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\beta^2 J^2}{4} \sum_{\alpha\beta} (q_{\alpha\beta})^2 + \frac{\beta^2 J^2}{4} \sum_{\alpha\beta p} (q_{\alpha\beta p})^2 - \ln \Lambda_{\alpha} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.80)$$

onde \mathcal{N} será

$$\mathcal{N} = \left(\sqrt{\frac{\beta J_0 N}{2\pi}} \right)^n \left(\frac{\beta J \sqrt{N}}{\sqrt{4\pi}} \right)^{2n}, \quad (3.81)$$

tendo Λ_{α} definido como

$$\begin{aligned} \Lambda_{\alpha} &= \int \prod_{\alpha=1}^n D[\phi^{*\alpha} \phi^{\alpha}] \exp \left[\sum_{\alpha=1}^n A_0^{\alpha} + \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha\beta} \left(q_{\alpha\beta} (S_1^{\alpha} S_1^{\beta} + S_2^{\alpha} S_2^{\beta}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + i \sum_p q_{p\alpha\beta} S_p^{\alpha} S_p^{\beta} \right) + \beta J_0 \sum_{\alpha} \left(i m_{\alpha} (S_1^{\alpha} + S_2^{\alpha}) + \sum_p m_{\alpha p} S_p^{\alpha} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.82)$$

As soluções ponto de sela da equação (3.80) geram as equações para os parâmetros de ordem, podem ser interpretados partindo-se da equação (3.82), efetuando-se as derivadas na expressão e separando os casos em que $\alpha \neq \beta$ e $\alpha = \beta$. Neste caso encontramos o parâmetro de ordem q_p que, de acordo com Sherrington e Kirkpatrick (1975), representa a fase vidro de spin (ver equação 2.13), dado por

$$q_p^{\alpha\beta} = q_p = \frac{1}{n(n-1)} \sum_p \sum_{\alpha \neq \beta} \langle S_p^{\alpha} S_p^{\beta} \rangle \quad (3.83)$$

e

$$q_p^{\alpha\alpha} = \bar{q}_p = \frac{1}{n} \sum_p \sum_{\alpha=1}^n \langle (S_p^{\alpha})^2 \rangle. \quad (3.84)$$

Podemos calcular a magnetização por sítio m_p e a susceptibilidade estática χ_p . Definindo a magnetização na forma

$$m_p = \frac{1}{n} \sum_p \sum_{\alpha=1}^n \langle S_p^{\alpha} \rangle, \quad (3.85)$$

e introduzindo a susceptibilidade estática como um novo parâmetro de ordem, definindo-a na forma

$$\bar{\chi}_p \equiv \frac{\chi}{\beta} = \frac{1}{n} \sum_p \sum_{\alpha\beta} \langle S_p^{\alpha} S_p^{\beta} \rangle, \quad (3.86)$$

onde, utilizando as equações (3.83) e (3.84) escrevemos \bar{q}_p na forma

$$\bar{q}_p = \bar{\chi}_p + q_p . \quad (3.87)$$

Retomando a expressão (3.82) substituindo as equações (3.83) e (3.87), chegamos na expressão

$$\begin{aligned} \Lambda_\alpha &= \int \prod_{\alpha=1}^n D[\phi^{*\alpha} \phi^\alpha] \exp \left[\sum_{\alpha=1}^n A_0^\alpha - 2\beta J_0 m \sum_{\alpha} (S_1^\alpha + S_2^\alpha) + \beta J_0 \sum_p m_p \sum_{\alpha} S_p^\alpha \right. \\ &+ \beta^2 J^2 \left(q \sum_{\alpha \neq \beta} (S_1^\alpha S_1^\beta + S_2^\alpha S_2^\beta) + (q + \bar{\chi}) \sum_{\alpha} [(S_1^\alpha)^2 + (S_2^\alpha)^2] \right) \\ &\left. - \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_p \left(q_p \sum_{\alpha \neq \beta} S_p^\alpha S_p^\beta + (q_p + \bar{\chi}_p) \sum_{\alpha} (S_p^\alpha)^2 \right) \right] . \end{aligned} \quad (3.88)$$

Definidas as correlações entre os operadores de spins, nas diferentes réplicas, obtemos

$$\sum_p \sum_{\alpha \neq \beta} S_p^{z\alpha} S_p^{z\beta} = \sum_p \left[\left(\sum_{\alpha} S_p^{z\alpha} \right)^2 - \sum_{\alpha} (S_p^{z\alpha})^2 \right] , \quad (3.89)$$

o que nos permite reescrever a equação (3.88), e encontrar

$$\begin{aligned} \Lambda_\alpha &= \int \prod_{\alpha=1}^n D[\phi^{*\alpha} \phi^\alpha] \exp \left[\sum_{\alpha=1}^n A_0^\alpha - 2\beta J_0 m \sum_{\alpha} (S_1^\alpha + S_2^\alpha) + \beta J_0 m_p \sum_{\alpha} S_p^\alpha \right. \\ &+ \beta^2 J^2 \left(q \left[\left(\sum_{\alpha} S_1^\alpha \right)^2 + \left(\sum_{\alpha} S_2^\alpha \right)^2 \right] + \bar{\chi} \sum_{\alpha} [(S_1^\alpha)^2 + (S_2^\alpha)^2] \right) \\ &\left. - \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_p \left(q_p \left(\sum_{\alpha} S_p^\alpha \right)^2 + \bar{\chi}_p \sum_{\alpha} (S_p^\alpha)^2 \right) \right] . \end{aligned} \quad (3.90)$$

Utilizando, mais uma vez, a transformação Hubbard-Stratonovich (3.77) para linearizar os termos quadráticos e introduzindo dois novos campos auxiliares (z e ξ_α), os índices das réplicas desaparecem da equação (3.90):

$$\begin{aligned} \Lambda_\alpha &= \int \prod_{\alpha=1}^n D[\phi^{*\alpha} \phi^\alpha] \int_{-\infty}^{\infty} \prod_p D z_p \int_{-\infty}^{\infty} \prod_p \prod_{\alpha} D \xi_p^\alpha \\ &\times \exp \sum_{p=1}^2 \sum_{p'=2}^1 \left[\sum_{\alpha=1}^n A_0^\alpha - \beta J_0 \sum_{\alpha} S_p^\alpha m_{p'} \right. \\ &\left. + \beta J \left(\sqrt{q_{p'}} z_p \sum_{\alpha} S_p^\alpha + \sqrt{\bar{\chi}_{p'}} \sum_{\alpha} \xi_p^\alpha S_p^\alpha \right) \right] . \end{aligned} \quad (3.91)$$

Definimos as expressões acima como

$$Dz_p = dz_p \frac{e^{-z_p^2/2}}{\sqrt{2\pi}} \quad e \quad D\xi_p^\alpha = d\xi_p^\alpha \frac{e^{-\xi_p^{2\alpha}/2}}{\sqrt{2\pi}}. \quad (3.92)$$

Realizando uma soma sobre os índices α , temos

$$\Lambda_\alpha = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_p Dz_p \left[\int_{-\infty}^{\infty} \prod_p D\xi_p I(\xi, z, \lambda) \right]^n. \quad (3.93)$$

Utilizando as definições de A_0 e S encontradas nas expressões (3.69) e (3.71) podemos escrever a integral funcional da equação (3.93), da seguinte forma

$$I(\xi, z, \lambda) = \int D[\phi^* \phi] \exp \left[\sum_p \sum_{\omega_n} \sum_{\sigma, s} \phi_{p\sigma}^*(\omega_n) (i\omega_n + \beta\mu_p + s\lambda_p) \phi_{p\sigma}(\omega_n) \right], \quad (3.94)$$

onde

$$\lambda_p = -\beta J_0 m_{p'} + \beta J \sqrt{q_{p'}} z_p + \beta J \sqrt{\bar{\chi}_{p'}} \xi_p + \beta h/2 \quad (3.95)$$

com $p' \neq p$ e sendo $s = 1$ ou -1 se $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow , respectivamente.

Podemos escrever a exponencial da integral funcional (3.94) como um produto de matrizes, o que nos auxilia na técnica utilizada para solucionar as integrais gaussianas com variáveis de Grassmann (A.15). Portanto

$$I(\xi, z, \lambda) = \int D[\phi^* \phi] \exp \left[\sum_{\omega_n} \underline{\phi}_p^\dagger(\omega_n) \underline{G}^{-1}(\omega_n) \underline{\phi}_p(\omega_n) \right], \quad (3.96)$$

onde $\underline{\phi}_p(\omega_n)$ e $\underline{\phi}_p^\dagger(\omega_n)$ representam os Spinores

$$\underline{\phi}_p(\omega_n) = \begin{bmatrix} \phi_{p\uparrow}(\omega_n) \\ \phi_{p\downarrow}(\omega_n) \end{bmatrix}; \quad \underline{\phi}_p^\dagger(\omega_n) = [\phi_{p\uparrow}^*(\omega_n) \quad \phi_{p\downarrow}^*(\omega_n)]; \quad (3.97)$$

e $\underline{G}^{-1}(\omega_n)$ representa uma matriz diagonal

$$\underline{G}^{-1}(\omega_n) = \begin{pmatrix} i\omega_n + \beta\mu_p + \lambda & 0 \\ 0 & i\omega_n + \beta\mu_p - \lambda \end{pmatrix}. \quad (3.98)$$

Sendo a integral funcional dada pelo determinante da matriz \underline{G}^{-1} :

$$I(\xi, z, \lambda) = \prod_p \prod_{\omega_n} \det \underline{G}^{-1}(\omega_n) = \prod_p \prod_{\omega_n} (i\omega_n + \beta\mu_p + \lambda)(i\omega_n + \beta\mu_p - \lambda), \quad (3.99)$$

tomamos o logaritmo em ambos os lados da igualdade (3.99). Os procedimentos utilizados, descritos em detalhes nos Apêndices B e C, auxiliam o cálculo da soma sobre as frequências de Matsubara, cujo resultado será

$$I(\xi, z, \lambda) = (1 + e^{\beta\mu_p + \lambda}) (1 + e^{-\beta\mu_p - \lambda}) . \quad (3.100)$$

Fazendo a substituição da equação (3.100) na equação (3.93) e realizando o cálculo da integral em ξ_p , chegamos na expressão

$$\Lambda_\alpha = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_p D z_p \left[2 \left(\cosh \beta\mu_p + e^{\frac{\beta^2 J^2}{2} \bar{\chi}_{p'}} \cosh(-\beta J_0 m_{p'} + \beta J \sqrt{q_{p'}} z_p + \beta h/2) \right) \right]^n \quad (3.101)$$

Os cálculos das integrais sobre os parâmetros q , q_p , m e m_p presentes na função de partição, poderão ser realizados quando considerado somente o extremo da exponencial de $\mathcal{Z}(n)$.

Assim o potencial grande canônico é dado por

$$\begin{aligned} \frac{\beta\Omega}{N} &= -\frac{\beta J_0}{2} m_1 m_2 + \frac{\beta^2 J^2}{2} [\bar{\chi}_1 \bar{\chi}_2 + (\bar{\chi}_1 q_2 + \bar{\chi}_1 q_2)] - \frac{1}{2} \ln 2 \\ &- \int_{-\infty}^{\infty} \prod_p D z_p \ln \left[\cosh \beta\mu_p + e^{\frac{\beta^2 J^2}{2} \bar{\chi}_{p'}} \cosh(-\beta J_0 m_{p'} + \beta J \sqrt{q_{p'}} z_p + \beta h/2) \right] , \end{aligned} \quad (3.102)$$

onde os parâmetros de ordem $\bar{\chi}_p$, q_p e m_p , maximizam o integrando da equação (3.102), sendo dados por

$$\bar{\chi}_p = \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \left(\frac{\cosh(-\beta J_0 m_{p'} + \beta J \sqrt{q_{p'}} z_p + \beta h/2)}{e^{\frac{-\beta^2 J^2}{2} \bar{\chi}_{p'}} + \cosh(-\beta J_0 m_{p'} + \beta J \sqrt{q_{p'}} z_p + \beta h/2)} \right) - q_p , \quad (3.103)$$

$$q_p = \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \left[\frac{\sinh(-\beta J_0 m_{p'} + \beta J \sqrt{q_{p'}} z_p + \beta h/2)}{e^{\frac{-\beta^2 J^2}{2} \bar{\chi}_{p'}} + \cosh(-\beta J_0 m_{p'} + \beta J \sqrt{q_{p'}} z_p + \beta h/2)} \right]^2 , \quad (3.104)$$

e

$$m_p = \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \frac{\sinh(-\beta J_0 m_{p'} + \beta J \sqrt{q_{p'}} z_p + \beta h/2)}{e^{\frac{-\beta^2 J^2}{2} \bar{\chi}_{p'}} + \cosh(-\beta J_0 m_{p'} + \beta J \sqrt{q_{p'}} z_p + \beta h/2)} . \quad (3.105)$$

O potencial químico μ_p foi tomado igual a zero nas equações (3.102), (3.103) e (3.104), garantindo a ocupação média $\langle \hat{n} \rangle$ de um férmion por sítio (“half-filling”), como sugerido no trabalho de Theumann e Vieira Gusmão (1984). Logo,

$$\begin{aligned} \frac{\langle \hat{n} \rangle}{N} &= \frac{1}{\beta N} \frac{\partial}{\partial \mu_p} \langle \ln \mathcal{Z} \rangle_{J_{ij}} \\ &= 1 + \int_{-\infty}^{\infty} Dz_{p'} \frac{\sinh(\beta \mu_p)}{\cosh \beta \mu_p + e^{\frac{-\beta^2 J^2}{2} \bar{\chi}_{p'}} \cosh(-\beta J_0 m_{p'} + \beta J \sqrt{q_{p'}} z_{p'} + \beta h/2)} \end{aligned} \quad (3.106)$$

A solução $\frac{\langle \hat{n} \rangle}{N} = 1$ implica que o potencial químico é nulo, $\mu_p = 0$.

De acordo com a equação (3.102) a energia livre está associada aos parâmetros vidro de spin e magnetização, onde o vidro de spin possui um termo relacionado a variância dado por J , e a magnetização com um termo que indica a média dado por J_0 . A relação existente entre eles, dada pela média gaussiana J_0/J , nos remete a uma possível solução vidro de spin ou antiferromagnética, à medida que variamos a temperatura. No caso, a solução antiferromagnética é encontrada para altas temperaturas, onde a solução dos parâmetros será $m_1 = -m_2 \neq 0$ e $q_1 = q_2 \neq 0$, encontrando-se acima da linha de Almeida-Thouless. A solução vidro de spin será encontrada a baixas temperaturas, com $q_1 = q_2 \neq 0$, mas com a magnetização média igual a zero $m_1 = m_2 = 0$, sendo que esta encontra-se abaixo da linha de Almeida-Thouless $\lambda_{AT} = 0$. No meio dessas duas fases observamos a presença de uma fase mista, também chamada de vidro de spin magnetizado, mas com $m_1 = -m_2 \neq 0$, localizada logo abaixo da linha $\lambda_{AT} = 0$, que marca o final da fase antiferromagnética. No próximo capítulo, novamente utilizamos o modelo do vidro de spin fermiônico para duas sub-redes, acrescentando um termo de acoplamento em pares dos spins nos sítios da rede, buscando uma solução PARES, que pode ser vista como “supercondutividade”. Posteriormente apresentaremos detalhadamente no Capítulo 5 os resultados obtidos para o modelo do vidro de spin fermiônico em duas sub-redes, juntamente com os gráficos que expressam as soluções numéricas dos parâmetros de ordem encontrados.

Capítulo 4

Formulação do Problema

Este capítulo tem como objetivo apresentar um modelo que nos auxilie no estudo da competição entre as fases vidro de spin, antiferromagnética e supercondutora. O hamiltoniano é dado por um termo de Ising, que favorece a solução vidro de spin ou antiferromagnética, e um termo de formação de pares de Cooper no espaço real, favorecendo a dupla ocupação dos sítios. A organização deste capítulo é tal que na seção 4.1, expomos o modelo a ser estudado e apresentamos detalhadamente os cálculos que conduzirão a um conjunto de equações para os parâmetros de ordem que representam as variáveis termodinâmicas do sistema em estudo. Na seção 4.2, analisaremos a validade da aproximação que considera a simetria de réplicas.

4.1 Modelo

O estudo do vidro de spin e antiferromagnetismo com interação de pareamento BCS local no espaço real será baseado no modelo proposto por Magalhães e Theumann (1999) (ver equação 2.14), adicionando-se a este duas subredes para investigar o ordenamento antiferromagnético da rede. Para isso devemos considerar o seguinte hamiltoniano:

$$\begin{aligned}\bar{\mathcal{H}} &= \hat{\mathcal{H}} - \mu\hat{\mathcal{N}} \\ &= - \sum_{ij} J_{ij} \hat{S}_{1i}^z \hat{S}_{2j}^z - H \sum_i (\hat{S}_{1i}^z + \hat{S}_{2i}^z) \\ &\quad - \frac{g}{N} \sum_p \sum_{ij} c_{ip\uparrow}^\dagger c_{ip\downarrow}^\dagger c_{jp\downarrow} c_{jp\uparrow} - \mu_p \sum_p \sum_i (c_{ip\uparrow}^\dagger c_{ip\uparrow} + c_{ip\downarrow}^\dagger c_{ip\downarrow}),\end{aligned}\quad (4.1)$$

onde \hat{S}_{1i} e \hat{S}_{2i} são os spins de componentes diferentes e H é o campo magnético externo, com as somas sobre i e j estendendo-se a todos sítios da rede e a soma em p devido as duas sub-redes 1 e 2, representadas no capítulo 5 por A e B . A variável aleatória J_{ij} , responsável pelo acoplamento entre spins na direção z , é dada pela distribuição de probabilidades gaussiana

$$P(J_{ij}) = \sqrt{\frac{N}{2\pi J^2}} \exp \left[\frac{-(J_{ij} + J_0/N)^2}{2J^2/N} \right], \quad (4.2)$$

sendo J_0/N e J^2/N o acoplamento médio entre spins e a variância, respectivamente. A razão J_0/J descreve uma tendência para a ordem antiferroferromagnética e J para a ordem vidro de spin. Essas variáveis são escalonadas com $1/N$ para manter finitas as quantidades termodinâmicas quando o valor de N é grande.

Os operadores de spin da equação (4.1) são representados por combinações bilineares dos operadores fermiônicos e definidos como (ver equações 3.60)

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

$$\hat{S}_{jp}^z = \frac{1}{2}[c_{jp\uparrow}^\dagger c_{jp\uparrow} - c_{jp\downarrow}^\dagger c_{jp\downarrow}], \quad (4.4)$$

com $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) representando os operadores de criação (destruição) de partículas nos sítios j com projeção de spin σ ($\sigma = \uparrow$ ou \downarrow) e $p = 1$ ou 2 corresponde às duas subredes 1 e 2. Além disso, $\hat{n}_{jp\sigma}$ é o operador número dado por $\hat{n}_{jp\sigma} = c_{jp\sigma}^\dagger c_{jp\sigma}$, que (para férmions) pode assumir os valores zero ou um.

No hamiltoniano acima, o primeiro e o segundo termo referem-se ao modelo fermiônico de Ising, o primeiro possui uma interação de competição aleatória (desordem) entre spins, fornecendo condições para gerar possíveis soluções vidro de spin ou antiferromagnética. O segundo termo indica a interação entre o campo externo H e o sistema de spins. O terceiro termo é o de formação de pares do tipo BCS no espaço real e favorece a dupla ocupação dos sítios, ou seja, a formação de pares de partículas com spin $\sigma = \uparrow$ e spin $\sigma = \downarrow$ (neste caso não há ordenamento magnético na rede). Este terceiro termo se deve a interação elétron-fonôn que gera uma ligação entre os elétrons. Finalmente, o último termo contém o potencial químico μ_p das duas sub-redes.

Conforme apresentamos na seção 3.4, em uma formulação quântica de spin, o operador \hat{S}^z admite dois possíveis estados por sítio, com projeções de spin \uparrow ou \downarrow . Quando tratamos o problema no formalismo fermiônico, usando operadores em segunda quantização, obtemos, na função de partição, dois novos estados por sítio para o operador \hat{S}^z , o vazio e o estado com dois férmions (\uparrow e \downarrow), ambos com autovalores iguais a zero, de acordo com a equação (4.3).

Para garantir que em média apenas um férmion ocupe cada sítio, ajustamos o potencial químico na função de partição representada no ensemble grande-canônico na forma

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}\{e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}} - \mu\hat{N})}\}, \quad (4.5)$$

onde Tr é o traço, β o inverso da temperatura, $\hat{N} = \sum_j(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow})$ o operador número total de partículas e μ o potencial químico.

Levando em conta que o hamiltoniano definido em (4.1) possui operadores de spin que anticomutam (4.4), utilizaremos para o mesmo cálculo da função de partição o formalismo introduzido no capítulo anterior, onde a função de partição é escrita em termos das integrais de caminho fermiônicas, dada pela equação (3.55):

$$\mathcal{Z} = \int D[\phi_{jp}^*(\tau)\phi_{jp}(\tau)] e^{\mathcal{A}}, \quad (4.6)$$

onde o termo a ser integrado é definido por

$$\int D[\phi_{jp}^*(\tau)\phi_{jp}(\tau)] = \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^M \prod_j \prod_p \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} d\phi_{j\sigma,k}^* d\phi_{j\sigma,k}. \quad (4.7)$$

O termo que corresponde a ação na equação (4.6) é escrito em função das variáveis de Grassmann na forma

$$\mathcal{A} = \int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_j \sum_p \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \phi_{jp\sigma}^*(\tau) \left(-\frac{\partial}{\partial\tau} + \mu \right) \phi_{jp\sigma}(\tau) - \mathcal{H}(\phi_{jp}^*(\tau), \phi_{jp}(\tau)) \right\}. \quad (4.8)$$

Da mesma forma que no estudo fermiônico apresentado na seção 3.4, a equação (4.8) será reescrita utilizando uma representação em séries de Fourier que descreva os campos $\phi^*(\tau)$ e $\phi(\tau)$. Estas séries possuem propriedades de ortogonalidade que nos permitem escrever a expressão:

$$\mathcal{A} = A_0 + A_{VS} + A_{BCS}, \quad (4.9)$$

com os termos da soma descritos na forma

$$A_0 = \sum_j \sum_p \sum_{\sigma, \omega_n} \phi_{jp\sigma}^*(\omega_n) \left[i\omega_n + \beta\mu_p + s\beta\frac{H}{2} \right] \phi_{jp\sigma}(\omega_n) , \quad (4.10)$$

$$A_{VS} = \sum_{ij} \beta J_{ij} \sum_{\Omega_m} S_{i1}^z(\Omega_m) S_{j2}^z(-\Omega_m) , \quad (4.11)$$

$$A_{BCS} = \frac{g\beta}{N} \sum_{ij} \sum_p \sum_{\Omega_m} \rho_{ip}^*(\Omega_m) \rho_{jp}(\Omega_m) , \quad (4.12)$$

sendo o operador dado por

$$S_{j1}^z(\Omega_m) = \sum_{\omega_n} \frac{1}{2} \left[\phi_{j1\uparrow}^*(\omega_n + \Omega_m) \phi_{j1\uparrow}(\omega_n) - \phi_{j1\downarrow}^*(\omega_n + \Omega_m) \phi_{j1\downarrow}(\omega_n) \right] , \quad (4.13)$$

e também

$$\begin{aligned} \rho_{jp}(\Omega_m) &= \sum_{\omega_n} \phi_{jp\downarrow}(-\omega_n) \phi_{jp\uparrow}(\omega_n + \Omega_m) , \\ \rho_{jp}^*(\Omega_m) &= \sum_{\omega_n} \phi_{jp\uparrow}^*(\omega_n + \Omega_m) \phi_{jp\downarrow}^*(-\omega_n) , \end{aligned} \quad (4.14)$$

com as somas sobre $\omega_n = (2n+1)\pi$ e $\Omega_m = 2m\pi$ ($n, m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$) expressando as frequências de Matsubara. As equações presentes na expressão (4.9) representam: a parte livre da ação, dada pelo termo A_0 ; o vidro de spin e a formação de pares de Cooper no espaço real (PARES), estão associados respectivamente aos termos A_{VS} e A_{BCS} .

Como já dito anteriormente, neste trabalho o problema estudado desconsidera os efeitos das correlações temporais dos operadores de spin. A análise é realizada tomando como relevante somente o termo $\Omega_m = 0$ dos somatórios das equações (4.11), (4.12), (4.13) e (4.14), e é feita uma aproximação estática, onde as correlações no tempo desaparecem. Como visto na seção 3.4 a aproximação estática fornecerá um limite superior ao potencial termodinâmico e a localização da temperatura de transição ao vidro de spin.

Para escrever as equações que representam as ações em uma forma mais sucinta e apropriada usamos o formalismo de integrais funcionais adequados devido a aproximação estática (Magalhães e Theumann, 1999). Para isto definimos as matrizes

de Pauli, como segue

$$\underline{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \underline{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \underline{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad (4.15)$$

e os espinores de Nambu

$$\underline{\phi}_{jp}(\omega_n) = \begin{bmatrix} \phi_{jp\uparrow}(\omega_n) \\ \phi_{jp\downarrow}^*(-\omega_n) \end{bmatrix}; \quad \underline{\phi}_{jp}^\dagger(\omega_n) = [\phi_{jp\uparrow}^*(\omega_n) \quad \phi_{jp\downarrow}(-\omega_n)]. \quad (4.16)$$

Podemos reescrever as equações (4.10), (4.11) e (4.12) utilizando as definições anteriores, na forma

$$A_0 = \sum_j \sum_p \sum_{\omega_n} \underline{\phi}_{jp}^\dagger(\omega_n) [(i\omega_n + \beta\mu + s\beta\frac{H}{2})I] \underline{\phi}_{jp}(\omega_n), \quad (4.17)$$

$$A_{VS}^{est} = \beta \sum_{ij} J_{ij} S_{i1}^z(0) S_{j2}^z(0), \quad (4.18)$$

$$A_{BCS}^{est} = \frac{\beta g}{4N} \sum_p \left\{ \left[\sum_{j,\omega_n} \underline{\phi}_{jp}^\dagger(\omega_n) \underline{\sigma}_x \underline{\phi}_{jp}(\omega_n) \right]^2 + \left[\sum_{j,p,\omega_n} \underline{\phi}_{jp}^\dagger(\omega_n) \underline{\sigma}_y \underline{\phi}_{jp}(\omega_n) \right]^2 \right\}, \quad (4.19)$$

com

$$S_{jp}^z \equiv S_{jp}^z(0) = \frac{1}{2} \sum_{\omega_n} \underline{\phi}_j^\dagger(\omega_n) \underline{\sigma}_z \underline{\phi}_j(\omega_n), \quad (4.20)$$

onde a matriz identidade I é uma matriz dois por dois, p corresponde à sub-rede 1 ou 2 e o subscrito “*est*” indica a aproximação estática.

No capítulo anterior calculamos uma média configuracional nesse potencial considerando que a função de partição possui uma variável aleatória J_{ij} para a distribuição de probabilidades gaussiana associada ao termo de Ising no hamiltoniano, , obtemos

$$\beta\Omega = -\langle \ln(\mathcal{Z}) \rangle_{J_{ij}}, \quad (4.21)$$

onde $\langle \dots \rangle_{J_{ij}}$ representa a média relacionada à distribuição (4.2). Através do método das réplicas (2.6) para cada N sítios construo n réplicas destes sítios (Edwards e Anderson, 1972), temos

$$\frac{\beta\Omega}{N} = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{2N} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\langle \mathcal{Z}^n \rangle_{J_{ij}} - 1}{n}, \quad (4.22)$$

sendo a função de partição dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(n) &\equiv \langle \mathcal{Z}^n \rangle_{J_{ij}} = \int \prod_{\alpha=1}^n D[\phi_{jp}^{*\alpha} \phi_{jp}^{\alpha}] \exp \left[\sum_{\alpha=1}^n (A_0^{\alpha} + A_{BCS}^{\alpha \text{ est}}) \right] \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{ij} dJ_{ij} \sqrt{\frac{N}{2\pi J^2}} \exp \left[\sum_{ij} \left(-\frac{(J_{i,j} + J_0/N)^2}{2J^2/N} + \beta J_{ij} \sum_{\alpha=1}^n S_{i1}^{\alpha} S_{j2}^{\alpha} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Completando quadrados no índice da exponencial (equação 4.23) e realizando o cálculo das integrais em J_{ij} , encontramos

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(n) &= \int \prod_{\alpha=1}^n D[\phi_{jp}^{*\alpha} \phi_{jp}^{\alpha}] \exp \left[\sum_{\alpha=1}^n (A_0^{\alpha} + A_{BCS}^{\alpha \text{ est}}) \right. \\ &\left. + \sum_{ij} \left(\frac{\beta^2 J^2}{2N} \left(\sum_{\alpha=1}^n S_{i1}^{\alpha} S_{j2}^{\alpha} \right)^2 - \frac{\beta J_0}{N} \sum_{\alpha=1}^n S_{i1}^{\alpha} S_{j2}^{\alpha} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Na equação (4.24), os dois termos dependentes das interações entre os sítios i e j , pertencentes à mesma réplica e de subredes diferentes (1 e 2), serão descritos agora como interações entre réplicas α e β do mesmo sítio j , o problema fica então reduzido a um único sítio, sendo então

$$\sum_{\alpha=1}^n \left[\sum_{ij} S_{i1}^{\alpha} S_{j2}^{\alpha} \right]^2 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^n \left\{ \left[\sum_j S_{j1}^{\alpha} S_{j1}^{\beta} + \sum_j S_{j2}^{\alpha} S_{j2}^{\beta} \right]^2 - \sum_{p=1}^2 \left[\sum_j S_{jp}^{\alpha} S_{jp}^{\beta} \right]^2 \right\} \quad (4.25)$$

e, de forma similar,

$$\sum_{\alpha=1}^n \sum_{ij} S_{i1}^{\alpha} S_{j2}^{\alpha} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \left\{ \left[\sum_j S_{j1}^{\alpha} + \sum_j S_{j2}^{\alpha} \right]^2 - \sum_{p=1}^2 \left[\sum_j S_{jp}^{\alpha} \right]^2 \right\}. \quad (4.26)$$

As interações efetivas entre as réplicas são dadas pelas expressões (4.25) e (4.26). Substituindo-as na equação (4.24), obtemos a seguinte função de partição replicada:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(n) &= \int \prod_{\alpha=1}^n D[\phi_{jp}^{*\alpha} \phi_{jp}^{\alpha}] \exp \left\{ \sum_{\alpha=1}^n (A_0^{\alpha} + A_{BCS}^{\alpha \text{ est}}) \right. \\ &- \frac{\beta J_0}{2N} \sum_{\alpha=1}^n \left[\left(\sum_j S_{j1}^{\alpha} + \sum_j S_{j2}^{\alpha} \right)^2 - \sum_{p=1}^2 \left(\sum_j S_{jp}^{\alpha} \right)^2 \right] \\ &\left. + \frac{\beta^2 J^2}{4N} \sum_{\alpha,\beta=1}^n \left[\left(\sum_j S_{j1}^{\alpha} S_{j1}^{\beta} + \sum_j S_{j2}^{\alpha} S_{j2}^{\beta} \right)^2 - \sum_{p=1}^2 \left(\sum_j S_{jp}^{\alpha} S_{jp}^{\beta} \right)^2 \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.27)$$

A equação (4.27) possui termos quadráticos oriundos do termo de Ising do hamiltoniano. Temos também, o termo da ação responsável pela formação de pares (ver equação (4.19)), escrito em termos das matrizes $\underline{\sigma}_x$ (parte real) e $\underline{\sigma}_y$ (parte imaginária), que não é linear. Através da transformação Hubbard-Stratonovich (3.77) (ver seção 3.4), os termos quadráticos de acoplamento entre os spins, serão linearizados:

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}(n) = & \int \prod_{\alpha=1}^n D[\phi_{jp}^{\alpha*} \phi_{jp}^{\alpha}] \exp \left[\sum_{\alpha} (A_0^{\alpha}) \right] \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha p} d\eta_{R\alpha p} d\eta_{I\alpha p} \frac{\beta g N}{\pi} \\
& \times \exp \left(-\beta g N \sum_{\alpha p} (\eta_{R\alpha p}^2 + \eta_{I\alpha p}^2) + \beta g \sum_{\alpha p} \sum_{j\omega_n} \underline{\phi}_{jp}^{\dagger\alpha}(\omega_n) (\eta_{R\alpha p} \underline{\sigma}_x + \eta_{I\alpha p} \underline{\sigma}_y) \underline{\phi}_{jp}^{\alpha}(\omega_n) \right) \\
& \times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha} dm_{\alpha} \sqrt{\frac{\beta J_0 N}{2\pi}} \exp \left(-\frac{\beta J_0 N}{2} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + i\beta J_0 \sum_j \sum_{\alpha} m_{\alpha} (S_{j1}^{\alpha} + S_{j2}^{\alpha}) \right) \\
& \times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha p} dm_{\alpha p} \sqrt{\frac{\beta J_0 N}{2\pi}} \exp \left(-\frac{\beta J_0 N}{2} \sum_{\alpha p} (m_{\alpha p})^2 + \beta J_0 \sum_j \sum_{\alpha p} m_{\alpha p} S_{jp}^{\alpha} \right) \\
& \times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha\beta} dq_{\alpha\beta} \frac{\beta J \sqrt{N}}{\sqrt{4\pi}} \exp \left(-\frac{\beta^2 J^2 N}{4} \sum_{\alpha\beta} (q_{\alpha\beta})^2 \right. \\
& \quad \left. + \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_j \sum_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} (S_{j1}^{\alpha} S_{j1}^{\beta} + S_{j2}^{\alpha} S_{j2}^{\beta}) \right) \\
& \times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha\beta p} dq_{\alpha\beta p} \frac{\beta J \sqrt{N}}{\sqrt{4\pi}} \exp \left(-\frac{\beta^2 J^2 N}{4} \sum_{\alpha\beta p} (q_{\alpha\beta p})^2 + i \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_j \sum_{\alpha\beta p} q_{\alpha\beta p} S_{jp}^{\alpha} S_{jp}^{\beta} \right).
\end{aligned} \tag{4.28}$$

A linearização feita através de Hubbard-Stratonovich introduz no problema campos auxiliares ($\eta_{pR\alpha}$, $\eta_{pI\alpha}$, m_{α} , $m_{p\alpha}$, $q_{\alpha\beta}$ e $q_{p\alpha\beta}$), que representam os parâmetros de ordem a serem calculados no problema. Assumimos que $\sum_{\alpha p} m_{\alpha p} = m_{\alpha 1} + m_{\alpha 2}$ e $m_{\alpha} = \frac{m_{\alpha 1} + m_{\alpha 2}}{2}$ (o mesmo ocorre para q).

Reescrevemos a função de partição replicada trocando a ordem da integral funcional com as demais integrais e, efetuamos explicitamente a soma em j pois não há

interações entre os sítios. A forma da expressão para $\mathcal{Z}(n)$ será dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(n) &= \mathcal{N} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha p} d\eta_{R\alpha p} d\eta_{I\alpha p} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha} dm_{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha p} dm_{\alpha p} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha\beta} dq_{\alpha\beta} \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha\beta p} dq_{\alpha\beta p} \exp \left[-N \left(\beta g \sum_{\alpha p} |\eta_{\alpha p}|^2 + \frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha} (m_{\alpha})^2 + \frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha p} (m_{\alpha p})^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\beta^2 J^2}{4} \sum_{\alpha\beta} (q_{\alpha\beta})^2 + \frac{\beta^2 J^2}{4} \sum_{\alpha\beta p} (q_{\alpha\beta p})^2 - \ln \Lambda_{\alpha} \right) \right], \end{aligned} \quad (4.29)$$

a notação \mathcal{N} será

$$\mathcal{N} = \left(\frac{\beta g N}{\pi} \right)^n \left(\sqrt{\frac{\beta J_0 N}{2\pi}} \right)^n \left(\frac{\beta J \sqrt{N}}{\sqrt{4\pi}} \right)^{2n}, \quad (4.30)$$

e também

$$\begin{aligned} \Lambda_{\alpha} &= \int \prod_{\alpha=1}^n D[\phi_p^{\alpha*} \phi_p^{\alpha}] \exp \left[\sum_{\alpha} \left(A_0^{\alpha} + \beta g \sum_p \sum_{\omega_n} \phi_p^{\dagger\alpha}(\omega_n) \underline{\eta}_{\alpha p} \phi_p^{\alpha}(\omega_n) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + i\beta J_0 m_{\alpha} (S_1^{\alpha} + S_2^{\alpha}) + \beta J_0 \sum_p m_{\alpha p} S_p^{\alpha} \right) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\alpha\beta} \left(\frac{\beta^2 J^2}{2} (q_{\alpha\beta}) (S_1^{\alpha} S_1^{\beta} + S_2^{\alpha} S_2^{\beta}) + i \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_p q_{\alpha\beta p} S_p^{\alpha} S_p^{\beta} \right) \right], \end{aligned} \quad (4.31)$$

sendo a matriz

$$\underline{\eta}_{\alpha p} = \eta_{R\alpha p} \underline{\sigma}_x + \eta_{I\alpha p} \underline{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & \eta_{\alpha p} \\ \eta_{\alpha p}^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.32)$$

com

$$\eta_{\alpha p} = \eta_{R\alpha p} - i \eta_{I\alpha p}. \quad (4.33)$$

A ação A_0^{α} encontra-se representada na equação (4.17) com algumas alterações: o sub-índice j foi suprimido e um índice de réplicas α foi acrescentado.

As integrais relacionadas com os campos auxiliares, presentes na equação (4.29), exibem uma região de máximo do integrando quando $N \rightarrow \infty$. As soluções ponto de sela, onde os campos auxiliares serão tomados de tal forma que maximizem o integrando, geram um conjunto de equações que expressam a média termodinâmica

$\langle \dots \rangle$ juntamente com a média sobre a desordem encontrada nos parâmetros, quantificando o grau de correlação existente entre os sítios:

$$\beta J_0 m_\alpha = \frac{\partial}{\partial m_\alpha} \ln \Lambda_\alpha \Rightarrow 2im_\alpha = i\langle S_1^\alpha + S_2^\alpha \rangle ; \quad (4.34)$$

$$\beta J_0 m_p^\alpha = \frac{\partial}{\partial m_p^\alpha} \ln \Lambda_\alpha \Rightarrow m_p^\alpha = \langle S_p^\alpha \rangle ; \quad (4.35)$$

$$\frac{\beta^2 J^2}{2} q_{\alpha\beta} = \frac{\partial}{\partial q_{\alpha\beta}} \ln \Lambda_\alpha \Rightarrow 2q_{\alpha\beta} = \langle S_1^\alpha S_1^\beta + S_2^\alpha S_2^\beta \rangle ; \quad (4.36)$$

$$\frac{\beta^2 J^2}{2} q_p^{\alpha\beta} = \frac{\partial}{\partial q_p^{\alpha\beta}} \ln \Lambda_\alpha \Rightarrow iq_p^{\alpha\beta} = i\langle S_p^\alpha S_p^\beta \rangle ; \quad (4.37)$$

$$\beta g \eta_{\alpha p}^* = \frac{\partial}{\partial \eta_{\alpha p}^*} \ln \Lambda_\alpha \Rightarrow \eta_{\alpha p}^* = \sum_{p, \omega_n} \langle \phi_{p\uparrow}^{\alpha*}(\omega_n) \phi_{p\downarrow}^{\alpha*}(-\omega_n) \rangle ; \quad (4.38)$$

$$\beta g \eta_{\alpha p} = \frac{\partial}{\partial \eta_{\alpha p}} \ln \Lambda_\alpha \Rightarrow \eta_{\alpha p} = \sum_{p, \omega_n} \langle \phi_{p\downarrow}^\alpha(-\omega_n) \phi_{p\uparrow}^\alpha(\omega_n) \rangle \quad (4.39)$$

Restringimos nosso trabalho a uma análise onde consideramos a simetria entre réplicas, na região de máximo do integrando, apresentada na equação (4.29). Utilizando essa aproximação obtemos m_p , que pode ser escrito na forma

$$m_p = \frac{1}{n} \sum_{\alpha} \langle S_p^\alpha \rangle . \quad (4.40)$$

Para o parâmetro $q_p^{\alpha\beta}$ devemos levar em conta os casos em que $\alpha = \beta$ e $\alpha \neq \beta$, de modo que seja escrito como segue:

$$q_p^{\alpha\alpha} = \bar{q}_p = \frac{1}{n} \sum_p \sum_{\alpha=1}^n \langle S_p^\alpha S_p^\alpha \rangle \quad \text{e} \quad q_p^{\alpha\beta} = q_p \equiv \frac{1}{n(n-1)} \sum_p \sum_{\alpha \neq \beta} \langle S_p^\alpha S_p^\beta \rangle . \quad (4.41)$$

Como a susceptibilidade estática é assumida como sendo um parâmetro de ordem (ver seção 3.4), torna-se possível encontrar uma relação para $q_{\alpha\alpha}$ na forma

$$\bar{q}_p = q_p + \bar{\chi}_p \quad ; \quad \bar{\chi} \equiv \frac{\chi}{\beta} . \quad (4.42)$$

No estudo realizado por Sherrington e Kirkpatrick (1975), os parâmetros $q_1 = q_2 \neq 0$ e $m_1 = -m_2 = 0$ representam um ordenamento vidro de spin [27]. Para o caso em que $m_{1,2}$ e $q_{1,2}$ sejam ambos diferente de zero, temos uma fase caracterizada

como antiferromagnética e no caso de $m_{1,2}$ e $q_{1,2}$ serem nulos, indicam a existência de uma fase paramagnética.

As equações (4.38) e (4.39) serão representadas da seguinte forma, se considerarmos as suposições feitas anteriormente:

$$\eta_p = \langle c_{p\downarrow} c_{p\uparrow} \rangle \quad \text{e} \quad \eta_p^* = \langle c_{p\uparrow}^\dagger c_{p\downarrow}^\dagger \rangle, \quad (4.43)$$

A fase de formação de pares será representada com as médias (4.42) sendo distintas de zero ($\eta_p^* \eta_p = |\eta_p|^2 \neq 0$).

O ansatz da simetria de réplicas nos permite realizar de forma explícita a soma sobre α , onde utilizando as equações (4.40), (4.41) e (4.42) na representação da integral funcional, encontramos

$$\begin{aligned} \Lambda_\alpha = & \int \prod_\alpha D[\phi_p^{\alpha*} \phi_p^\alpha] \exp \left\{ \left[A_0 + \beta g \sum_p \sum_{\omega_n, \alpha} \underline{\phi}_p^{\dagger\alpha}(\omega_n) \underline{\eta}_{p\alpha} \underline{\phi}_p^\alpha(\omega_n) \right. \right. \\ & - 2\beta J_0 m \sum_\alpha (S_1^\alpha + S_2^\alpha) + \beta J_0 \sum_p m_p \sum_\alpha S_p^\alpha + \beta^2 J^2 \left(q \sum_{\alpha \neq \beta} (S_1^\alpha S_1^\beta + S_2^\alpha S_2^\beta) \right. \\ & + (q + \bar{\chi}) \sum_\alpha [(S_1^\alpha)^2 + (S_2^\alpha)^2] \left. \right) - \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_p \left(q_p \sum_{\alpha \neq \beta} S_p^\alpha S_p^\beta \right. \\ & \left. \left. + (q_p + \bar{\chi}_p) \sum_\alpha (S_p^\alpha)^2 \right) \right] \Bigg\}. \quad (4.44) \end{aligned}$$

As correlações existentes entre os operadores de spins replicados, que apresentam índices distintos α e β , serão reescritas fazendo uso da identidade

$$\sum_{\alpha \neq \beta} \sum_p S_p^\alpha S_p^\beta = \sum_p \left[\left(\sum_\alpha S_p^\alpha \right)^2 - \sum_\alpha (S_p^\alpha)^2 \right]. \quad (4.45)$$

Portanto, surgem novos termos quadráticos na equação (4.44). Estes termos serão linearizados utilizando a transformação de Hubbard-Stratonovich (3.77), introduzindo dois novos campos auxiliares (z_p e ξ_p). Após trocarmos a ordem da integral funcional pelas integrais gaussianas, redefinimos alguns termos, e obtemos uma forma para Λ_α dada por

$$\begin{aligned} \Lambda_\alpha = & \int_{-\infty}^{\infty} \prod_p dz_p \frac{e^{-z_p^2/2}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_p d\xi_p \frac{e^{-\xi_p^2/2}}{\sqrt{2\pi}} \int \prod_\alpha D[\phi_p^{\alpha*} \phi_p^\alpha] \\ & \times \exp \left[n \left(A_0 + \beta g \sum_{\omega_n} \underline{\phi}_p^{\dagger}(\omega_n) \underline{\eta}_p \underline{\phi}_p(\omega_n) \right) \right], \quad (4.46) \end{aligned}$$

Através das definições implícitas nas equações (4.17) e (4.20) reescrevemos a equação (4.46) de modo a evidenciar a integral funcional. O sub-índice j será suprimido e considerando o fato da independência entre réplicas, obtemos

$$\Lambda_\alpha = \int_{-\infty}^{\infty} Dz_p \left[\int_{-\infty}^{\infty} D\xi_p \Lambda' \right]^n, \quad (4.47)$$

sendo $Dz_p = \prod_p dz_p \frac{e^{-z_p^2/2}}{\sqrt{2\pi}}$, $D\xi_p = \prod_p d\xi_p \frac{e^{-\xi_p^2/2}}{\sqrt{2\pi}}$ e

$$\Lambda' = \int D[\phi_p^* \phi_p] \exp \left[\beta g \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_p \phi_{\downarrow p}^\dagger(\omega_n) \eta_{\downarrow p} \phi_{\downarrow p}(\omega_n) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_p \phi_{\downarrow p}^\dagger(\omega_n) \underline{G}_p^{-1}(\omega_n) \phi_{\downarrow p}(\omega_n) \right], \quad (4.48)$$

onde

$$\underline{G}_p^{-1}(\omega_n) = (i\omega_n + \beta\mu_p + \underline{\sigma}_z h_p) I, \quad (4.49)$$

definindo $\underline{\sigma}_z$ como uma matriz de Pauli onde

$$h_p \equiv h_p(q_{p'}, \bar{\chi}_{p'}, m_{p'}) = \beta \frac{H}{2} - \beta J_0 m_{p'} + \beta J \sqrt{\bar{\chi}_{p'}} \xi_p + \beta J \sqrt{q_{p'}} z_p, \quad (4.50)$$

sendo o índice p' sempre contrário ao índice p (1 ou 2).

A integral funcional da equação (4.48) possui uma soma de matrizes que está presente na exponencial. Assim, uma solução analítica para a integral funcional será escrever o integrando de tal forma que a exponencial tenha um produto de matrizes associados à soma em ω_n ¹. Definindo uma matriz $\underline{\Phi}_p^\dagger(\omega_n)$, conforme já visto em (4.16), obtemos

$$\underline{\Phi}_p^\dagger(\omega_n) = \begin{bmatrix} \phi_{p\uparrow}^*(\omega_n) & \phi_{p\downarrow}(-\omega_n) \end{bmatrix}; \quad \underline{\Phi}_p(\omega_n) = \begin{bmatrix} \phi_{p\uparrow}(\omega_n) \\ \phi_{p\downarrow}^*(-\omega_n) \end{bmatrix}, \quad (4.51)$$

e reescrevendo uma expressão para a integral funcional da equação (4.48):

$$\Lambda' = \int D[\phi_p^* \phi_p] \exp \left(\sum_p \sum_{n=0}^{\infty} \underline{\Phi}_p^\dagger(\omega_n) \underline{G}_p^{-1}(\omega_n) \underline{\Phi}_p(\omega_n) \right), \quad (4.52)$$

¹Os detalhes da álgebra associada a esta transformação são apresentados no Apêndice B.

encontramos a combinação de matrizes $\underline{\eta}_p$ e $\underline{G}_p^{-1}(\omega_n)$ esperada para $\underline{G}^{-1}(\omega_n)$ (ver equação B.10 no Apêndice B), de modo que a igualdade (4.52) será satisfeita se

$$\underline{G}^{-1}(\omega_n) = \begin{pmatrix} i\omega_n + \beta\mu_p + h_p & \beta g\eta_p \\ \beta g\eta_p^* & i\omega_n + \beta\mu_p - h_p \end{pmatrix}. \quad (4.53)$$

Podemos agora, calcular Λ' utilizando a definição de integral gaussiana dada pela equação (A.15), cujo resultado será

$$\Lambda' = \prod_p \prod_{n=0}^{\infty} \det \underline{G}^{-1}(\omega_n), \quad (4.54)$$

onde o cálculo do determinante de $\underline{G}^{-1}(\omega_n)$ será expresso por

$$\begin{aligned} \Lambda' &= \prod_p \prod_{n=0}^{\infty} \left[i\omega_n + \sqrt{(\beta\mu_p)^2 + (\beta g\eta_p)^2} + h_p \right] \\ &\quad \times \left[i\omega_n + \sqrt{(\beta\mu_p)^2 + (\beta g\eta_p)^2} - h_p \right], \end{aligned} \quad (4.55)$$

visto que h_p incluiu o termo $\beta\frac{H}{2}$. O produtório sobre ω_n poderá ser transformado em uma soma, quando tomamos o logaritmo em ambos os lados da expressão (4.55), tornando-se possível efetuar o cálculo da soma sobre as frequências de Matsubara como segue

$$\ln \Lambda' = \sum_p \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln \left[i\omega_n + \beta\mu'_p + h_p \right] \left[i\omega_n + \beta\mu'_p - h_p \right], \quad (4.56)$$

Devemos levar em conta que o formalismo das matrizes de Nambu introduziu uma transformação de partícula-buraco nos férmions de spin \downarrow , no desenvolvimento da função de partição, de modo que a expressão $\sqrt{(\beta\mu_p)^2 + (\beta g\eta_p)^2}$ será substituída por $\beta\mu'_p$, e derivando o potencial grande-canônico em relação a μ_p , a fim de calcular o número médio de ocupação, faz-se uso das equações (4.29) e (4.52) e encontramos

$$\frac{1}{N} \frac{\partial \Omega}{\partial \mu_p} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\langle \phi_{p\uparrow}^*(\omega_n) \phi_{p\uparrow}(\omega_n) \rangle - \langle \phi_{p\downarrow}(-\omega_n) \phi_{p\downarrow}^*(-\omega_n) \rangle \right] \quad (4.57)$$

e

$$\frac{1}{N} \frac{\partial \Omega}{\partial \mu_p} = \left[\langle c_{p\uparrow}^\dagger c_{p\uparrow} \rangle - \langle c_{p\downarrow} c_{p\downarrow}^\dagger \rangle \right], \quad (4.58)$$

de onde, fazendo uso da relação de anti-comutação apresentada pelos operadores de criação e destruição, dadas por $(\{c_\sigma, c_{\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\sigma,\sigma'})$, obtemos

$$\frac{1}{N} \frac{\partial \Omega}{\partial \mu_p} = \langle \hat{n}_{p\uparrow} \rangle + \langle \hat{n}_{p\downarrow} \rangle - 1. \quad (4.59)$$

Utilizaremos a equação (4.59) para ajustar o fator de convergência na soma das frequências de Matsubara. Finalmente, o resultado encontrado ² será

$$\Lambda' = \cosh \beta \mu'_p + \cosh h_p. \quad (4.60)$$

A função de partição replicada será encontrada quando substituirmos a equação (4.60) na equação (4.47), calculamos as integrais e introduzimos este resultado na expressão (4.29), obtendo-se

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(n) = \exp \left\{ -Nn \left[-\frac{J^2 \beta^2}{4} + \beta g \sum_p \eta_p^2 - \beta J_0 m_1 m_2 + \frac{\beta^2 J^2}{2} \bar{\chi}_1 \bar{\chi}_2 \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{\beta^2 J^2}{2} (\bar{\chi}_1 q_2 + \bar{\chi}_2 q_1) - \int_{-\infty}^{\infty} \prod_p D z_p \ln \left(\cosh(\beta \mu'_p) \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + \int_{-\infty}^{\infty} \prod_p D \xi_p \cosh(h_p) \right) \right] \right\}. \quad (4.61) \end{aligned}$$

Escrevendo o potencial grande canônico na forma:

$$\begin{aligned} \frac{\beta \Omega}{N} = & -\frac{J^2 \beta^2}{8} + \frac{\beta g}{2} \sum_p \eta_p^2 - \frac{\beta J_0}{2} m_1 m_2 + \frac{\beta^2 J^2}{4} \bar{\chi}_1 \bar{\chi}_2 + \frac{\beta^2 J^2}{4} (\bar{\chi}_1 q_2 + \bar{\chi}_2 q_1) \\ & - \int_{-\infty}^{\infty} \prod_p D z_p \ln \left(\cosh(\beta \mu'_p) + \int_{-\infty}^{\infty} \prod_p D \xi_p \cosh(h_p) \right), \quad (4.62) \end{aligned}$$

temos que os parâmetros de ordem η_p , $\bar{\chi}_p$, q_p e m_p , sendo p dado pelas duas subredes, maximizam o expoente da equação (4.61). Isto nos leva a um conjunto de equações ponto de sela, que definem um sistema de equações não-lineares para os parâmetros de ordem:

$$m_p = \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \frac{\sinh(h'_p)}{\exp(-\frac{J^2 \beta^2}{2} \bar{\chi}_{p'}) \cosh(\beta g \eta_p) + \cosh(h'_p)}; \quad (4.63)$$

$$\eta_p = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} D z_p \frac{\sinh(\beta g \eta_p)}{\cosh(\beta g \eta_p) + \exp(\frac{J^2 \beta^2}{2} \bar{\chi}_{p'}) \cosh(h'_p)}; \quad (4.64)$$

²Detalhes do procedimento dos cálculos foram desenvolvidos no Apêndice C.

$$q_p = \int_{-\infty}^{\infty} Dz_p \left[\frac{\sinh(h'_p)}{\exp(-\frac{J^2\beta^2}{2}\bar{\chi}_{p'}) \cosh(\beta g\eta_p) + \cosh(h'_p)} \right]^2 ; \quad (4.65)$$

$$\bar{\chi}_p = \int_{-\infty}^{\infty} Dz_p \left[\frac{\cosh(h'_p)}{\exp(-\frac{J^2\beta^2}{2}\bar{\chi}_{p'}) \cosh(\beta g\eta_p) + \cosh(h'_p)} \right] - q_p ; \quad (4.66)$$

onde o índice p' é sempre contrário ao índice p .

A notação h'_p é dada pela equação

$$h'_p \equiv h'_p(q_{p'}, m_{p'}, H) = \beta \frac{H}{2} - \beta J_0 m_{p'} + \beta J \sqrt{q_{p'}} z_p . \quad (4.67)$$

Tomamos o potencial químico nulo a fim de garantir que a média de ocupação dos férmions por sítio seja um, ou seja, $\langle \hat{n}_{p\uparrow} \rangle + \langle \hat{n}_{p\downarrow} \rangle = 1$ e, conforme visto na equação (4.59), encontramos

$$\langle \hat{n}_{p\uparrow} \rangle + \langle \hat{n}_{p\downarrow} \rangle - 1 = -\frac{1}{N} \frac{\partial \Omega}{\partial \mu_p} = 0 . \quad (4.68)$$

Utilizando a expressão (4.62), antes de realizar a substituição de $\sqrt{(\beta\mu_p)^2 + (\beta g\eta_p)^2}$ por $\beta\mu'_p$, obtemos para o cálculo da derivada da expressão (4.68):

$$\frac{\beta\mu_p}{\sqrt{(\beta\mu_p)^2 + \beta^2 g^2 \eta_p^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_p Dz_p \frac{\sinh \sqrt{(\beta\mu_p)^2 + \beta^2 g^2 \eta_p^2}}{\cosh(\beta g\eta_p) + \int_{-\infty}^{\infty} \prod_p D\xi_p \cosh(h_p)} = 0, \quad (4.69)$$

indicando que, no caso $\langle \hat{N}_p \rangle = \langle \hat{n}_{p\uparrow} \rangle + \langle \hat{n}_{p\downarrow} \rangle = 1$, o potencial químico será zero, $\mu_p = 0$.

4.2 Linha de Almeida-Thouless

Um trabalho de Almeida e Thouless (AT) (1978) questiona a estabilidade das soluções encontradas no modelo SK clássico, por utilizar a aproximação de campo médio com o ansatz de simetria de réplicas. Como os autovalores encontrados para a matriz dos parâmetros não são todos positivos, temos a indicação que as fases que se encontram na região onde o autovalor λ_{AT} é negativo são instáveis³. A natureza da instabilidade sugere que a simetria entre réplicas deva ser quebrada, para que os autovalores se tornem sempre positivos. Sendo assim, nesta seção estudamos a estabilidade da simetria de réplicas do problema proposto na seção 4.1, dada pela linha AT, verificando a necessidade da utilização de um modelo onde as réplicas não mais serão consideradas iguais.

Para calcular o potencial termodinâmico (4.62) utiliza-se a simetria de réplicas nas soluções ponto de sela, soluções estas que avaliam as integrais sobre os parâmetros $\eta_{pR\alpha}$, $\eta_{pI\alpha}$, $q_{\alpha\beta}$, $q_{p\alpha\beta}$, m_α e $m_{p\alpha}$.

Parte-se da função de partição replicada dada pela equação (4.29) como

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(n) = \mathcal{N} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha p} d\eta_{pR\alpha} d\eta_{pI\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha} dm_{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha p} dm_{p\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha\beta} dq_{\alpha\beta} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha\beta p} dq_{p\alpha\beta} \\ \times \exp[-Nf(q_{\alpha\beta}, q_{p\alpha\beta}, m_{\alpha}, m_{p\alpha}, |\eta_{p\alpha}|)] , \end{aligned} \quad (4.70)$$

onde

$$\begin{aligned} f(q_{\alpha\beta}, q_{p\alpha\beta}, m_{\alpha}, m_{p\alpha}, |\eta_{p\alpha}|) = \beta g \sum_{\alpha p} |\eta_{\alpha p}|^2 + \frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha} (m_{\alpha})^2 + \frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha p} (m_{\alpha p})^2 \\ + \frac{\beta^2 J^2}{4} \sum_{\alpha\beta} (q_{\alpha\beta})^2 + \frac{\beta^2 J^2}{4} \sum_{\alpha\beta p} (q_{\alpha\beta p})^2 - \ln \Lambda_{\alpha} \end{aligned} \quad (4.71)$$

e Λ_{α} como definido na equação (4.31).

No limite termodinâmico, devido o fator N no expoente da equação (4.70), as integrais sobre os parâmetros de ordem são dominadas pelo integrando, sendo que o conjunto de valores $\{|\eta_{p\alpha}|\}$, $\{q_{\alpha\beta}\}$, $\{q_{p\alpha\beta}\}$, $\{m_{\alpha}\}$ e $\{m_{p\alpha}\}$ produzem um extremo

³As soluções encontradas abaixo da linha onde $\lambda_{AT} = 0$, no diagrama de fases (ver capítulo 5), são correspondentes as fases mistas e vidro de spin.

da função $f(q_{\alpha\beta}, q_{p\alpha\beta}, m_\alpha, m_{p\alpha}, |\eta_{p\alpha}|)$, com $\{|\eta_{p\alpha}|\}$, $\{m_{p\alpha}\}$ e $\{m_\alpha\}$ minimizando essa função e, $\{q_{\alpha\beta}\}$ e $\{q_{p\alpha\beta}\}$ maximizando [14]. Isso conduz as equações ponto de sela.

Para facilitar o cálculo das derivadas da função f o índice p assume os valores 1, 2 e 3 nos parâmetros m e q , portanto a função de partição replicada assume a forma

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(n) = \mathcal{N} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha p} d\eta_{pR\alpha} d\eta_{pI\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha p} dm_{p\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha\beta p} dq_{p\alpha\beta} \exp \left[-N \left(\beta g \sum_{\alpha p} |\eta_{\alpha p}|^2 \right. \right. \\ \left. \left. \times \frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha p} (m_{\alpha p})^2 + \frac{\beta^2 J^2}{4} \sum_{\alpha\beta p} (q_{\alpha\beta p})^2 - \ln \Lambda_\alpha \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.72)$$

Para o extremo de $f(q_{p\alpha\beta}, m_{p\alpha}, |\eta_{p\alpha}|)$ pode ser utilizada a simetria de réplicas. Com o objetivo de verificar a estabilidade, AT propõem tomar as soluções ponto estacionário com simetria de réplicas e fazer perturbações, expandindo a função de partição replicada até segunda ordem nessas perturbações na forma

$$f(q_{\alpha\beta}^p, m_\alpha^p) = f(q_{\alpha\beta}^p + \eta_{\alpha\beta}^p, m_\alpha^p + \epsilon_\alpha^p), \quad (4.73)$$

e desse modo encontrar a matriz \underline{G} associada à derivada segunda de $f(q_{\alpha\beta}^p, m_\alpha^p, |\eta_\alpha^p|)$, em relação a $q_{\alpha\beta}^p$ e $m_{p\alpha}^p$ e seus termos cruzados, como mostra o exemplo:

$$G_{\alpha\beta, \gamma\delta} \equiv \frac{\partial^2}{\partial q_{\alpha\beta}^p \partial q_{\gamma\delta}^p} f(q_{\alpha\beta}^p, m_\alpha^p, |\eta_\alpha^p|) = \frac{\beta^2 J^2}{2} \left[\delta_{\alpha\beta, \gamma\delta} - \frac{\beta^2 J^2}{2} (C_{\alpha\beta+\gamma\delta}^2 - C_{\alpha\beta, \gamma\delta}) \right] \quad (4.74)$$

sendo

$$C_{\alpha\beta+\gamma\delta} = \langle S_p^{z\alpha} S_p^{z\beta} + S_p^{z\gamma} S_p^{z\delta} \rangle \quad \text{e} \quad C_{\alpha\beta, \gamma\delta} = \langle S_p^{z\alpha} S_p^{z\beta} S_p^{z\gamma} S_p^{z\delta} \rangle, \quad (4.75)$$

e a média termodinâmica $\langle \dots \rangle$ calculada em relação às interações efetivas dadas por Λ_α .

Os coeficientes da forma quadrática, que estão associados a matriz \underline{G} , serão analisados, com o intuito de ao diagonalizar a matriz, obtermos autovalores positivos para as soluções estáveis do problema. Ao diagonalizar \underline{G} , encontra-se o autovalor λ_{AT} , que está relacionado com a derivada segunda dos parâmetros, dada pela equação (4.74). Este autovalor poderá ser negativo em determinadas condições, conduzindo a uma solução de ponto de sela estacionário instável. Os coeficientes $C_{\alpha\beta, \gamma\delta}$,

presentes na matriz, serão dados por

$$C_{\alpha\beta,\alpha\beta} = \int_{-\infty}^{\infty} Dz_p \left[\frac{\exp(\frac{\beta^2 J^2}{2} \bar{\chi}_{p'}) \cosh(h_p)}{\cosh(\beta g \eta) + \exp(\frac{\beta^2 J^2}{2} \bar{\chi}_{p'}) \cosh(h_p)} \right]^2 ; \quad (4.76)$$

$$C_{\alpha\beta,\alpha\gamma} = \int_{-\infty}^{\infty} Dz_p \frac{\left(\exp(\frac{\beta^2 J^2}{2} \bar{\chi}_{p'}) \cosh(h_p) \right) \left(\exp(\frac{\beta^2 J^2}{2} \bar{\chi}_{p'}) \sinh(h_p) \right)^2}{\left(\cosh(\beta g \eta) + \exp(\frac{\beta^2 J^2}{2} \bar{\chi}_{p'}) \cosh(h_p) \right)^3} ; \quad (4.77)$$

$$C_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \int_{-\infty}^{\infty} Dz_p \left[\frac{\exp(\frac{\beta^2 J^2}{2} \bar{\chi}_{p'}) \sinh(h_p)}{\cosh(\beta g \eta) + \exp(\frac{\beta^2 J^2}{2} \bar{\chi}_{p'}) \cosh(h_p)} \right]^4 . \quad (4.78)$$

com

$$h_p \equiv h_p(q_{p'}, m_{p'}, H) = \beta \frac{H}{2} - \beta J_0 m_{p'} + \beta J \sqrt{q_{p'}} z_p . \quad (4.79)$$

O autovalor λ_{AT} será escrito na forma:

$$\lambda_{AT} = \frac{\beta^2 J^2}{2} - 2 \left(\frac{\beta^2 J^2}{2} \right)^2 \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} Dz_1 [I_1] \int_{-\infty}^{\infty} Dz_2 [I_2]} , \quad (4.80)$$

sendo

$$I_p(z) = \frac{\left[\cosh(\beta g \eta_p) \cosh(h_p) \exp(-\frac{\beta^2 J^2}{2} \bar{\chi}_p) + 1 \right]^2}{\left[\cosh(\beta g \eta_p) \exp(-\frac{\beta^2 J^2}{2} \bar{\chi}_p) + \cosh(h_p) \right]^4} , \quad (4.81)$$

com $p = 1$ ou 2 .

Avaliações numéricas do autovalor λ_{AT} mostram que ele realmente é negativo em baixas temperaturas. Portanto, as fases vidro de spin e mista são soluções instáveis e poderia ser utilizado um modelo onde a simetria de réplicas seja quebrada, de modo a torná-las estáveis. O autovalor é positivo nas fases paramagnética, antiferromagnética e de PARES. Esses e outros resultados serão expostos e analisados no próximo capítulo, onde apresentaremos diagramas de fases localizando a linha de Almeida-Thouless, caracterizada pelo autovalor $\lambda_{AT} = 0$.

Capítulo 5

Resultados

Conforme discutimos no capítulo anterior introduzimos um modelo de hamiltoniano com um termo de Ising e um termo de formação de pares BCS para tentar descrever um sistema que poderá exibir a competição entre as soluções paramagnética, antiferromagnética, vidro de spin e “supercondutividade” (que corresponde a solução onde há formação de pares de Cooper no espaço real).

A partir da obtenção da energia livre do sistema encontramos um conjunto de equações ponto de sela (ver equações (4.63), (4.64), (4.65) e (4.66)) e também o autovalor de Almeida-Thouless, dado pela equação (4.80), que marca a validade da estabilidade da solução vidro de spin encontrada, usando simetria de réplicas. Através das soluções numéricas destas equações podemos obter diagramas de fases que descrevem a competição entre as possíveis fases termodinâmicas: paramagnetismo, antiferromagnetismo, vidro de spin e formação de pares.

As fases termodinâmicas são caracterizadas pelos parâmetros de ordem m_A , m_B , q_A , q_B , η_A e η_B , quando estes apresentam soluções diferentes de zero. Quando as magnetizações m_A e m_B apresentam soluções não nulas, uma fase de ordem magnética poderá estar presente nas subredes A e B. Aos parâmetros η_A e η_B está relacionado uma possível formação de pares de Cooper no espaço real, também nas duas subredes. Associado a fase vidro de spin estão os parâmetros q_A e q_B diferentes de zero e a solução negativa para a equação do autovalor de Almeida-Thouless.

Para descrever os resultados obtidos com este estudo, dividimos este capítulo em

seções. Na seção 5.1 serão apresentados os resultados encontrados para vários valores do valor médio de distribuição gaussiana do acoplamento entre os spins J_0 , sendo o valor da medida do desvio J fixo, para vários valores de g/J e de temperatura T/J . Logo, na seção 5.1.1 mostramos a evolução da solução dos parâmetros de ordem à medida que o valor de J_0/J é aumentado, com a intensidade de pareamento $g = 4J$ e a temperatura T/J variável. A seção 5.1.2 apresenta a solução para os parâmetros η_A e η_B , que aparecem para um valor de g/J grande (no caso para $g = 10J$), onde variamos a temperatura T . Temos na seção 5.1.3 uma análise feita nos diagramas de fases que expressam as fase encontradas no problema e sua variação com o aumento de J_0/J .

5.1 Resultados variando J_0

Nas seções 5.1.1, 5.1.2 e 5.1.3 os resultados analisados consideram uma faixa de valores atribuídos para a média gaussiana de acoplamento entre os spins (J_0/J), variando de $0 \leq J_0 \leq 2J$, onde foram atribuídos vários valores para g/J . Os resultados nos mostram a presença das soluções mista e vidro de spin para baixas temperaturas, ocorrendo abaixo de $\lambda_{AT} = 0$. Constatamos também o surgimento de uma fase antiferromagnética para altas temperaturas, acima de $\lambda_{AT} = 0$. Obtemos para temperaturas ainda mais altas a fase paramagnética, quando o parâmetro g/J é pequeno, e ainda uma solução onde ocorre formação de pares de Cooper, quando o valor de g/J é grande.

5.1.1 Estudo dos Parâmetros de Ordem com g/J pequeno

Apresentamos aqui alguns gráficos obtidos numericamente a partir das equações (4.63), (4.64), (4.65) e (4.66), com o objetivo de acompanhar a evolução dos parâmetros de ordem, à medida que aumentamos a variável J_0/J , onde atribuímos um valor fixo para $g = 4J$ e variamos a temperatura T .

Como podemos ver no gráfico (5.1) as soluções numéricas dos parâmetros nos

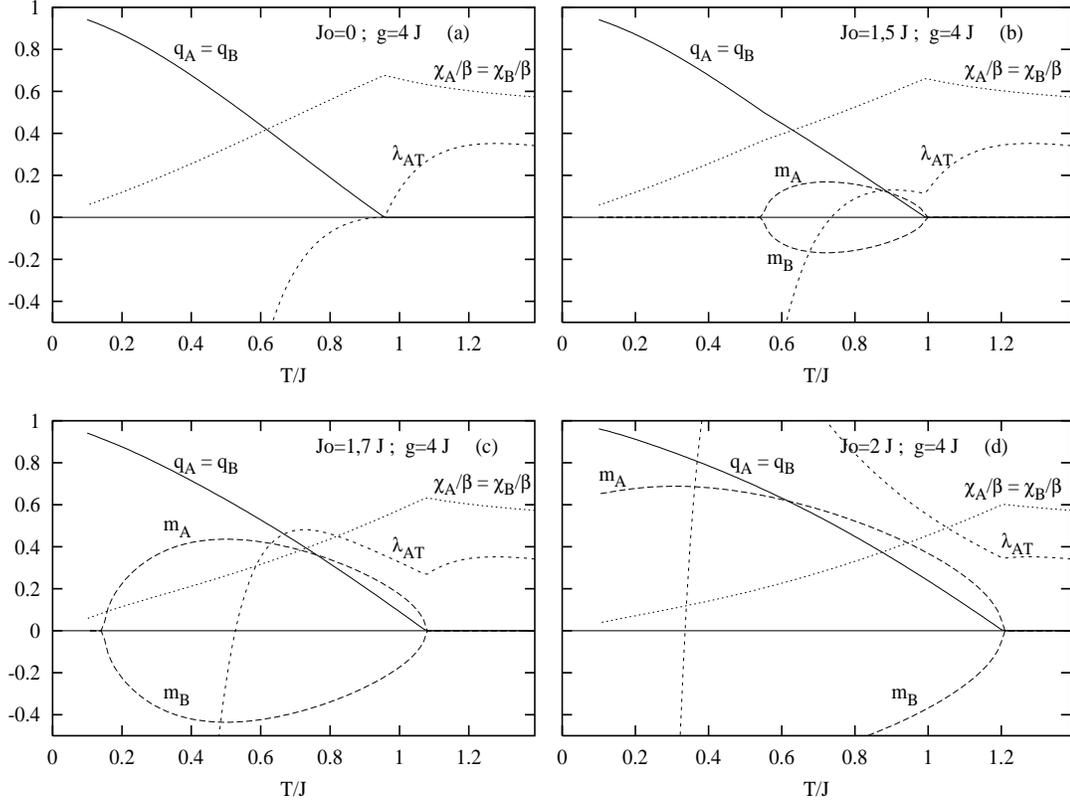


Figura 5.1: Representação gráfica da intensidade dos parâmetros de ordem com valores diferentes de J_0 para as duas sub-redes, variando a temperatura T e mantendo g fixo. A linha cheia representa $q_{A,B}$, a pontilhada representa a solução de Almeida e Thouless e $\bar{\chi}_{A,B}$, e as tracejadas representam $m_{A,B}$. (a) Para $J_0 = 0$ e $g = 4J$; (b) para $J_0 = 1,5J$ e $g = 4J$; (c) para $J_0 = 1,7J$ e $g = 4J$; (d) para $J_0 = 2J$ e $g = 4J$.

mostram que: $q_A = q_B = q$, $\eta_A = \eta_B = \eta$ e $m_A = -m_B = |m|$ (módulo da magnetização), sendo a suscetibilidade associada a $\bar{\chi}_A = \bar{\chi}_B = \bar{\chi}$.

A figura (5.1) apresenta em detalhes o comportamento dos parâmetros q , η , $\bar{\chi}$ e $|m|$ das duas subredes A e B (ou 1 e 2), para o valor fixo de $g = 4J$. Analisando o gráfico (5.1-a) vemos que abaixo de uma temperatura crítica (T_N), o parâmetro q torna-se de um modo contínuo diferente de zero, caracterizando uma transição de segunda ordem entre as fases paramagnética ($q = 0$, $\eta = 0$ e $|m| = 0$) e vidro de spin ($q \neq 0$, $\eta = 0$ e $|m| = 0$). Os resultados obtidos para $J_0 = 0$ concordam com os resultados observados no trabalho realizado por Magalhães e Theumann (1999). A transição para a fase vidro de spin (quando q deixa de ser nulo) é acompanhada por um pico na suscetibilidade estática, o que é esperado para a temperatura crítica

de congelamento dos spins T_f (ver figuras (2.3) e (2.4)). Abaixo da temperatura de transição os spins deixam de “flipar” com as variações térmicas, ficando congelados no espaço.

No gráfico (5.1-b), onde $J_0 = 1,5J$, observamos que as magnetizações $|m|$ deixam de ser nulas nas duas sub-redes de forma simétrica, mas com sinal contrário $m_A = -m_B$. Isto acontece em um pequeno intervalo de temperatura, representando o surgimento de uma solução antiferromagnética ($\eta = 0$, $q \neq 0$ e $|m| \neq 0$). Para baixas temperaturas encontramos uma fase mista, que apresenta soluções ($\eta = 0$, $q \neq 0$ e $|m| \neq 0$), mas que encontra-se abaixo da linha de Almeida-Thouless $\lambda_{AT} = 0$, com a configuração do sistema apresentando muitos estados metaestáveis. Esta fase mista está associada a um vidro de spin magnetizado [11]. A solução vidro de spin ($\eta = 0$, $q \neq 0$ e $|m| = 0$) encontra-se logo abaixo à fase mista quando diminuimos a temperatura, fazendo com que os parâmetros m_A e m_B passem a ser nulos.

No gráfico (5.1-c), observando o parâmetro $|m|$, vemos que a solução antiferromagnética tende a crescer, aparecendo em um intervalo de temperatura maior. Outro efeito observado é o crescimento da solução mista, abaixo de $\lambda_{AT} = 0$, diminuindo o intervalo de temperatura onde aparece a solução vidro de spin, de modo que esta encontra-se nesta condição para valores de temperatura muito baixos.

Constatamos através do gráfico (5.1-d), onde $J_0 > 1,7J$, que a solução com $|m| \neq 0$ se torna dominante para baixas temperaturas, isto é, ocorre um ordenamento magnético nos spins das duas sub-redes que prevalece para baixas temperaturas. A solução vidro de spin acaba sendo excluída. Para temperaturas muito baixas encontramos ainda uma fase mista com muitos estados metaestáveis abaixo de $\lambda_{AT} = 0$. Em todos os casos temos a igualdade da solução para o parâmetro $\bar{\chi}$ nas duas sub-redes, ou seja, $\bar{\chi}_A = \bar{\chi}_B$.

5.1.2 Estudo dos Parâmetros de Ordem com g/J grande

Estudando as soluções encontradas para $g/J \neq 0$, constatamos que ao aumentarmos o valor de g/J , mesmo para qualquer valor de J_0/J estudado, o parâmetro

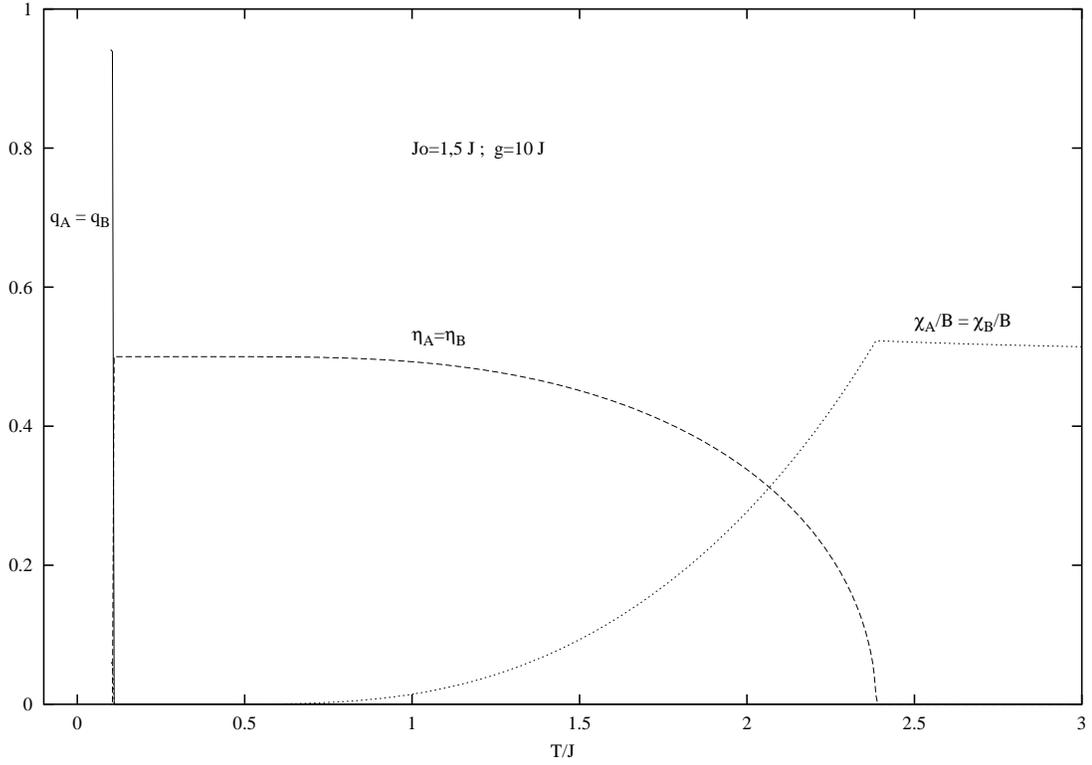


Figura 5.2: Representação gráfica da intensidade dos parâmetros de ordem com $J_0 = 1,5J$ nas sub-redes A e B, para um valor fixo de $g = 10J$, variando a temperatura T . A linha cheia representa $q_{A,B}$, a pontilhada $\bar{\chi}_{A,B}$ e a tracejada $\eta_{A,B}$.

η apresenta valores finitos, representando a “supercondutividade”, isto é, a solução de formação de pares de Cooper no espaço real ($\eta \neq 0$, $q = 0$ e $|m| = 0$) dentro de um determinado intervalo de temperatura. Isto pode ser observado no gráfico (5.2) para $g = 10J$.

Observamos também que para temperaturas suficientemente altas a solução é paramagnética. Na temperatura de transição da solução de formação de pares $\eta \neq 0$ para a solução paramagnética, ocorre uma transição de fase contínua, ou seja, de segunda ordem. Quando diminuimos a temperatura vemos que a solução PARES sofre novamente uma transição em uma dada temperatura de congelamento que coincide com a linha onde $\lambda_{AT} = 0$. Nesta temperatura de transição o parâmetro η se anula descontinuamente, e a solução encontrada será o vidro de spin $q \neq 0$, que gera uma estrutura desordenada congelada no espaço. Desse modo a transição do vidro de spin com a fase de solução PARES é de primeira ordem. As soluções

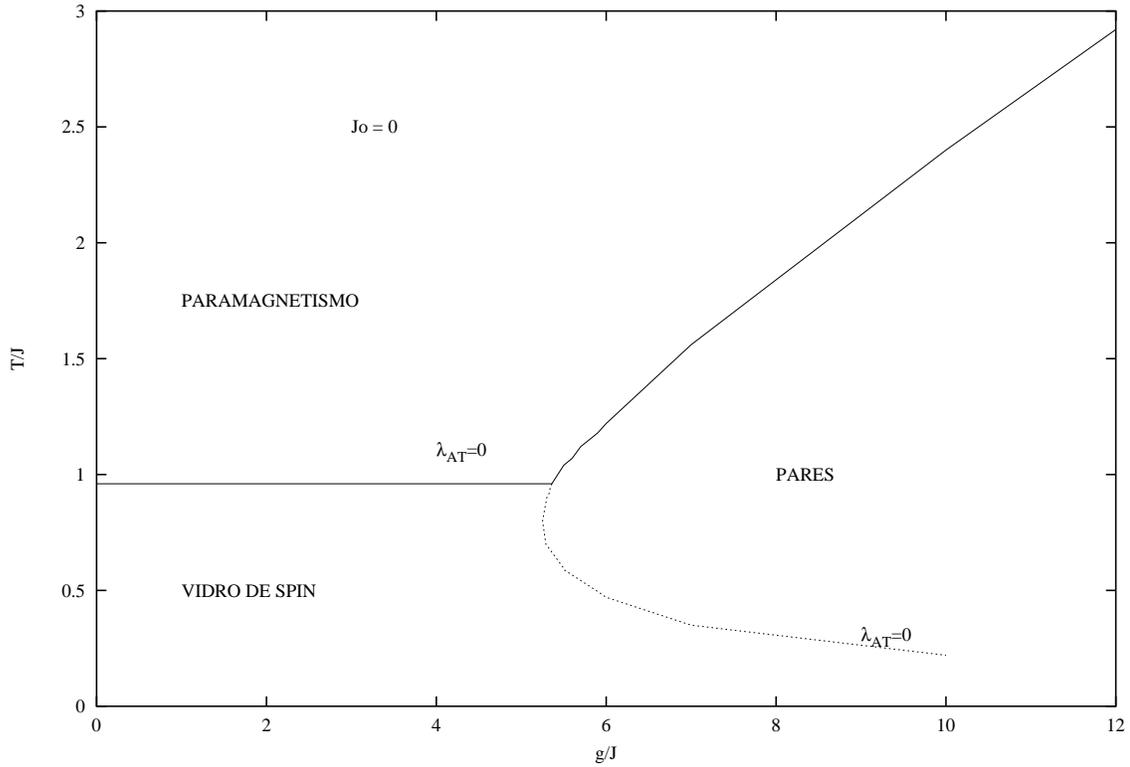


Figura 5.3: Diagrama de fases T/J versus g/J com $J_0 = 0$. A linha cheia representa uma transição de segunda ordem e a pontilhada uma transição de primeira ordem. A linha onde o autovalor $\lambda_{AT} = 0$ acompanha todas transições para a fase SG.

encontradas para η também são iguais nas duas sub-redes A e B, ou seja, $\eta_A = \eta_B$.

5.1.3 Análise dos Diagramas de Fases

Uma maneira concisa de representar as informações obtidas de um determinado sistema é através de um diagrama de fases. Nestes diagramas, representa-se o número de tipos de fases em equilíbrio em um certo sistema e as possíveis regiões das soluções termodinâmicas em estudo em função de parâmetros chamados de variáveis intensivas, neste caso o termo de intensidade de pareamento g/J e a temperatura T/J . A competição entre paramagnetismo, antiferromagnetismo, vidro de spin e formação de pares será discutida em termos dos diagramas que serão construídos variando estes dois parâmetros e fixando J_0/J .

No primeiro diagrama, apresentado na figura (5.3), tomamos o valor de $J_0 = 0$

e o resultado observado são três fases termodinâmicas que variam de acordo com a intensidade dos parâmetros T/J e g/J . Para altas temperaturas e um valor pequeno de g/J o gráfico nos mostra uma solução paramagnética. Ainda com o valor de g/J pequeno, mas agora diminuindo a temperatura, observamos que a solução muda para uma fase vidro de spin, isso acontece abaixo de uma temperatura de $0,957J$ [19]. Como a transição das duas fases ocorre de uma maneira contínua, fica caracterizada uma transição de segunda ordem entre as soluções, sendo que o autovalor de Almeida-Thouless (4.80) igual a zero (linha de Almeida-Thouless) acompanha toda linha de transição, inclusive para g/J grande, e é negativo na fase vidro de spin que fica abaixo da linha. Portanto, a solução com simetria de réplicas não é válida, o sistema encontra-se com uma configuração complexa, e devido a isto, um único parâmetro de ordem não descreve de forma satisfatória o sistema. É necessário utilizar uma função dos parâmetros q . Analisando as soluções para os parâmetros de ordem, a medida que o parâmetro g/J cresce, vemos o surgimento da solução de formação de pares do tipo BCS ($q = 0$, $|m| = 0$ e $\eta \neq 0$) que, para altas temperaturas, apresenta uma transição de segunda ordem da fase paramagnética para a de PARES.

O aumento do valor do parâmetro J_0 nos mostra, como resultado das equações dos parâmetros de ordem, que a magnetização $|m|$ deixa de ser nula. Na figura (5.4), onde o valor dado para J_0 é $1,5J$, observamos que para valores de g/J baixos encontram-se três tipos de fases: para altas temperaturas a solução é paramagnética ($q = 0$, $|m| = 0$ e $\eta = 0$); uma solução antiferromagnética ($q \neq 0$, $|m| \neq 0$ e $\eta = 0$) surge quando diminuimos a temperatura, imediatamente antes da solução vidro de spin ($q \neq 0$, $|m| = 0$ e $\eta = 0$), que continua existindo para temperaturas ainda mais baixas. Entre as soluções antiferromagnéticas e vidro de spin encontra-se uma fase mista, também chamada de vidro de spin magnetizado, que está localizada logo abaixo da linha de Almeida-Thouless, cujas equações dos parâmetros de ordem possuem soluções $q \neq 0$, $|m| \neq 0$ e $\eta = 0$. O autovalor $\lambda_{AT} = 0$ será encontrado delimitando o fim da fase antiferromagnética, e demarcando o início da fase mista, sendo negativo (ver gráfico (5.1-b)) abaixo desta linha, indicando a instabilidade das

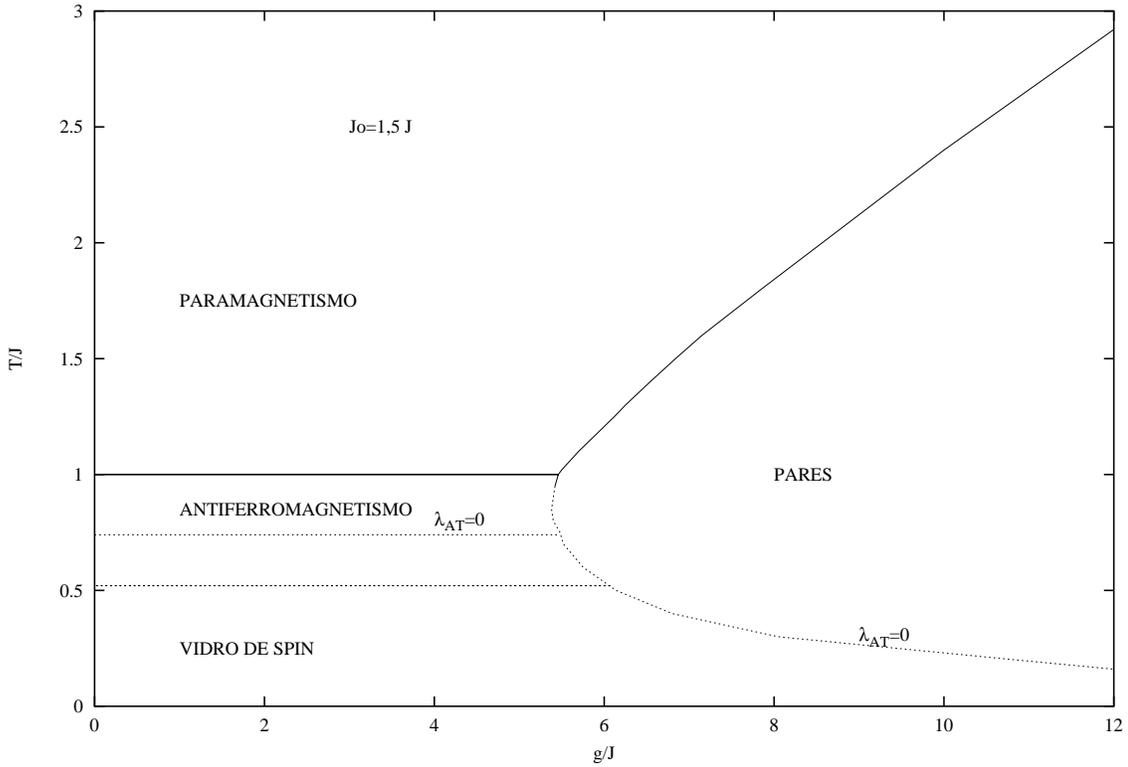


Figura 5.4: Diagrama de fases $T/J \times g/J$ para $J_0 = 1,5J$. Conforme aumenta a temperatura e J_0 , o diagrama apresenta uma fase AF antes da fase SG. A linha para o autovalor $\lambda_{AT} = 0$, encontra-se no meio da fase AF e acompanha a transição da fase PARES para SG. Abaixo da linha $\lambda_{AT} = 0$ até a linha de transição para a fase SG, encontra-se uma fase mista, chamada de vidro de spin magnetizado.

fases encontradas abaixo da mesma. Nesta solução é utilizado ansatz de simetria de réplicas para o cálculo da função de partição do sistema. Por outro lado, para um valor de g/J alto, o parâmetro η deixa de ser nulo, caracterizando uma solução de formação de pares ($q = 0$, $|m| = 0$ e $\eta \neq 0$). A transição desta fase com a fase paramagnética ocorre de forma contínua (transição de segunda ordem), mas no caso da transição da fase PARES para a fase vidro de spin, a descontinuidade caracteriza uma transição de primeira ordem.

A discussão sobre as soluções encontradas nos mostra que ao aumentamos o valor de J_0/J , cada vez mais se torna predominante, para baixas temperaturas e um valor pequeno de g/J , a solução antiferromagnética acompanhada da solução mista, segundo nos mostra a figura (5.5), à proporção que se reduz a fase vidro de spin. A solução paramagnética continua dominante para altas temperaturas e g/J

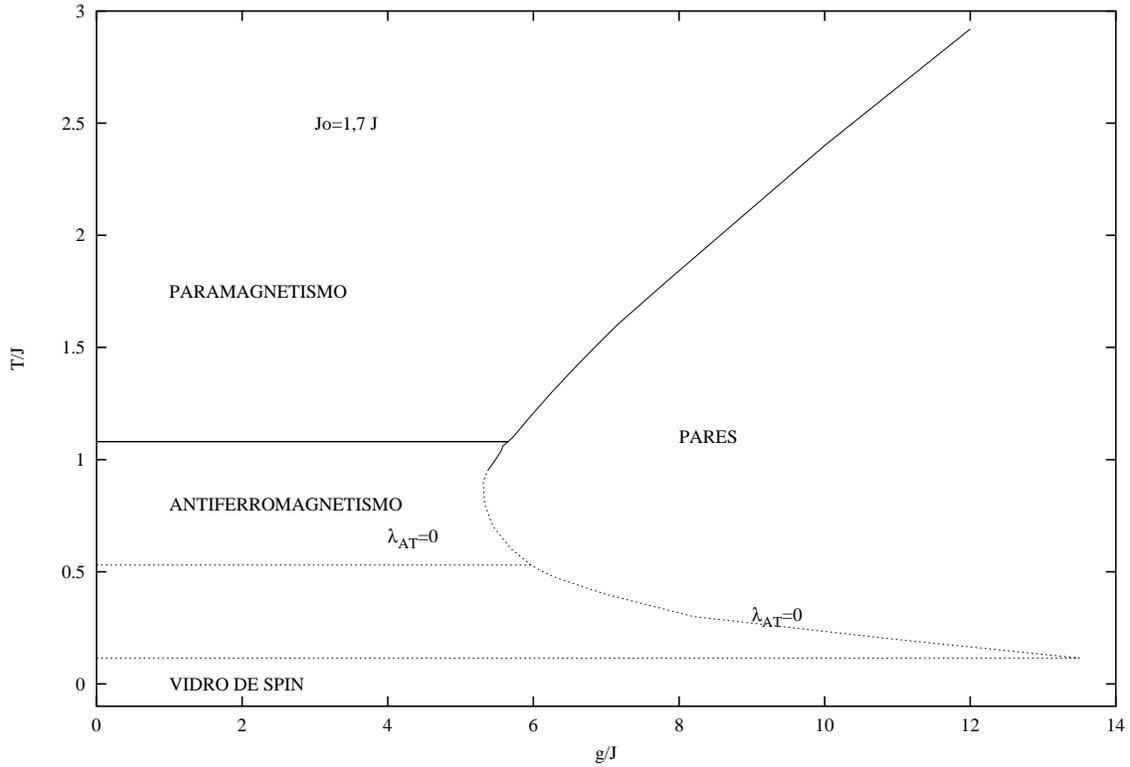


Figura 5.5: Diagrama de fases $T/J \times g/J$ para $J_0 = 1,7J$. A fase SG diminui com o aumento do valor de J_0 . Para baixas temperaturas as fases AF e mista começam a ser dominantes. A linha de transição $\lambda_{AT} = 0$ corta a fase AF e acompanha a linha de transição com a solução PARES.

pequeno, sendo que aumenta o valor da temperatura de transição para com a fase antiferromagnética. Para valores maiores de g/J o que aparece como solução é a fase de formação de pares. As transições sofridas ao longo das mudanças de fase continuam as mesmas, assim como também o autovalor $\lambda_{AT} = 0$, que encontra-se agora numa temperatura mais baixa da encontrada na figura 5.4, e cuja linha está no fim da solução antiferromagnética, delimitando o começo da fase mista, acompanhando a linha de transição para a solução PARES, indicando o início de um sistema com estados metaestáveis.

As fases apresentadas no gráfico (5.6) confirmam as suposições feitas sobre valores de $J_0 > 1,7J$. A solução vidro de spin desaparece e as fases antiferromagnética e mista são as únicas soluções encontradas para baixas temperaturas e g/J pequeno, observadas abaixo da fase paramagnética que ocorre nas altas temperaturas. A

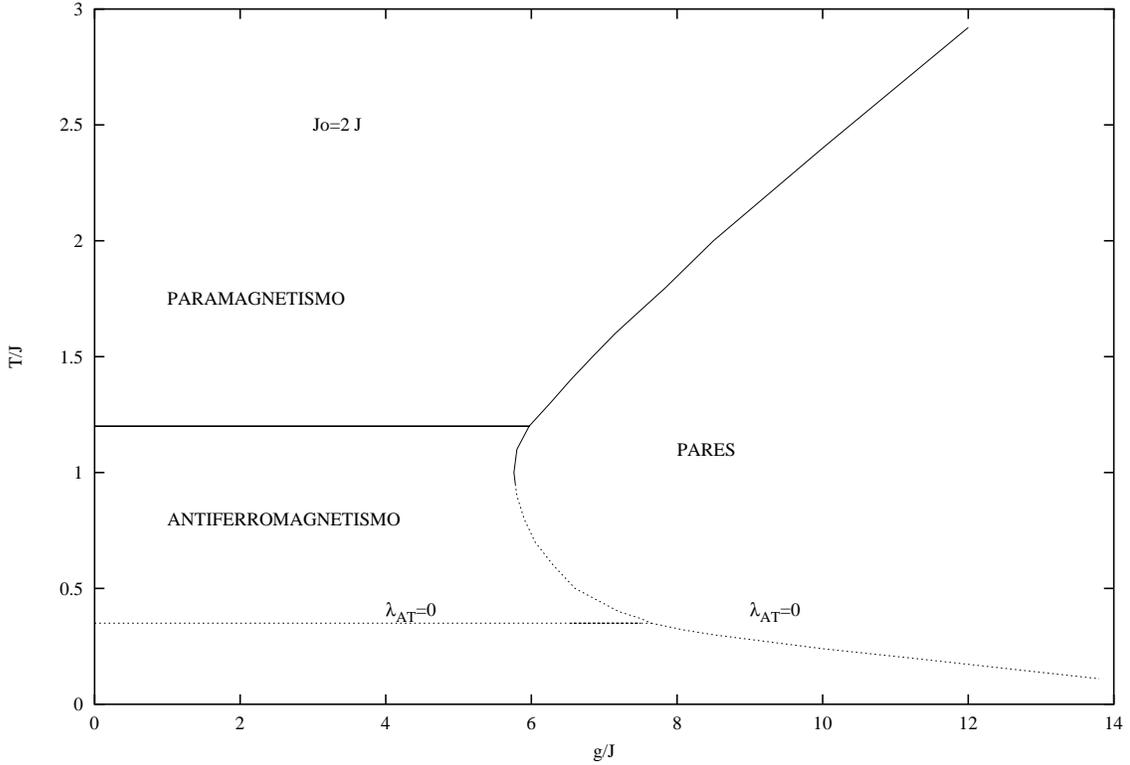


Figura 5.6: Diagrama de fases $T/J \times g/J$ para $J_0 = 2J$. Para valores de $J_0 > 1,7J$ a solução SG desaparece, sendo que a solução AF domina para temperaturas baixas. Ainda encontramos a fase mista para temperaturas muito baixas. A linha do autovalor $\lambda_{AT} = 0$ encontra-se na fase AF e na linha de transição com a solução PARES.

temperatura de transição do paramagnetismo para o antiferromagnetismo aumenta, e diminui o valor da temperatura de transição para a fase mista, juntamente com a temperatura da linha $\lambda_{AT} = 0$. A fase de formação de pares ainda é a solução dominante para quando g/J é grande, e sua transição para o paramagnetismo, tanto como a do paramagnetismo para o antiferromagnetismo são de segunda ordem. Para temperaturas mais baixas encontra-se o autovalor $\lambda_{AT} = 0$, abaixo da solução antiferromagnética que para altos g/J encontra e acompanha a linha de transição com a fase PARES.

A solução vidro de spin que apresenta-se dominante para baixas temperaturas e g/J pequeno, quando o valor de J_0 é nulo (5.3), acaba desaparecendo à medida que aumentamos o valor de J_0/J (5.6), dando lugar a solução antiferromagnética e mista para T/J pequeno. A linha do autovalor $\lambda_{AT} = 0$, que separa a fase

antiferromagnética da fase mista e acompanha a transição para a solução PARES, demarca a estabilidade da solução com simetria de réplicas, deixando claro que as fases mista e vidro de spin não podem ser descritas por um único parâmetro de ordem, pois o sistema com estados metaestáveis devido a frustração, possui uma multiplicidade de mínimos de energia, que devem ser representados por uma função dos parâmetros que descrevam todos estes mínimos.

Capítulo 6

Conclusão

No trabalho aqui desenvolvido fizemos um estudo de um modelo para sistemas, cujas soluções das equações obtidas nos permitem estudar a competição entre fases termodinâmicas como: o paramagnetismo, o antiferromagnetismo, o vidro de spin e formação de pares do tipo BCS no espaço real. Estas fases dependem das relações existentes de um conjunto de parâmetros, como: J_0 que é associado a média, J que nos dá a medida do desvio ou variância e g que determina o acoplamento em pares nos sítios da rede. O modelo consiste de um hamiltoniano com um termo de Ising expresso por operadores fermiônicos de spin, representados por combinações bilineares dos operadores fermiônicos de criação e destruição, e um termo BCS local que favorece a dupla ocupação dos sítios, sendo composto por duas sub-redes, e cujas interações se dão entre spins de sub-redes diferentes. O termo que acopla os spins J_{ij} trata as interações como sendo de longo alcance, e segue uma distribuição de probabilidades gaussiana. No mecanismo BCS o acoplamento ocorre entre férmions localizados (Magalhães e Theumann, 1999), possibilitando a solução de formação de pares.

Para escrever a função de partição através do hamiltoniano, constatamos que esta possui operadores de spin que satisfazem as relações de comutação, sendo escritos em segunda quantização. Este operador admite uma ocupação de dois férmions por sítio (com spins opostos), tendo cada sítio quatro estados quânticos possíveis, onde dois não são magnéticos. Utilizando o formalismo das integrais de caminho

fermiônicas na função de partição, os operadores fermiônicos são substituídos pelas variáveis de Grassmann dependentes do tempo. O problema despreza as correlações temporais dos operadores de spin. Fazemos então uma aproximação estática, o que nos fornece o limite superior para o potencial termodinâmico. O procedimento utilizado, proposto por Theumann e Vieira Gusmão (1984), toma o potencial químico ($\mu = 0$), para que se tenha em média um férmion por sítio (“half-filling”).

Para o cálculo do potencial termodinâmico devemos levar em conta que a função de partição possui uma variável aleatória associada ao termo vidro de spin, portanto calculando uma média configuracional deste potencial. O método das réplicas nos permite obter o potencial termodinâmico por sítio, cujas linearizações são obtidas pela transformação de Hubbard-Stratonovich, introduzindo campos auxiliares. Para avaliar estas integrais sobre os campos, utilizamos as equações ponto de sela.

Partindo das soluções das equações ponto de sela, encontramos um conjunto de equações acopladas, não lineares, para os parâmetros de ordem, sendo que estas, resolvidas por nós numericamente, permitem-nos a construção de diagramas de fases. A fim de avaliar as soluções obtidas por meio das equações ponto de sela e simetria de réplicas, fizemos um estudo do autovalor de Almeida-Thouless (λ_{AT}). Quando este autovalor é negativo, $\lambda_{AT} < 0$, as soluções encontradas são instáveis. As fases encontradas abaixo da linha $\lambda_{AT} = 0$ possuem o autovalor negativo, associado a matriz do parâmetro de ordem q replicado, de onde conclui-se portanto, que a solução com simetria de réplicas, nesta região, é instável.

Encontramos como possíveis soluções as fases paramagnética e de pares, que ocorrem para determinados valores dos parâmetros T/J e g/J , para as quais $\lambda_{AT} > 0$, característico da estabilidade dessas soluções. Também podemos considerar uma fase vidro de spin, para os mesmos parâmetros, que apresenta o autovalor $\lambda_{AT} < 0$ em toda sua extensão, sendo portanto, uma solução instável. A linha de transição, quando λ_{AT} deixa de ser positivo, encontra-se na fronteira com a fase antiferromagnética, e demarca o início de uma fase mista, onde ocorre um vidro de spin magnetizado. Estas fases antiferromagnética e mista surgem entre as fases paramagnética e vidro de spin, quando o valor de $J_0 \geq 1,5J$. Na fase mista observamos

a presença de uma região instável quanto à simetria de réplicas, devido ao fato desta encontrar-se abaixo da linha $\lambda_{AT} = 0$, o que nos mostra que o ordenamento magnético ainda está presente (Bray e Moore, 1980b), embora a disposição dos spins seja aleatória. As soluções antiferromagnética e mista são favorecidas através do aumento do acoplamento médio entre os spins (J_0/J), sendo que a solução PARES está relacionada com a variável g/J , cujo aumento na intensidade favorece a dupla ocupação dos sítios. Podemos afirmar que as transições apresentadas nos diagramas de fases surgem como consequência de flutuações térmicas e quânticas. Quando a temperatura é suficientemente elevada as transições de fases são predominantemente de natureza térmica. Com o decréscimo da temperatura, as flutuações quânticas começam a exercer um papel importante no caráter da solução obtida.

Nós estudamos um modelo procurando soluções que apresentassem diagramas de fases onde ocorresse a competição entre as fases “supercondutora”, vidro de spin e antiferromagnética. Esperamos que os resultados obtidos possam ser relevantes para o estudo de sistemas reais que apresentam uma competição entre as fases de ordenamento magnético e supercondutividade.

As fases mista e vidro de spin encontradas para valores pequenos de J_0/J , e cujo vidro de spin desaparece quando o valor J_0/J aumenta, não são soluções estáveis usando simetria de réplicas, devido ao fato de estarem abaixo de $\lambda_{AT} = 0$. Uma possível extensão para este trabalho seria quebrar a simetria de réplicas, forçando o autovalor λ_{AT} a ser sempre positivo. A quebra de simetria de réplicas é uma ferramenta muito importante no cálculo da energia livre do sistema, por melhor caracterizar as estruturas complexas como o vidro de spin.

Apêndice A

A álgebra de números que anticomutam é conhecida como Álgebra de Grassmann. A utilização destes números se deve à construção dos estados coerentes fermiônicos, que são autoestados dos operadores de destruição, e ao formalismo das integrais de caminho. Neste apêndice, introduziremos algumas propriedades essenciais para esta álgebra.

Uma álgebra de Grassmann é definida por um conjunto de geradores representados por $\{\phi_\alpha\}$, com $\alpha = 1, 2, \dots, n$; que expressam a seguinte relação de anticomutação:

$$\{\phi_\alpha, \phi_\beta\} \equiv \phi_\alpha\phi_\beta + \phi_\beta\phi_\alpha = 0 \quad (\text{A.1})$$

para $\forall \alpha, \beta$; de forma que em particular,

$$\phi_\alpha\phi_\alpha = 0 \quad \text{ou} \quad \phi_\alpha^2 = 0. \quad (\text{A.2})$$

A base dessa álgebra é feita de todos os produtos distintos destes geradores. A dimensão para essa álgebra, com um número de n geradores, é de 2^n elementos da base distintos, produzida pelas duas possibilidades de incluir cada gerador 0 ou 1 vezes em cada um dos n geradores. Um número na álgebra de Grassmann é uma combinação linear com coeficientes complexos de números $\{1, \phi_{\alpha_1}, \phi_{\alpha_2}, \dots, \phi_{\alpha_1}\phi_{\alpha_2} \dots \phi_{\alpha_n}\}$ com o índice α_i ordenado progressivamente.

Supondo um número $n = 2p$, de um conjunto de p geradores, podemos definir uma operação de conjugação (*) relacionando a cada gerador ϕ_α um gerador conjugado ϕ_α^* , cujas propriedades serão:

$$\begin{aligned} (\phi_\alpha)^* &= \phi_\alpha^*; \\ (\phi_\alpha^*)^* &= \phi_\alpha; \\ (\lambda\phi_\alpha)^* &= \lambda^*\phi_\alpha^*; \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

para $\forall \lambda \in$ aos números complexos, sendo que para qualquer produto de geradores encontramos a relação

$$(\phi_{\alpha_1}\phi_{\alpha_2} \dots \phi_{\alpha_p})^* = \phi_{\alpha_p}^*\phi_{\alpha_{p-1}}^* \dots \phi_{\alpha_1}^*. \quad (\text{A.4})$$

De modo a simplificar a notação, fazemos o uso de dois geradores ϕ e ϕ^* , sendo a álgebra generalizada através de quatro números $\{1, \phi, \phi^*, \phi^*\phi\}$. De acordo com a propriedade (A.2) qualquer função analítica definida nesta álgebra é uma função linear

$$f(\phi) = f_0 + f_1\phi, \quad (\text{A.5})$$

que representa os estados coerentes de uma função de onda. De forma similar, o estado coerente de um operador na álgebra de Grassmann deverá ter todos os elementos expressos por polinômios de primeira ordem em relação aos geradores, e será representado pela função:

$$A(\phi^*, \phi) = a_0 + a_1\phi + \bar{a}_1\phi^* + a_{12}\phi^*\phi, \quad (\text{A.6})$$

Um operador derivação ($\frac{\partial}{\partial\phi}$) poderá ser definido para as funções com variáveis de Grassmann, sendo idêntico à derivada realizada no plano complexo ($\frac{\partial}{\partial\phi}\phi = 1$; $\frac{\partial}{\partial\phi}1 = 0$), exceto pelo fato de que o operador $\frac{\partial}{\partial\phi}$, para atuar em ϕ , deverá estar adjacente às relações de comutação da variável, conforme dado abaixo:

$$\frac{\partial}{\partial\phi}(\phi^*\phi) = \frac{\partial}{\partial\phi}(-\phi\phi^*) = -\phi^*. \quad (\text{A.7})$$

Um operador linear, definido como sendo uma integral sobre variáveis de Grassmann, deverá satisfazer as seguintes propriedades: exibir resultado nulo, seja de uma integral de uma diferencial exata quanto o de uma diferencial de uma integral; e havendo o produto de duas variáveis, onde a derivada de uma delas é zero, a integração levará em conta somente a outra variável. Este operador é definido por

$$\begin{aligned} \int d\phi \, 1 &= 0 \\ \int d\phi \, \phi &= 1, \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

onde o resultado da integral sobre uma variável, conforme visto em (A.8), é independente da própria variável. Esta operação é idêntica a derivação para a álgebra de Grassmann. O fato é que metade dos geradores estão definidos como variáveis

conjugadas, sendo necessário definir este operador integral para essas variáveis

$$\begin{aligned} \int d\phi^* 1 &= 0 \\ \int d\phi^* \phi^* &= 1, \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Ilustramos a seguir a aplicação deste operador utilizando as integrais Gaussianas com variáveis de Grassmann. Desejando estabelecer uma identidade análoga para as variáveis de Grassmann, necessitamos escrever o operador integral como segue

$$I_1 = \int d\phi^* d\phi \exp(-\phi^* a \phi). \quad (\text{A.10})$$

Fazemos agora a expansão da exponencial em uma série de potências. Podemos utilizar a relação (A.1) para reescrever a integral na forma

$$I_1 = \int d\phi^* d\phi (1 - \phi^* a \phi) = a. \quad (\text{A.11})$$

Finalmente, obtemos a fórmula da integral gaussiana, que é uma generalização da integral (A.10):

$$I_n = \int d\phi_1^* d\phi_1 d\phi_2^* d\phi_2 \cdots d\phi_n^* d\phi_n \exp\left(-\sum_{i,j=1}^n \phi_i^* a_{ij} \phi_j\right), \quad (\text{A.12})$$

onde, de acordo com (A.11), podemos expandir o integrando e reescrevê-lo de modo a se tornar

$$\exp\left(-\sum_{i,j=1}^n \phi_i^* a_{ij} \phi_j\right) = \prod_{i,j=1}^n \exp(-\phi_i^* a_{ij} \phi_j) = \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^n (1 + \phi_j a_{ij} \phi_i^*). \quad (\text{A.13})$$

Os únicos termos para os quais a solução da integral Gaussiana (A.12) é diferente de zero são aqueles que apresentam produtos de todos os ϕ_i , onde $\delta_{ij} = 1$ para $i = j$. Abrindo o produtório, temos

$$\sum_{\{P\}} a_{P_n,n} a_{P_{n-1},n-1} \cdots a_{P_1,1} \phi_{P_n,n} \phi_{P_{n-1},n-1}^* \phi_{P_{n-1},n-1} \phi_{P_{n-1},n-1}^* \cdots \phi_{P_1,1} \phi_{P_1,1}^* \quad (\text{A.14})$$

com a soma sobre $\{P\}$ representando todas as possíveis permutações. Logo, usando as reações de anticomutação nos geradores, a fim de obter a ordem $\phi_n \phi_n^* \cdots \phi_1 \phi_1^*$,

onde o sinal das permutações encontrado será levado em conta, temos o resultado da integral dado por

$$I_n = \sum_p \prod_{i=1}^n (-1)^{P_{p_i,i}} a_{P_i,i} = \det(\underline{a}) , \quad (\text{A.15})$$

sendo \underline{a} uma matriz que representa os elementos a_{ij} da equação (A.13).

Apêndice B

Faremos aqui o cálculo da integral funcional com variáveis de Grassmann, encontrada na equação (4.48), que possui a seguinte forma

$$\Lambda' = \int D[\phi^* \phi] e^{\zeta(\beta, \mu, g, \eta, h)} . \quad (\text{B.1})$$

As notações abreviadas em (B.1) são dadas pelas expressões:

$$D[\phi^* \phi] = \prod_{n=-\infty}^{\infty} \prod_{s=\uparrow, \downarrow} d\phi_s^*(\omega_n) d\phi_s(\omega_n) , \quad (\text{B.2})$$

e

$$\zeta(\beta, \mu, g, \eta, h) = \beta g \sum_{n=-\infty}^{\infty} \underline{\phi}^\dagger(\omega_n) \underline{\eta} \underline{\phi}(\omega_n) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \underline{\phi}^\dagger(\omega_n) \underline{G}_1^{-1}(\omega_n) \underline{\phi}(\omega_n) , \quad (\text{B.3})$$

com $\omega_n = (2n+1)\pi$ e as matrizes $\underline{\phi}^\dagger(\omega_n)$, $\underline{\eta}$ e $\underline{G}_1^{-1}(\omega_n)$ sendo representadas pelas equações (4.51), (4.32) e (4.49), respectivamente, encontradas no capítulo 4.

A solução da integral (B.1), parte diretamente da aplicação da equação (A.15), cujo resultado analítico é encontrado através do determinante da matriz relacionada com as variáveis de Grassmann contidas no expoente da exponencial. O expoente da equação (B.1) apresenta uma soma de matrizes (B.3), sendo reescrito como um produto de matrizes, do seguinte modo:

$$\underline{\Phi}^\dagger(\omega_n) = [\phi_\uparrow^*(\omega_n) \phi_\downarrow(-\omega_n)] \quad ; \quad \underline{\Phi}(\omega_n) = \begin{bmatrix} \phi_\uparrow(\omega_n) \\ \phi_\downarrow^*(-\omega_n) \end{bmatrix} \quad (\text{B.4})$$

cuja matriz associada ao produto de $\underline{\Phi}^\dagger(\omega_n)$ e $\underline{\Phi}(\omega_n)$ será

$$\underline{G}^{-1}(\omega_n) = \begin{pmatrix} a_{11}(\omega_n) & a_{12}(\omega_n) \\ a_{21}(\omega_n) & a_{22}(\omega_n) \end{pmatrix} . \quad (\text{B.5})$$

Realizando de maneira explícita o produto $\underline{\Phi}^\dagger(\omega_n) \underline{G}^{-1}(\omega_n) \underline{\Phi}(\omega_n)$, relacionando-o com os termos de (B.3), encontramos uma igualdade entre as duas expressões quando as seguintes relações são satisfeitas:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \phi_\uparrow^*(\omega_n) a_{11}(\omega_n) \phi_\uparrow(\omega_n) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi_\uparrow^*(\omega_n) [i\omega_n + \beta\mu + h] \phi_\uparrow(\omega_n) , \quad (\text{B.6})$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \phi_{\downarrow}(-\omega_n) a_{21}(\omega_n) \phi_{\uparrow}(\omega_n) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi_{\downarrow}(-\omega_n) \beta g \eta^* \phi_{\uparrow}(\omega_n) , \quad (\text{B.7})$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \phi_{\downarrow}^*(\omega_n) a_{22}(\omega_n) \phi_{\downarrow}(\omega_n) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi_{\downarrow}^*(\omega_n) [i\omega_n + \beta\mu - h] \phi_{\downarrow}(\omega_n) , \quad (\text{B.8})$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \phi_{\uparrow}^*(\omega_n) a_{12}(\omega_n) \phi_{\downarrow}^*(-\omega_n) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi_{\uparrow}^*(\omega_n) \beta g \eta \phi_{\downarrow}^*(-\omega_n) . \quad (\text{B.9})$$

Logo, reescrevendo a matriz $\underline{G}^{-1}(\omega_n)$, temos

$$\underline{G}^{-1}(\omega_n) = \begin{pmatrix} i\omega_n + \beta\mu + h & \beta g \eta \\ \beta g \eta^* & i\omega_n + \beta\mu - h \end{pmatrix} \quad (\text{B.10})$$

onde o expoente $\zeta(\beta, \mu, g, \Gamma, \eta, h)$ assume a forma

$$\zeta(\beta, \mu, g, \Gamma, \eta, h) = \sum_{n=0}^{\infty} \underline{\Phi}^{\dagger}(\omega_n) \underline{G}^{-1}(\omega_n) \underline{\Phi}(\omega_n) , \quad (\text{B.11})$$

com o somatório em n na equação (B.11) indo de zero ao infinito, para o expoente não apresentar termos repetidos. A integral funcional (B.1), de acordo com a equação (4.52) será

$$\Lambda' = \int D[\phi^* \phi] \exp \left[\sum_{n=0}^{\infty} \underline{\Phi}^{\dagger}(\omega_n) \underline{G}^{-1}(\omega_n) \underline{\Phi}(\omega_n) \right] . \quad (\text{B.12})$$

Aplicando, finalmente, a equação (A.15) para solucionar a integral gaussiana, encontramos

$$\Lambda' = \prod_{n=0}^{\infty} \det \underline{G}^{-1}(\omega_n) . \quad (\text{B.13})$$

Como resultado do cálculo do determinante da matriz $\underline{G}^{-1}(\omega_n)$, temos

$$\begin{aligned} \Lambda' &= \prod_{n=0}^{\infty} \left[i\omega_n + \sqrt{(\beta\mu)^2 + (\beta g \eta)^2} + h \right] \\ &\quad \times \left[i\omega_n + \sqrt{(\beta\mu)^2 + (\beta g \eta)^2} - h \right] , \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

de acordo com a equação encontrada em (4.55).

Apêndice C

O objetivo deste apêndice será apresentar o cálculo da soma feita sobre as frequências de Matsubara. Partindo da equação (4.55), encontrada no cálculo do determinante da integral funcional com variáveis de Grassmann (4.48), e tomando o logaritmo desta função (4.56), temos

$$\ln \Lambda' = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln [i\omega_n + \beta\mu' + h] + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln [i\omega_n + \beta\mu' - h] , \quad (\text{C.1})$$

onde $\sqrt{\mu^2 + g^2\eta^2}$ foi substituído por μ' e usando a frequência $\omega_n = (2n + 1)\pi$.

A soma sobre a frequência de Matsubara utiliza um método em que é necessário fazer a derivada da expressão (C.1) em relação a $\beta\mu'$:

$$\frac{\partial \ln \Lambda'}{\partial \beta\mu'} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{i\omega_n + \beta\mu' + h} + \frac{1}{i\omega_n + \beta\mu' - h} \right) . \quad (\text{C.2})$$

De acordo com Luttinger e Ward (1960) o somatório presente em (C.2) é substituído por uma integral no plano complexo, dada por:

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

onde a curva fechada C' contorna o eixo imaginário, e sendo

$$F(\omega) = \frac{1}{i\omega + \beta\mu' \pm h} , \quad (\text{C.4})$$

com $f(\omega)$ dada pela função de Fermi, que apresenta singularidades em todo o eixo imaginário, confirmando a expressão (C.3):

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

para $\omega = i(2n + 1)\pi$ e $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

A validade da equação (C.3) é obtida através do teorema dos Resíduos. A integral em torno de C' , que corresponde a todo o plano ω (o plano é dado pelos eixos real e imaginário), será igual a integral do resíduo em torno de C' no eixo imaginário, que engloba os múltiplos ímpares de π no eixo, mais os resíduos dos pólos de $F(\omega)$ no

eixo real. Se a integral de $F(\omega)f(\omega)$ em C tende a zero quando $C \rightarrow \infty$ (Mattuck, 1992), podemos escrever

$$\begin{aligned} \oint_C F(\omega)f(\omega)d\omega &= 0 \\ &= \oint_{C'} F(\omega)f(\omega)d\omega + 2\pi i \sum \text{resíduos de } F(\omega)f(\omega) , \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

onde $F(\omega)$ são os resíduos que correspondem aos pólos do eixo real. Assim, podemos retomar a equação (C.3), definindo $\sum_{n=-\infty}^{\infty} F(i\omega_n)$ como a soma dos resíduos de $F(\omega)f(\omega)$ para os pólos de $F(\omega)$ no eixo real.

No cálculo das somas da expressão (C.2), levaremos em conta uma transformação partícula-buraco [19] nos férmions de spin para baixo, introduzida na dedução da função de partição (4.29), onde foi utilizado o formalismo de matrizes (equação 4.59):

$$\langle \hat{N} \rangle = \langle \hat{n}_\uparrow \rangle - (1 - \langle \hat{n}_\downarrow \rangle) . \quad (\text{C.7})$$

A função $f(\omega)$ portanto, será escrita como uma combinação das funções de Fermi para partículas

$$f^-(\omega) = \frac{1}{e^\omega + 1} \quad (\text{C.8})$$

e para os buracos

$$f^+(\omega) = 1 - \frac{1}{e^\omega + 1} ; \quad (\text{C.9})$$

A integral presente na equação (C.3) será reescrita de forma a incluir este ajuste:

$$\begin{aligned} \oint_{C'} F(\omega)f(\omega)d\omega &= \oint_{C'} d\omega F(\omega) \frac{1}{2} [f^-(\omega) - f^+(\omega)] \\ &= - \oint_{C'} d\omega F(\omega) \frac{1}{2} [f^+(\omega) - f^-(\omega)] . \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

A soma das frequências de Matsubara da expressão (C.2), através do teorema dos resíduos, será calculada pela equação

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} F(i\omega) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C'} d\omega F(\omega) \frac{1}{2} [f^+(\omega) - f^-(\omega)] . \quad (\text{C.11})$$

Através da qual a expressão (C.2) assume a forma

$$\frac{\partial \ln \Lambda'}{\partial \beta \mu'} = \frac{1}{2} \left(\frac{\exp(\beta \mu')}{\exp(\beta \mu') + \exp(-h)} - \frac{\exp(-\beta \mu')}{\exp(-\beta \mu') + \exp(-h)} \right) . \quad (\text{C.12})$$

Realizando o processo inverso ao inicial, onde se integra essa expressão (C.2) em relação a $\beta\mu'$, obtemos

$$\begin{aligned}\ln \Lambda' &= \frac{1}{2} \left[\ln \left(\exp(\beta\mu') + \exp(-h) \right) + \ln \left(\exp(-\beta\mu') + \exp(-h) \right) \right] \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \ln \left[\left(\exp(\beta\mu') + \exp(-h) \right) \left(\exp(-\beta\mu') + \exp(-h) \right) \right] \right\} . \quad (\text{C.13})\end{aligned}$$

Finalmente, após uma certa álgebra e usando uma relação trigonométrica, podemos escrever Λ' da seguinte forma

$$\Lambda' = \cosh \beta\mu' + \cosh h . \quad (\text{C.14})$$

Referências Bibliográficas

- [1] BINDER, K.; YOUNG, A. P. **Rev. Mod. Phys.** **58**, p. 801, 1986.
- [2] BRAY, A. J.; MOORE, M. A. **J. Phys. C: Solid St. Phys.** **13**, p. L655, 1980a.
- [3] BRAY, A. J.; MOORE, M. A. **J. Phys. C: Solid St. Phys.** **13**, p. 419, 1980b.
- [4] CHOU, F. C.; BELK, N. R.; KASTNER, M. A.; BIRGENEAU, R. J. **Phys. Rev. Lett.** **75**, p. 2204, 1995.
- [5] DAGOTTO, E. **Nanoscale Phase Separation and Colossal Magnetoresistance** , p. 273-85, 2003.
- [6] DAVIDOV, D.; BABERSCHKE, K.; MYDOSH, J. A.; NIEUWENHUYS, J. A. **J. Phys. F: Metal Phys.** **7**, p. L47, 1977.
- [7] DIRAC, P. A. M. **Proceedings of the Royal Society, A** **114**, p. 243-65, 1927.
- [8] EDWARDS, S. F.; ANDERSON, P. W. **J. Phys. F: Metal Phys.** **5**, p. 965, 1975.
- [9] de ALMEIDA, J. R. L.; THOULESS, D. J. **J. Phys. A: Math. Gen.** **11**, p. 983, 1978.
- [10] FELDMANN, H.; OPPERMANN, R. **Eur. Phys. J. B** **10**, p. 429, 1999.
- [11] FISHER, K. H.; HERTZ, J. A. **Spin Glasses**, (Press Syndicate of the University of Cambridge), 1993.

- [12] ISHII, H.; YAMAMOTO, T. **J. Phys. C: Solid State Phys.** **18**, p. 6225, 1985.
- [13] JORDAN, P. E WIGNER, E. **Zeitschrift für Physik**, **47**, p. 631-51, 1928.
- [14] KIRKPATRICK, S.; SHERRINGTON, D. **Phys. Rev. B** **17**, p. 4384, 1978.
- [15] KORENBLIT, I. Y.; SHENDER, E. F. **Sov. Phys. JETP** **62**, p. 1030, 1985.
- [16] LUTTINGER, J. M.; WARD, J. C. **Phys. Rev.** **118**, p. 1417, 1960.
- [17] MAGALHÃES, S. G.; SCHMIDT, A. A. **Phys. Rev. B** **62**, p. 11686, 2000.
- [18] MAGALHÃES, S. G.; SCHMIDT, A. A.; ZIMMER, F.M.; THEUMANN, A.; COQBLIN, B. **Eur. Phys. J. B** **34**, p. 447-453, 2003.
- [19] MAGALHÃES, S. G.;THEUMANN, A. **Eur. Phys. J. B** **9**, p. 5, 1999.
- [20] MAGALHÃES, S. G.;ZIMMER, F. M. **Eur. Phys. J. B** **43**, p. 187-193, 2005.
- [21] MATTUCK, R. D. **A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem**, Dover Publications, 1992.
- [22] MYDOSH, J. A. **J. Magn. Magn. Mat.** **157/158**, p. 606, 1996.
- [23] NASS, M. J.; LEVIN, K.; GREY, G. S. **Phys. Rev. B** **23**, p. 1111, 1981.
- [24] NEGELE, J. W.; ORLAND, H. **Quantum Many-Particles Systems** , (Addilson-Wesley Publishing Company), 1988.
- [25] SCALAPINO, D. J. **Phys. Rep.** **250**, p. 329, 1995.
- [26] SHERRINGTON, D. **J. Phys. C: Solid State Phys.** **4**, p. 401, 1971.
- [27] SHERRINGTON, D.; KIRKPATRICK, S. **Phys. Rev. Let.** **35**, p.1792, 1975.
- [28] SPILLE, H.; WINKELMANN, M.; AHLHEIM, U.; BREDEL, C. D.; STEGLICH, F.; HAEN, P.; MIGNOT, J. M.; THOLENCE, J. L.; TOURNIER, R. **J. Magn. Magn. Mat.** **76/77**, p. 539, 1988.

- [29] THEUMANN, A. **Phys. Rev. B** **56**, p. 56, 1997.
- [30] THEUMANN, A.; SCHMIDT, A. A.; MAGALHÃES, S. G. **Phys. A** **311**, p. 498, 2002.
- [31] THEUMANN, A.; VIEIRA GUSMÃO, M. **Phys. Letters** **105A**, p. 311, 1984.
- [32] THIRUMALAI, D.; LI, Q.; KIRKPATRICK, T. R. **J. Phys. A: Math. Gen.** **22**, p. 3339, 1989.
- [33] WIETHEGE, W.; SHERRINGTON, D. J. **Phys. C: Solid State Phys.** **19**, p. 6983, 1986.