

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

CONGELAMENTO INVERSO EM UM MODELO
DE VIDRO DE SPIN FERMIÔNICO

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Isabela Corrêa Berger

Santa Maria, RS, Brasil

2012

**CONGELAMENTO INVERSO EM UM MODELO DE VIDRO
DE SPIN FERMIÔNICO**

por

Isabela Corrêa Berger

Dissertação de Mestrado apresentada ao curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Santa Maria, como requisito parcial para a obtenção do título de
Mestre em Física.

Orientador: Fábio Mallmann Zimmer

**Santa Maria, RS, Brasil
2012**

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

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

**CONGELAMENTO INVERSO EM UM MODELO DE VIDRO
DE SPIN FERMIÔNICO**

elaborada por
Isabela Corrêa Berger

como requisito parcial para a obtenção do grau de
Mestre em Física

COMISSÃO EXAMINADORA:

Fábio Mallmann Zimmer, Dr. (Presidente/Orientador)

Rubem Erichsen Junior, Dr. (UFRGS)

Lucio Strazzabosco Dorneles, Dr. (UFMS)

Santa Maria, 03 de outubro de 2012.

À minha filha, Erika Berger Lima.

Agradecimentos

Agradeço a todos que colaboraram para a realização deste trabalho, em especial:

A Deus, pelas oportunidades oferecidas;

À minha família, pela paciência e pelo apoio em todos os momentos da minha vida e, principalmente, por cuidarem com tanto zelo da minha princesa enquanto eu concluía mais esta etapa! Muito obrigada!

À Erika, minha filhotinha amada, por entender as horas de ausência e pelo carinho indispensável;

Ao Déds, pela paciência, apoio e por estar ao meu lado nos momentos mais difíceis;

Ao professor Fábio Mallmann Zimmer pela orientação, dedicação e apoio durante a realização deste trabalho de mestrado;

Aos colegas do laboratório de Física da Matéria Condensada, pela parceria e ajuda quando precisei;

A todos os colegas de sala, pela amizade e pelos bons momentos de descontração que passamos juntos. Em particular, quero agradecer à Cíntia, pelas discussões sobre o trabalho, pela ajuda de sempre e por me socorrer dos erros no .tex!

Aos professores do Departamento de Física que contribuíram para minha formação acadêmica;

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pelo apoio financeiro durante o mestrado;

À todas minhas amigas que sempre me incentivaram e pelas broncas quando pensava em desistir. Vai dar tudo certo, acreditem nisso!

Enfim, um muito obrigada a todos que de alguma forma estiveram ao meu lado nesta caminhada.

Resumo

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

CONGELAMENTO INVERSO EM UM MODELO DE VIDRO DE SPIN FERMIÔNICO

AUTOR: ISABELA CORRÊA BERGER

ORIENTADOR: FÁBIO MALLMANN ZIMMER

Data e Local da Defesa: Santa Maria, 03 de outubro de 2012.

O presente trabalho estuda o fenômeno contraintuitivo das transições inversas (TI), que são uma classe de transições de fase (reversíveis) em que a fase usualmente ordenada aparece em temperaturas mais altas que a fase desordenada. Vários modelos já foram propostos para descrever as TI por apresentarem características desse tipo de transição. O objetivo deste trabalho é justamente buscar um novo modelo, de interações desordenadas, que seja capaz de apresentar características gerais de um tipo de transição inversa, o congelamento inverso (CI). O CI trata de uma transição reversível a partir de uma fase paramagnética (PM) para uma fase vidro de spin (VS) sobre aquecimento. Dentro desse contexto, o modelo VS de van Hemmen é analisado em uma formulação fermiônica, em que os operadores de spins são escritos como uma combinação bilinear dos operadores fermiônicos de criação e destruição. Neste modelo, em que interações aleatórias J_{ij} introduzem desordem e frustração, e o potencial químico μ controla a ocupação média de férmions por sítio, o problema é analisado para dois tipos de desordem temperada: uma dada pela distribuição bimodal e outra dada pela distribuição gaussiana. Vale salientar que ambas as desordens são tratadas sem o uso do método das réplicas, e cada uma delas apresenta resultados particulares. Através da análise do comportamento dos parâmetros de ordem, entropia e número de ocupação médio, diagramas de fases da temperatura T pelo potencial químico μ podem então ser construídos. Uma transição reentrante é encontrada para um certo valor de μ quando a distribuição gaussiana é adotada. Essa transição reentrante está associada ao congelamento inverso, que ocorre em uma transição de primeira ordem entre as fases PM e VS quando a temperatura aumenta. Por outro lado, modelos que seguem as interações desordenadas do tipo proposto por Sherrington-Kirkpatrick (SK), que utilizam o método das réplicas e apresentam o complexo cenário da energia livre, sugerem que essa última possa ter ligação com o aparecimento de CI em tal modelo. Porém, a partir dos resultados obtidos neste modelo de van Hemmen fermiônico, pode-se concluir que as condições necessárias para que determinado modelo apresente uma transição inversa do tipo congelamento, são os efeitos combinados de frustração e diluição magnética (favorecimento dos estados não interagentes, controlada pelo μ). Assim, o modelo apresentado neste trabalho, não utiliza o método das réplicas nem o complicado cenário da energia livre e, é capaz de reproduzir as características de um CI.

Palavras-chave: Desordem. Vidro de Spin Quântico. Modelo Fermiônico. Transições inversas.

Abstract

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

Inverse Freezing in the fermionic spin glass model

AUTHOR: ISABELA CORRÊA BERGER

ADVISER: FÁBIO MALLMANN ZIMMER

Local and Date: Santa Maria, 03 de outubro de 2012.

The present work studies the counterintuitive phenomenon of inverse transitions (IT). The IT are a class of phase transitions (reversible) in which the ordered phase appears at higher temperatures than the disordered one. Different models have been proposed to describe characteristics of IT. The goal of this work is just to propose a model of disordered interactions, which is able to present general characteristics of a inverse transition type, the inverse freezing (IF). The IF is a reversible transition from a paramagnetic phase (PM) to the spin glass order (SG) on heating. Within this context the van Hemmen SG model is analyzed in a fermionic formulation, in which the spin operators are written as a bilinear combination of fermionic creation and annihilation operators. In this model the random interactions J_{ij} introduce disorder and frustration, and the chemical potential μ controls the average occupancy of fermions per site. The problem is analyzed for two different types of quenched disorders: bimodal (discrete) and gaussian (continuous). It is important to note that the disorder in the model analyzed here were treated without the use of the replica method and its complications. The results depend on the particular disorder. The behavior of the order parameters, entropy and occupation number are analyzed. Phase diagrams of temperature T versus chemical potential μ can then be build. A reentrance transition is found for a certain range of μ when the gaussian distribution is adopted. This reentrance transition is associated with the IF that occurs in a first-order transition from the paramagnetic to the spin glass phase when the temperature increases. On the other hand, models following disordered interactions of Sherrington-Kirkpatrick (SK) type suggest that the onset of IF can be a consequence of complex scenario for the free energy. In these models the replica method is used to treat the disorder and the solutions present this complex scenario. However, from the results obtained in present fermionic van Hemmen model, it can be concluded that the necessary conditions for a model exhibit IF are the combined effects of frustration and magnetic dilution (favoring states not interacting, controlled by μ). Thus, the treatment of model presented in this work does not use the replica method or the complicated scenario of free energy and it is able to reproduces the characteristics of an inverse freezing. This is attributed to the presence of frustration and magnetic dilution.

Keywords: Disorder. Quantum Spin Glass. Fermionic model. Inverse transitions.

Lista de Figuras

2.1	Representação de um sistema vidro de spin.	p. 17
2.2	Interações aleatórias FE e AF em uma rede triangular (a) não frustrada e (b) frustrada.	p. 18
2.3	Representação de uma rede quadrada frustrada (RAMIREZ, 1994).	p. 18
2.4	Representação da energia livre de um sistema VS ($T < T_f$) em função de uma coordenada do espaço de fases (BINDER; YOUNG, 1986)	p. 19
2.5	Susceptibilidade magnética como função da temperatura para alguns compostos VS. O pico na susceptibilidade marca uma transição entre as fases paramagnética e vidro de spin para diferentes compostos (FISCHER; HERTZ, 1991).	p. 20
2.6	Gráfico da magnetização em função da temperatura para o composto AgMn. O ciclo (1 → 2 → 3 → 4 → 5) refere-se ao resfriamento a campo nulo (ZFC), e o ciclo (5 → 4 → 6 → 4 → 5) ao FC (MYDOSH, 1996).	p. 21
2.7	Diagrama de fases da temperatura T/J em função do acoplamento ferromagnético J_0/J (a) para a distribuição bimodal (ξ e $\eta = \pm 1$). (b) para a distribuição gaussiana. Figuras adaptadas de (HEMMEN; ENTER; CANISIUS, 1983).	p. 30
2.8	Gráfico da pressão como função da temperatura para diferentes curvas de derretimento resultantes da equação (2.43) (SCHUPPER; SHNERB, 2004, 2005).	p. 32
2.9	Diagrama de fases do modelo Blume-Capel da temperatura T em função do campo cristalino D , para $r = 1$ na figura menor, que não apresenta derretimento inverso, e para $r = 6$ na figura principal, que exhibe derretimento inverso (SCHUPPER; SHNERB, 2004, 2005).	p. 33

2.10	Dependência da energia e da entropia em função do comprimento típico de um polímero de metilcelulose em água. As conformações dobradas (não interagentes) são favorecidas energeticamente e menos entrópicas. Já as conformações desdobradas (interagentes) possuem energias mais altas, mas também admitem um número maior de configurações microscópicas, tornando-as mais favorecidas em temperaturas mais altas (SCHUPPER; SHNERB, 2004, 2005).	p. 34
4.1	Comportamento dos parâmetros de ordem q e m em função da temperatura T/J para dois valores diferentes de J_0/J : (a) $J_0 = 0.0$ e (b) $J_0/J = 1.2$. Em ambos os casos, $\mu/J = 0$.	p. 49
4.2	Parâmetros de ordem q e m versus T/J para $J_0/J = 0.6$. Há o surgimento de uma fase em que q e m são diferentes de zero, chamada fase mista, considerando que $\mu/J = 0$.	p. 50
4.3	Diagrama de fases T/J versus J_0/J quando $\mu/J = 0$. As linhas cheias representam as transições de segunda ordem e as tracejadas as transições de primeira ordem.	p. 51
4.4	Gráfico do potencial termodinâmico em função da temperatura para $J_0/J = 0.8$ que representa a transição de primeira ordem entre as fases VS e FE. Assume-se que $\mu/J = 0$.	p. 51
4.5	Diagrama de fases T/J versus μ/J quando $J_0/J = 0$. A linha cheia representa a transição de segunda ordem e a transição de primeira ordem é representada pela linha tracejada.	p. 52
4.6	Gráfico do potencial termodinâmico versus o potencial químico para o valor de $J_0 = 0.0$ e $T = 0.2$. A transição de primeira ordem entre as fases PM e VS ocorre aproximadamente em $\mu = 0.485$.	p. 53
4.7	Diagrama de fases T/J versus μ/J quando $J_0/J = 0.9$. As transições de segunda ordem são representadas pelas linhas cheias do diagrama e as transições de primeira ordem, pelas linhas tracejadas.	p. 53
4.8	Comportamento dos parâmetros de ordem q e m em função da temperatura T/J para $\mu/J = 0$. a) $J_0/J = 0.0$ e b) $J_0/J = 1.2$.	p. 54
4.9	$J_0/J = 0.75$ e $\mu/J = 0.0$: a) parâmetros de ordem como função da temperatura e b) potencial termodinâmico em função da temperatura.	p. 55

4.10	Diagrama de fases T/J versus J_0/J quando $\mu/J = 0$. As linhas cheias e tracejadas representam as transições de segunda e primeira ordem, respectivamente.	p. 56
4.11	Comportamento dos parâmetros de ordem em função da temperatura para potencial químico $\mu/J = 0.35$ para dois valores de J_0 : (a) $J_0/J = 0.0$ e (b) $J_0/J = 0.75$	p. 56
4.12	Diagrama de fases da T/J pelo μ/J para $J_0/J = 0.00$. A transição de primeira ordem PM/VS apresenta uma reentrância em $\mu/J = 0.43$, que está associada ao congelamento inverso.	p. 57
4.13	Entropia como função da temperatura com $J_0/J = 0.0$ e $\mu/J = 0.43$	p. 58
4.14	(a) Número de ocupação ν como função da temperatura T/J para diversos valores de potencial químico μ/J e $J_0 = 0.0$. (b) ν versus T na região em que ocorre o congelamento inverso, com $\mu/J = 0.43$	p. 59
4.15	Comportamento do número de ocupação média por sítio ν em função do potencial químico μ/J para duas isotermas, $T/J = 0.1$ e $T/J = 0.2$ e $J_0/J = 0.0$	p. 59
4.16	Diagrama de fases da temperatura como uma função do potencial químico, para $J_0/J = 0.80$. Linhas cheias e tracejadas representam transições de segunda e primeira ordem, respectivamente.	p. 60
4.17	Diagrama de fases da temperatura como uma função do potencial químico, para $J_0/J = 0.90$. Linhas cheias representam transições de segunda ordem e as linhas tracejadas as de primeira ordem.	p. 61
4.18	Diagrama de fases da temperatura como uma função do potencial químico para $J_0/J = 1.2$. As transições de primeira e segunda ordem são representadas pelas linhas tracejadas e contínuas, respectivamente.	p. 62

Sumário

1	Introdução	p. 12
2	 Vidro de Spin e Transições Inversas	p. 16
2.1	Vidro de Spin	p. 16
2.1.1	Conceito e caracterização experimental	p. 16
2.1.2	Modelos teóricos para descrever o comportamento VS	p. 21
2.1.2.1	Modelo Sherrington-Kirkpatrick	p. 21
2.1.2.2	O Modelo vidro de spin clássico de van Hemmen	p. 23
2.2	Transições Inversas	p. 30
2.2.1	Derretimento Inverso	p. 30
2.2.2	Congelamento Inverso	p. 33
2.2.2.1	Congelamento inverso em modelos clássicos	p. 35
2.2.2.2	Congelamento inverso em modelos fermiônicos	p. 35
3	Modelo de van Hemmen Fermiônico	p. 37
3.1	Modelo adotado	p. 38
3.2	Obtenção do Potencial Termodinâmico	p. 39
3.3	Cálculo da média configuracional	p. 43
3.3.1	Distribuição de probabilidade bimodal	p. 44
3.3.2	Distribuição de probabilidade gaussiana	p. 45
3.4	Outras quantidades termodinâmicas obtidas a partir do potencial grande canônico	p. 46

4 Resultados	p. 48
4.1 Resultados obtidos para a distribuição bimodal	p. 49
4.2 Resultados obtidos para a distribuição gaussiana	p. 54
4.3 Comparativo entre os principais resultados obtidos nas distribuições de probabilidades utilizadas	p. 62
5 Considerações Finais	p. 64
Apêndice A – Expansão de Landau para potencial termodinâmico	p. 66
Apêndice B – Integrais de Caminho Fermiônicas	p. 68
Referências Bibliográficas	p. 74

1 *Introdução*

Transições inversas (TI) são transformações reversíveis de uma fase usualmente desordenada em baixas temperaturas para uma fase ordenada em temperaturas mais altas (SCHUPPER; SHNERB, 2004). O fenômeno das transições inversas, embora contraintuitivo, tem despertado muito interesse através da descoberta de vários sistemas físicos diferentes que apresentam esse comportamento, como é o caso das nanopartículas de ouro (DONNIO et al., 2010), filmes finos magnéticos (PORTMANN; VATERLAUS; PESCIA, 2001), supercondutores de altas temperaturas (AVRAHAM et al., 2001), cristais líquidos (CLADIS et al., 1977, 1981), entre outros. Tal diversidade desses sistemas físicos tem estimulado um intenso interesse teórico, em que modelos magnéticos são empregados no estudo de TI devido à sua simplicidade (ZIMMER; BERGER; MAGALHAES, 2012; SCHUPPER; SHNERB, 2004, 2005; CRISANTI; LEUZZI, 2005; ZIMMER et al., 2011; MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2010; MORAIS; ZIMMER; MAGALHAES, 2011; PAOLUZZI; LEUZZI; CRISANTI, 2010; COSTA, 2010; THOMAS; KATZGRABER, 2011; MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2008). Esse é o principal objetivo da presente dissertação: realizar um estudo teórico das transições inversas.

As transições de fases usuais ocorrem em temperaturas finitas quando o crescimento das flutuações térmicas conduz a uma mudança do estado físico do sistema e a fase ordenada sofre uma mudança para a fase desordenada. Em um caso particular, quanto maior a temperatura de uma substância, maior o movimento de suas partículas, e esse fato faz aumentar a sua entropia. Logo, a fase ordenada apresenta entropia menor que a fase desordenada. Nas transições inversas, há uma inversão no conteúdo entrópico entre as fases envolvidas no sistema, pois a fase usualmente ordenada aparece com entropia maior que a fase usualmente desordenada (SCHUPPER; SHNERB, 2004, 2005).

As transições inversas podem ser classificadas em dois tipos: derretimento inverso e congelamento inverso. O derretimento inverso ocorre, por exemplo, na transição entre uma fase líquida e uma estrutura cristalina sob o aumento da temperatura (SCHUPPER; SHNERB, 2004, 2005; CRISANTI; LEUZZI, 2005). Já o congelamento inverso surge na

transição entre a fase líquida e uma fase tipo vidro, também pelo aumento da temperatura do sistema (SCHUPPER; SHNERB, 2004, 2005; CRISANTI; LEUZZI, 2005). Do ponto de vista teórico, alguns modelos magnéticos são propostos para investigar e reproduzir características de transições inversas (SCHUPPER; SHNERB, 2005). O modelo clássico de Blume-Capel (modelo BC) (BLUME, 1966; CAPEL, 1966) é um modelo de spin 1 ($S = 0, 1, -1$) que pode apresentar derretimento inverso através da transição entre as fases paramagnética (PM), considerada desordenada, e a fase ferromagnética (FE), considerada ordenada, quando a temperatura aumenta. Este modelo conta com duas interações competitivas: uma interação de troca que favorece energeticamente os estados $S = \pm 1$ (interagentes) e um “campo cristalino” que favorece os estados $S = 0$ (não interagentes) (BLUME, 1966; CAPEL, 1966). Entretanto, apesar de apresentar derretimento inverso, somente o faz quando é introduzido um mecanismo de favorecimento entrópico dos estados interagentes, fazendo com que a entropia do estado ordenado (FE) fique maior que a entropia do estado desordenado (PM) (SCHUPPER; SHNERB, 2005).

Outro modelo bastante utilizado no estudo de TI é o modelo Ghatak-Sherrington (modelo GS), que também adota spin 1, porém com interações fortemente desordenadas (GHATAK; SHERRINGTON, 1977). Essas interações desordenadas são propícias ao surgimento de uma fase vidro de spin (VS). Particularmente, para um conjunto de valores de campo cristalino é observada uma transição reentrante da fase PM para a fase VS quando a temperatura aumenta, caracterizando um congelamento inverso (SCHUPPER; SHNERB, 2004, 2005; CRISANTI; LEUZZI, 2005). Portanto, o congelamento inverso trata de uma transição entre as fases PM e VS, em que a fase magnética VS é caracterizada por uma desordem temperada responsável por introduzir frustração ao problema. Neste caso, o modelo GS introduz novas características a este tipo de TI em relação ao modelo BC: desordem e frustração.

A diferença entre os modelos BC e GS, é que a transição inversa do último pode surgir espontaneamente, sem adição de vantagem entrópica dos estados interagentes. A comparação entre esses modelos parece indicar quais são os mecanismos físicos necessários para que determinado modelo apresente naturalmente uma transição inversa: deve-se observar que uma característica comum entre eles é o mecanismo de favorecimento energético dos estados não interagentes (SCHUPPER; SHNERB, 2005) proveniente do campo cristalino. Além disso, o modelo GS indica que a presença de forte desordem e frustração também podem ser ingredientes necessários para produzir TI do tipo congelamento inverso espontaneamente (ZIMMER; BERGER; MAGALHAES, 2012).

Outra classe de modelo recentemente usada para estudar transições inversas é a do Vidro de Spin de Ising Fermiônico (VSIF) com interações de longo alcance (como propostas por Sherrington- Kirkpatrick no modelo clássico SK) em que a TI do tipo congelamento inverso pode ser encontrada em diagramas de fases da temperatura em função do potencial químico (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2010; ZIMMER et al., 2011; MORAIS; ZIMMER; MAGALHAES, 2011). Nesses modelos, os operadores de spin são escritos como uma combinação bilinear dos operadores fermiônicos de criação e destruição, e o formalismo Lagrangeano com variáveis de Grassmann é usado para obter o potencial termodinâmico (THEUMANN; SCHIMIDT; MAGALHAES, 2002). Além disso, o potencial químico é introduzido para controlar a ocupação média de férmions por sítio, que pode consequentemente favorecer sítios não magnéticos. No ensemble grande canônico, os modelos VSIF têm ligação com o modelo GS clássico através de um mapeamento entre o potencial químico e o campo cristalino (FELDMANN; OPPERMANN, 2000). Isso pode explicar porque o modelo VSIF também apresenta congelamento inverso espontaneamente.

A combinação de desordem e frustração na fase VS leva ao surgimento de um estado fundamental multidegenerado, no qual existem mínimos locais de energia separados por barreiras de energia livre relacionados à quebra de ergodicidade (DOTSENKO, 1994). Abaixo de uma certa temperatura de transição, chamada T_f “temperatura de congelamento”, o sistema apresenta uma quebra de ergodicidade que divide o espaço de fases em muitos vales separados por barreiras infinitamente altas de energia livre. Este modo de representação do espaço de fases é conhecido como o complexo cenário da energia livre (FISCHER; HERTZ, 1991; BINDER; YOUNG, 1986), que é obtida pela solução VS do modelo GS e outros baseados em interações fortemente desordenadas do modelo SK. Isso sugere que o CI pode ter uma dependência desse cenário da energia livre.

Os modelos GS e VSIF são estudados dentro de uma solução de campo médio usando o método das réplicas para tratar a desordem, que apresenta uma interpretação para o complicado cenário da energia livre VS. É importante salientar que ambos modelos tem a presença de frustração, que é dada como uma condição para a existência de congelamento inverso. Recentemente, esta hipótese foi testada em alguns modelos VSIF (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2010; MORAIS; ZIMMER; MAGALHAES, 2011), que confirmam a importância da frustração para a observação de congelamento inverso.

Uma das motivações do presente trabalho é exatamente buscar outros modelos magnéticos que apresentam estados não interagentes e frustração e sejam capazes de exibir congelamento inverso. Um dos candidatos é o modelo de van Hemmen (HEMMEN, 1982;

HEMMEN; ENTER; CANISIUS, 1983), que foi introduzido originalmente como uma alternativa para o modelo SK (KIRKPATRICK; SHERRINGTON, 1978) para investigar o problema VS, pois além de não utilizar o método das réplicas, não apresenta o complicado cenário da energia livre. Neste trabalho então, pretende-se estudar uma versão fermiônica para o modelo de van Hemmen, em que as questões referentes à necessidade de existência do complexo cenário da energia livre e a presença de réplicas relacionadas ao congelamento inverso serão investigadas. Dentro dessa formulação fermiônica, são permitidos estados com zero, um ou dois férmions por sítio, ou seja, os operadores de spin atuam em um espaço de Fock com quatro autoestados por sítio: dois magnéticos e dois não magnéticos. Além disso, os operadores fermiônicos são relacionados com variáveis de Grassmann, e o formalismo das integrais de caminho fermiônicas é adotado para obter o potencial termodinâmico (NEGELE; ORLAND, 1988).

Mais especificamente, o estudo deste trabalho está baseado em descobrir se o tipo de interação desordenada de van Hemmen é capaz de produzir uma transição do tipo congelamento inverso espontaneamente. Para essa finalidade, o modelo fermiônico de van Hemmen considera diluição magnética com sítios não magnéticos, (neste trabalho, diluição magnética está relacionada ao favorecimento de sítios duplamente ocupados ou vazios) controlados pelo potencial químico, e frustração gerada por interações desordenadas, o que permite uma solução exata em nível de campo médio sem o uso do método das réplicas. O problema ainda será analisado para dois tipos de desordem temperada, das quais uma é dada pela distribuição de probabilidades bimodal (discreta) e a outra pela distribuição gaussiana (contínua). Resultados parciais deste modelo fermiônico estão publicados na referência (ZIMMER; BERGER; MAGALHAES, 2012).

Esta dissertação está estruturada como segue: No capítulo 1 é feita uma introdução ao trabalho desenvolvido. O capítulo 2 se refere à caracterização da fase VS e das transições inversas, bem como alguns conceitos e modelos teóricos. O capítulo 3 é destinado à apresentação do modelo proposto no presente trabalho escrito em termos de uma formulação fermiônica. A seção 3.3.1 apresenta os cálculos analíticos realizados a partir da distribuição bimodal e a seção 3.3.2 apresenta as equações da distribuição gaussiana, uma vez que essa distribuição não permite que os cálculos sejam realizados analiticamente. No capítulo 4, são apresentados os resultados obtidos a partir dos cálculos realizados no modelo proposto. E, no capítulo 5, são feitas as considerações finais.

2 Vidro de Spin e Transições Inversas

Este capítulo tem por objetivo descrever algumas das principais características encontradas em sistemas vidro de spin e nas transições inversas, bem como a relação entre esses dois conceitos. Destacam-se alguns modelos teóricos de VS que recentemente se propõem a descrever as transições inversas, em especial, o congelamento inverso (SCHUPPER; SHNERB, 2005; CRISANTI; LEUZZI, 2005; MORAIS; ZIMMER; MAGALHAES, 2011), que, particularmente, trata da transição entre uma fase paramagnética e uma fase vidro de spin sob aquecimento (SCHUPPER; SHNERB, 2004). Na primeira seção, o comportamento da fase VS é apresentado, além de alguns modelos teóricos que descrevem essa fase. Na seção seguinte, é feita uma revisão teórica sobre as transições inversas, com certos modelos que apresentam esse comportamento.

2.1 Vidro de Spin

2.1.1 Conceito e caracterização experimental

Vidro de spin (VS) é um estado magnético caracterizado pelo congelamento aleatório dos spins abaixo de uma temperatura de transição T_f “*Temperatura de congelamento*” (MYDOSH, 1996). O surgimento da fase VS está relacionado à desordem e a frustração, que podem ocorrer a partir da aleatoriedade das interações magnéticas. A figura (2.1) representa a orientação dos spins na fase VS, e um caso típico de surgimento dessa fase pode ser entendido na descrição abaixo.

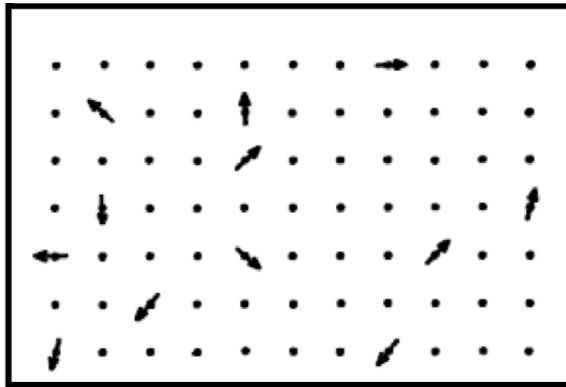


Figura 2.1: Representação de um sistema vidro de spin.

As interações aleatórias foram observadas quando pesquisas científicas começaram a ser desenvolvidas com o intuito de se conhecer as propriedades elétricas e magnéticas dos metais. Para isso, foram desenvolvidas ligas a partir de átomos magnéticos (Fe, Mn) como sendo impurezas magnéticas diluídas em matrizes não magnéticas, que são os metais nobres (Au, Ag, Cu, Pt) considerados como hospedeiros. Percebeu-se que os momentos das impurezas produziam uma polarização magnética nos elétrons de condução do metal hospedeiro, fazendo com que os outros spins das impurezas tentassem se alinhar ao longo do campo magnético local gerado por essa polarização. Devido à disposição aleatória das impurezas, algumas das interações eram positivas, favorecendo o alinhamento paralelo dos spins, e algumas eram negativas, favorecendo o alinhamento antiparalelo. Assim, obtinham-se as interações competitivas aleatórias (FISCHER; HERTZ, 1991). O espalhamento dos elétrons de condução pela presença dos momentos magnéticos das impurezas possibilita uma interação de troca indireta que descreve um caráter oscilatório, e é conhecida como Interação RKKY.

Considerando a interação entre os momentos magnéticos distribuídos aleatoriamente, não é possível encontrar uma única configuração dos spins que satisfaça simultaneamente todas as interações. Com isso, o sistema apresenta outra característica fundamental: a frustração.

A origem do nome VS para essa nova fase magnética pode ser atribuída a Bryan Coles, que, em 1968, fez uma comparação entre o desordenamento magnético das impurezas com a estrutura dos vidros ordinários (VIANA, 2002), em que as posições de seus constituintes não têm uma ordem espacial definida, e sugeriu o termo vidro de spin (*spin glass*).

O conceito de frustração pode ser entendido com o exemplo da Figura (2.2) na qual os spins estão dispostos em uma rede triangular com interações positivas (ferromagnéticas) e

negativas (antiferromagnéticas). As interações entre os spins são independentes e iguais a $\pm J$. Observa-se que, quando o número de interações negativas ($-J$) é par, não há conflito entre as interações. Esse fato é mostrado na Figura (2.2(a)), que representa uma rede triangular não frustrada, pois todas as interações são satisfeitas. Porém, se o número de interações negativas ($-J$) for ímpar, não há como satisfazer todas as ligações ao mesmo tempo, pois existe mais de uma configuração possível para o mesmo estado. Com isso, o sistema é dito frustrado, e está representado pela Figura (2.2(b)).

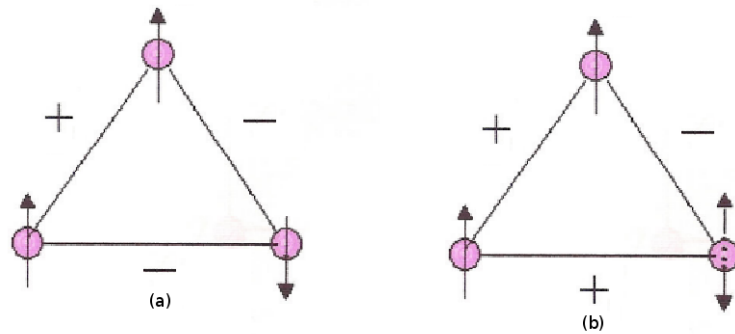


Figura 2.2: Interações aleatórias FE e AF em uma rede triangular (a) não frustrada e (b) frustrada.

Um outro exemplo de rede frustrada pode ser visto na Figura (2.3), em que os spins são dispostos em uma rede quadrada com interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas (RAMIREZ, 1994). Observa-se que, se o spin do lado direito superior obedecer à interação com o spin da esquerda, ele deve estar orientado para cima. Porém, se obedecer à interação com o spin de baixo, deve apontar para baixo. Com isso, pode-se dizer que essa também é uma rede frustrada, pois não é possível satisfazer as quatro interações ao mesmo tempo,

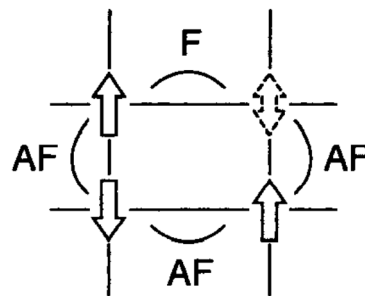


Figura 2.3: Representação de uma rede quadrada frustrada (RAMIREZ, 1994).

A combinação de desordem e frustração leva ao surgimento de um estado fundamental

altamente degenerado, isto é, várias configurações de quase equilíbrio associadas a mínimos locais de energia, separados por barreiras de energia livre e que podem estar relacionados à quebra de ergodicidade (BINDER; YOUNG, 1986). Em outras palavras, o comportamento da fase VS pode ser caracterizado por uma grande quantidade de estados metaestáveis, que são mínimos locais de energia livre (BINDER; YOUNG, 1986). Portanto, é necessário analisar a complicada quebra de ergodicidade da fase VS.

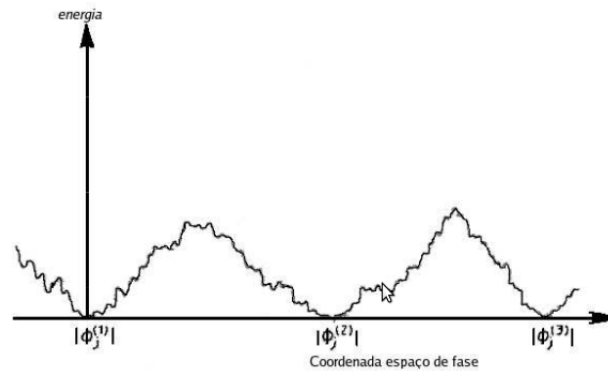


Figura 2.4: Representação da energia livre de um sistema VS ($T < T_f$) em função de uma coordenada do espaço de fases (BINDER; YOUNG, 1986)

Um sistema é ergódico se todos os estados de mesma energia têm igual probabilidade de serem ocupados. Assim, acima de uma temperatura T_f o sistema é ergódico e observa-se uma fase paramagnética, ou seja, o sistema está em equilíbrio e se encontra com probabilidade proporcional a $\exp(-E/k_B T)$ (E é a energia do estado, k_B a constante de Boltzmann e T a temperatura) em qualquer uma de suas configurações possíveis do espaço de fase (PATHRIA, 1996). Abaixo dessa temperatura, ocorre uma quebra de ergodicidade complexa, em que o espaço de fases é dividido em muitos vales separados por barreiras infinitamente altas de energia livre, fazendo com que o espaço de fases se subdivida em vários vales termodinamicamente inacessíveis uns aos outros (DOTSENKO, 1994).

Esse modo de representação do espaço de fases é denominado complexo cenário da energia livre, e também pode ser chamado de “picture” de muitos vales, exibido na Figura (2.4). Quando a temperatura diminui ($T < T_f$), novas quebras de ergodicidade acontecem em cada vale levando a uma sequência contínua de quebra de ergodicidade abaixo de T_f (DOTSENKO, 1994), ocasionando uma fragmentação do espaço de fases com um número ainda maior de vales menores. Quando $T > T_f$ a estrutura de muitos vales desaparece, ocorrendo um único mínimo para a energia livre.

Experimentalmente é observado em compostos que apresentam a fase VS que há uma

magnetização espontânea local $m_i = \langle S_i \rangle$ não nula para um determinado sítio i , porém, a magnetização total $M = N^{-1} \sum_i m_i$ sobre todos os sítios deve ser nula (FISCHER; HERTZ, 1991). A fase VS apresenta um pico na susceptibilidade magnética decorrente de efeitos da magnetização espontânea local não nula, conforme Figura (2.5). Esse pico na susceptibilidade ocorre em uma transição de segunda ordem entre as fases PM e VS. Embora não mostrado na Figura (2.5), o pico na susceptibilidade é fortemente dependente da frequência do campo magnético aplicado, ou seja, se a frequência do campo aplicado é reduzida, a temperatura de congelamento também diminui (FISCHER; HERTZ, 1991).

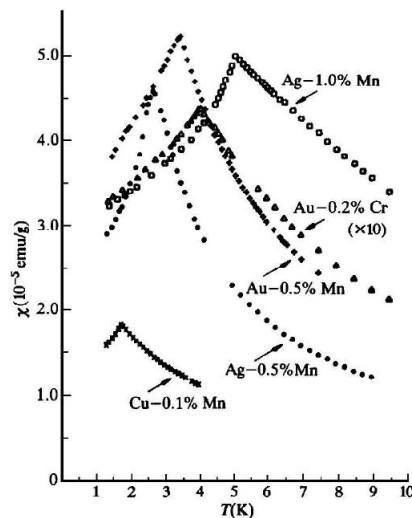


Figura 2.5: Susceptibilidade magnética como função da temperatura para alguns compostos VS. O pico na susceptibilidade marca uma transição entre as fases paramagnética e vidro de spin para diferentes compostos (FISCHER; HERTZ, 1991).

Outra característica importante observada experimentalmente na fase VS é que ela não possui ordem de longo alcance. Além disso, em uma temperatura $T < T_f$ é observada uma magnetização remanescente que pode ser medida mesmo depois de um campo magnético externo aplicado ser desligado. Na verdade, há duas maneiras de se medir a magnetização remanescente. A primeira delas, é resfriando as amostras a campo nulo, aplicando em seguida um campo magnético constante durante um determinado tempo até desligá-lo. Esse procedimento é chamado “*zero-field-cooling*” (ZFC), representado na Figura (2.6) pela curva (1 → 2 → 3 → 4 → 5). Resfriando a amostra de $T \gg T_f$ até $T \ll T_f$ (1 → 2), aplica-se um campo baixo e a magnetização assume valores positivos (2 → 3). Com o aumento da temperatura, a curva da magnetização segue para (3 → 4 → 5). A outra maneira, conhecida por “*field-cooling*” (FC), acontece no resfriamento da amostra com um campo magnético constante aplicado, que na Figura (2.6) corresponde ao caminho

(5 → 4), para depois então desligá-lo. Para $T < T_f$, a magnetização segue (4 → 6), sendo praticamente independente da temperatura (MYDOSH, 1996). Os resultados obtidos para o resfriamento a ZFC possuem comportamentos diferentes dos obtidos após o resfriamento a FC (MYDOSH, 1996)(BINDER; YOUNG, 1986), como podem ser vistos na figura abaixo.

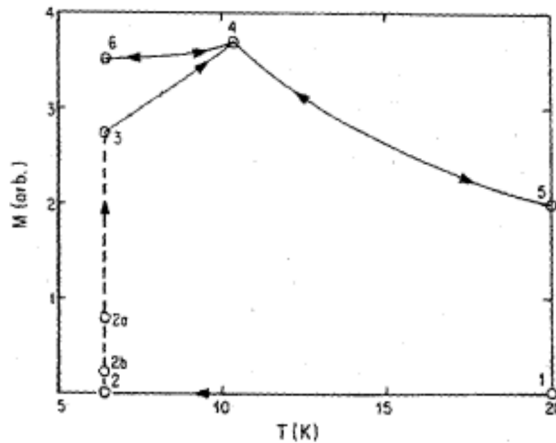


Figura 2.6: Gráfico da magnetização em função da temperatura para o composto AgMn. O ciclo (1 → 2 → 3 → 4 → 5) refere-se ao resfriamento a campo nulo (ZFC), e o ciclo (5 → 4 → 6 → 4 → 5) ao FC (MYDOSH, 1996).

Essas são algumas das principais medidas termodinâmicas que podem identificar a fase magnética vidro de spin.

2.1.2 Modelos teóricos para descrever o comportamento VS

Como visto na seção anterior, os sistemas VS apresentam algumas características particulares, como por exemplo, pico na susceptibilidade magnética e desordem que gera frustração. Nesta seção, discutem-se dois modelos que podem ser usados para reproduzir essa fase.

2.1.2.1 Modelo Sherrington-Kirkpatrick

Um modelo bastante usado na literatura é o modelo de Sherrington-Kirkpatrick (KIRKPATRICK; SHERRINGTON, 1978) descrito pelo Hamiltoniano

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j \quad (2.1)$$

com as variáveis clássicas de spin $S_i = \pm 1$. A soma sobre i, j percorre todos os pares distintos de spins S_i e a interação J_{ij} é a variável aleatória, que introduz desordem e frustração ao problema e segue uma distribuição de probabilidades gaussiana (KIRKPATRICK; SHERRINGTON, 1978) dada por

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi J}} \exp \left[-\frac{(J_{ij})^2}{2J^2} \right]. \quad (2.2)$$

Na equação (2.2), J_{ij} representa as interações desordenadas e J é a variância que determina a largura da distribuição. Nesse modelo, a desordem é introduzida por J_{ij} e pode ser tratada através do método das réplicas (FISCHER; HERTZ, 1991). Com esse tratamento em nível de campo médio, o problema original reduz-se a um problema efetivo de um único sítio sob a influência de um campo gerado pelos demais spins. Para descrever em mais detalhes, é feita uma breve explicação dos principais passos utilizados na obtenção dos resultados termodinâmicos do modelo (2.1), baseada nas referências (FISCHER; HERTZ, 1991; KIRKPATRICK; SHERRINGTON, 1978).

Como a energia livre, $f(J_{ij}) = -\frac{1}{\beta} \ln Z(J_{ij})$, depende de uma configuração particular de J_{ij} , deve-se realizar uma média sobre a distribuição de probabilidades. Então, a média configuracional da energia livre f é dada por

$$\langle\langle f(J_{ij}) \rangle\rangle = -\frac{1}{\beta} \langle\langle \ln Z(J_{ij}) \rangle\rangle = -\frac{1}{\beta} \int dJ_{ij} P(J_{ij}) \ln Z(J_{ij}), \quad (2.3)$$

em que $\langle\langle \dots \rangle\rangle$ é a média sobre J_{ij} .

Porém, há uma dependência de $\ln Z(J_{ij})$ em relação à variável J_{ij} , dificultando o cálculo da média sobre a desordem. Para contornar essa situação, utiliza-se o método das réplicas, que consiste no seguinte procedimento:

$$\ln x = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{x^n - 1}{n}. \quad (2.4)$$

Esse procedimento transforma $\langle\langle \ln Z \rangle\rangle$ em $\langle\langle Z^n(J_{ij}) \rangle\rangle$, que é a média da função de partição replicada.

Seja a função de partição Z dada por

$$Z = \text{tr} e^{-\beta H}, \quad (2.5)$$

assume-se que $x^n \rightarrow Z^n$ e $Z^n = Z_1 \cdot Z_2 \dots Z_n = \prod_{\alpha=1}^n Z_{\alpha}$, com α representando as réplicas idênticas ao sistema original.

O modelo SK é amplamente estudado por apresentar uma solução analítica exata para o problema VS. Contudo, a solução depende do método das réplicas, que apresenta alguns problemas, como por exemplo, a instabilidade na solução VS com a simetria de réplicas. Apesar do modelo SK ser muito usado para descrever soluções VS, existem outros modelos desordenados que são menos complexos, pois não precisam das réplicas, e podem descrever características da fase VS. O modelo proposto por van Hemmen (HEMMEN, 1982; HEMMEN; ENTER; CANISIUS, 1983) que apresenta uma solução mais simples e que não utiliza réplicas é um deles, e será discutido na seção seguinte.

2.1.2.2 O Modelo vidro de spin clássico de van Hemmen

Seguindo as características de um vidro de spin, J.L van Hemmen (HEMMEN, 1982; HEMMEN; ENTER; CANISIUS, 1983) propôs um modelo de alcance infinito, contendo aleatoriedade e frustração, porém, sem utilizar o truque das réplicas como no modelo SK (KIRKPATRICK; SHERRINGTON, 1978), sendo possível de se obter uma solução analítica (exata) para o problema. O modelo de van Hemmen (vH) representa um sistema de spins de Ising com interações desordenadas e é descrito pelo Hamiltoniano

$$H_N = -\frac{J_0}{N} \sum_{(i,j)} S_i S_j - \sum_{(i,j)} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i, \quad (2.6)$$

que descreve N spins de Ising ($S_i = \pm 1$) interagindo em pares (i, j) e com um campo magnético externo H . J_0 representa a interação ferromagnética se for $J_0 > 0$ ou antiferromagnética se for $J_0 < 0$ e o termo J_{ij} indica as interações desordenadas, dado por:

$$J_{ij} = \frac{J}{N} [\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i], \quad (2.7)$$

onde ξ_i e η_i são variáveis aleatórias independentes identicamente distribuídas em torno de zero e uma variância finita (HEMMEN, 1982; HEMMEN; ENTER; CANISIUS, 1983). Interações positivas e negativas são distribuídas aleatoriamente na rede e, uma vez escolhidas as localizações destas interações, elas serão fixas. Sendo assim, essa é uma desordem temperada (*quenched*) (DOTSENKO, 1994).

Para estudar o modelo de vH usualmente são adotadas duas distribuições de probabilidades para as variáveis ξ_i e η_i : a bimodal e a gaussiana, respectivamente dadas por:

$$P(x_i) = \frac{1}{2} [\delta(x_i - 1) + \delta(x_i + 1)] \quad (2.8)$$

$$P(x_i) = \frac{1}{2\pi} \exp\left[\frac{-x_i^2}{2}\right], \quad (2.9)$$

em que x_i representa ξ_i e η_i .

O modelo de vH apresenta desordem, pela aleatoriedade das interações, e frustração, devido à competição entre as interações positivas e negativas, de forma que nem todas as interações podem ser satisfeitas simultaneamente. Verifica-se que, quando o acoplamento ferromagnético é nulo ($J_0 = 0$), obtemos dois subsistemas desacoplados: um ferromagnético (com as interações aleatórias entre os spins positivas) e um antiferromagnético (com as interações aleatórias entre os spins negativas) (HEMMEN, 1982; HEMMEN; ENTER; CANISIUS, 1983), observando que esse último é capaz de gerar uma fase VS, pois sabe-se que um subsistema do tipo antiferromagnético pode ser frustrado e frustração é uma das características necessárias para o surgimento da fase VS. Na distribuição bimodal, nota-se que cada um dos subsistemas é composto pela metade do total de spins do sistema e as interações aleatórias entre eles têm o mesmo peso. Esse é um fator importante para que seja apresentada uma fase mista (em que os parâmetros de ordem VS $q \neq 0$ e magnetização $m \neq 0$) a partir dessa distribuição de probabilidades (HEMMEN, 1982; HEMMEN; ENTER; CANISIUS, 1983). Porém, quando a distribuição gaussiana é utilizada, cada subsistema é composto por spins cuja ligação entre os mesmos não é mais constante. Por isso, não se pode garantir que a interação aleatória seja sempre mais intensa que o acoplamento ferromagnético na fase VS, como no caso da distribuição bimodal. Isso é fundamental para que a fase mista não seja encontrada no diagrama de fases obtido a partir dessa distribuição (HEMMEN, 1982; HEMMEN; ENTER; CANISIUS, 1983).

A função de partição Z_N é o ponto de partida da mecânica estatística, e contém todas as informações do sistema. No caso do modelo (2.6), Z_N é dada por $Z_N = \sum_{S_i} \exp(\beta H_N)$,

$$Z_N = \sum_{S_i} \exp\left[\frac{k_1}{N} \sum_{i \neq j} S_i S_j + \frac{k_2}{N} \sum_{i \neq j} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i) S_i S_j + k_3 \sum_i S_i\right] \quad (2.10)$$

onde $k_1 = \beta J_0$, $k_2 = \beta J$ e $k_3 = \beta H$.

Para a variável de spin $S_i = \pm 1$ pode-se usar as seguintes relações:

$$\left(\sum_i S_i\right)^2 = \sum_i S_i^2 + 2 \sum_{i \neq j} S_i S_j \implies \sum_{i \neq j} S_i S_j = \frac{1}{2} \left[\left(\sum_i S_i\right)^2 - \sum_i S_i^2 \right] \quad (2.11)$$

e

$$\begin{aligned} \left[\sum_i (\xi_i + \eta_i) S_i \right]^2 &= \left(\sum_i \xi_i S_i \right)^2 + \left(\sum_i \eta_i S_i \right)^2 + \\ &2 \sum_i \xi_i \eta_i S_i^2 + 2 \sum_{i \neq j} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i) S_i S_j, \end{aligned} \quad (2.12)$$

onde

$$\begin{aligned} \sum_{i \neq j} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i) S_i S_j &= \frac{1}{2} \left\{ \left[\sum_i (\xi_i + \eta_i) S_i \right]^2 - \left(\sum_i \xi_i S_i \right)^2 - \right. \\ &\left. \left(\sum_i \eta_i S_i \right)^2 - 2 \sum_i \xi_i \eta_i S_i^2 \right\}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Ao aplicar essas expressões na equação (2.10), tem-se

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{S_i} \exp \left[\frac{k_1}{2N} \left(\left(\sum_i S_i \right)^2 - \sum_i S_i^2 \right) + \frac{k_2}{2N} \left\{ \left[\sum_i (\xi_i + \eta_i) S_i \right]^2 \right. \right. \\ &\left. \left. - \left(\sum_i \xi_i S_i \right)^2 + \left(\sum_i \eta_i S_i \right)^2 - 2 \sum_i \xi_i \eta_i S_i^2 + k_3 \sum_i S_i \right\} \right] \end{aligned} \quad (2.14)$$

e rearranjando os termos, obtém-se

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{S_i} \exp \left[\sum_i \left(-\frac{k_1}{2N} - \frac{k_2}{N} \xi_i \eta_i \right) S_i^2 \right] \exp \left[\frac{k_1}{2N} \left(\sum_i S_i \right)^2 \right] \\ &\times \exp \left[\frac{k_2}{N} \left(\sum_i (\xi_i + \eta_i) S_i \right)^2 \right] \exp \left[-\frac{k_2}{2N} \left(\sum_i \xi_i S_i \right)^2 \right] \\ &\times \exp \left[-\frac{k_2}{2N} \left(\sum_i \eta_i S_i \right)^2 \right] \exp \left[k_3 \sum_i S_i \right]. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Utilizando a transformação de Hubbard-Stratonovich (identidade gaussiana)

$$\exp(\lambda a^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{-x^2}{2} + a\sqrt{2\lambda}x \right) dx \quad (2.16)$$

para tratar os termos quadráticos da Equação (2.15), tem-se:

$$Z_N = \frac{N^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp -\frac{N}{2}(x^2 + y^2 + z^2 + v^2) \times \exp \sum_i \left[\sqrt{k_1} x S_i + \sqrt{k_2} y (\xi_i + \eta_i) S_i + \sqrt{-k_2} z \xi_i S_i + \sqrt{-k_2} v \eta_i S_i \right] dx dy dz dv, \quad (2.17)$$

em que foi feita a mudança de variável $x = \sqrt{N}x'$, tal que $x' = x, y, z$ e v .

Para reorganizar melhor os termos, assume-se que

$$L_i = -\frac{k_1}{2N} - \frac{k_2}{N} \xi_i \eta_i \quad (2.18)$$

e

$$K_i = \sqrt{k_1} x + \sqrt{k_2} [(\xi_i + \eta_i) y + j(\xi_i z + \eta_i v) + k_3], \quad (2.19)$$

com $j = \sqrt{-1}$. Assim,

$$Z_N = \frac{N^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp -\frac{N}{2}(x^2 + y^2 + z^2 + v^2) \times \sum_{S_i} \exp \left[\sum_i L_i S_i^2 + K_i S_i \right] dx dy dz dv. \quad (2.20)$$

Resolvendo o último termo da equação (2.20):

$$\begin{aligned} \sum_{S_i} \exp \left[\sum_i L_i S_i^2 + K_i S_i \right] &= \sum_{S_1} \exp(L_1 S_1^2 + K_1 S_1) \exp(L_2 S_2^2 + K_2 S_2) \dots \\ &= \prod_i \sum_{S_i} \exp(L_i S_i^2 + K_i S_i), \end{aligned} \quad (2.21)$$

lembrando que L_i e K_i são funções de ξ_i e η_i , e que $S_i = \pm 1$:

$$\sum_{S_i} \exp \left[\sum_i (L_i S_i^2 + K_i S_i) \right] = \prod_i 2 \exp(L_i) \cosh(K_i). \quad (2.22)$$

Usando as propriedades: $\exp[\ln(a)] = a$ e $\ln(\prod_i b_i) = \sum_i \ln b_i$, tem-se que

$$\ln \left[\prod_i 2 \exp(L_i) \cosh(K_i) \right] = \sum_i \ln(2 \exp(L_i) \cosh(K_i)). \quad (2.23)$$

Substituindo a equação (2.23) em (2.20)

$$Z_N = \frac{N^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp -\frac{N}{2}(x^2 + y^2 + z^2 + v^2) \times \exp \left[\sum_i \ln(2 \exp(L_i) \cosh(K_i)) \right] dx dy dz dv. \quad (2.24)$$

As variáveis aleatórias e independentes ξ_i e η_i podem ser ditas contínuas ou discretas, e seguem tanto a distribuição gaussiana quanto a bimodal. Cada parcela do somatório da equação (2.24) se torna uma integral em ξ e η com peso $P(\xi, \eta) = P(\xi)P(\eta)$. Dessa forma, tem-se N integrais, que representam os N sítios da rede (VIANA, 2002).

Para calcular a energia livre, que é dada por:

$$f(\xi, \eta) = -\frac{1}{\beta N} \ln Z_N(\xi, \eta), \quad (2.25)$$

$$f(\xi, \eta) = -\frac{1}{\beta N} \ln \frac{N^2}{4\pi^2} \int \int \int \int \exp \left\{ -N \left[\left(\frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2} + \frac{z^2}{2} + \frac{v^2}{2} \right) - \frac{1}{N} \sum_i \ln[2 \exp(L_i) \cosh(K_i)] \right] \right\} dx dy dz dv, \quad (2.26)$$

utiliza-se o método ponto de sela para resolver integrais em x, y, z e v :

$$\int_{-\infty}^{\infty} c \exp(bf(y)) dy \approx c \max_{-\infty < y < \infty} \exp[bf(y)] \quad (2.27)$$

e assim,

$$f(\xi, \eta) = -\frac{1}{\beta N} \ln \left[\frac{N^2}{4\pi^2} \max_{-\infty < x' < \infty} \left\{ \exp \left[-N \left(\frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2} + \frac{z^2}{2} + \frac{v^2}{2} \right) - \frac{1}{N} \sum_i \ln[2(\exp(L_i) \cosh(K_i))] \right] \right\} \right].$$

No limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$): $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln(N/4\pi)^2}{N} \rightarrow 0$ e $\max_{-\infty < x' < \infty} (Nf(x)) = Nf(x)$. Ainda, se $L \rightarrow 0$ então $\exp L_i = 1$.

Portanto, a energia livre por partícula, após somar sobre i , será:

$$f(\xi, \eta) = \frac{1}{\beta} \left[\frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2 + v^2) - \ln[2 \cosh K] \right], \quad (2.28)$$

lembrando que x, y, z e v devem extremizar a Eq.(2.28).

Fazendo o cálculo da média configuracional da energia livre, em que

$$f = \langle \langle f(\xi, \eta) \rangle \rangle = \int \int f(\xi, \eta) P(\xi, \eta) d\xi d\eta, \quad (2.29)$$

tem-se

$$f = \frac{1}{\beta} \left[-\frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2 + v^2) - \int \int \ln[2 \cosh K] P(\xi, \eta) d\xi d\eta \right]. \quad (2.30)$$

Porém, é preciso interpretar as grandezas acima mencionadas das variáveis x, y, z e v . Para isso, utiliza-se o mínimo da energia livre em relação a cada uma dessas grandezas:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\beta f) = x - \sqrt{k_1}m = 0 \rightarrow x = \sqrt{k_1}m \quad (2.31)$$

$$\frac{\partial}{\partial y}(\beta f) = y - \sqrt{k_2}(q_1 + q_2) = 0 \rightarrow y = \sqrt{k_2}(q_1 + q_2) \quad (2.32)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}(\beta f) = z - j\sqrt{k_2}q_1 = 0 \rightarrow z = j\sqrt{k_2}q_1 \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial}{\partial v}(\beta f) = v - j\sqrt{k_2}q_2 = 0 \rightarrow v = j\sqrt{k_2}q_2. \quad (2.34)$$

Com estes resultados, a equação (2.30) ficará

$$f(\xi, \eta) = \frac{1}{\beta} \left[\frac{1}{2}(k_1 m^2 + 2k_2 q_1 q_2) - \int \int \ln(2 \cosh K) P(\xi, \eta) d\xi d\eta \right]. \quad (2.35)$$

A magnetização por spin, no ensemble canônico, é definida por:

$$m = \langle S_i \rangle = \text{tr}(S_i \exp(-\beta H)), \quad (2.36)$$

mas também pode ser reescrita da seguinte forma:

$$m = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial K} (\ln Z_N) = -\frac{\partial}{\partial K} (\beta f) \frac{\partial K}{\partial H} = -\frac{\partial}{\partial K} \beta f.$$

Portanto,

$$m = \int \int \tanh K P(\xi, \eta) d\xi d\eta. \quad (2.37)$$

É necessário, também, determinar os parâmetros de ordem da fase vidro de spin. Para isso, tem-se que

$$q_1 = \frac{1}{N} \langle \langle \sum_i \xi_i \langle S_i \rangle \rangle \rangle \quad \text{e} \quad q_2 = \frac{1}{N} \langle \langle \sum_i \eta_i \langle S_i \rangle \rangle \rangle. \quad (2.38)$$

Essas duas expressões também podem ser reescritas da forma

$$q_1 = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \varphi_1} (\ln Z_N) = -\frac{\partial}{\partial \varphi_1} (\beta f) \quad \text{e} \quad q_2 = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \varphi_2} (\ln Z_N) = -\frac{\partial}{\partial \varphi_2} (\beta f),$$

$$\text{com } \varphi_1 = \sqrt{k_2}(y + jz) \quad \text{e} \quad \varphi_2 = \sqrt{k_2}(y + jv).$$

Logo,

$$q_1 = \int \int \xi \tanh KP(\xi, \eta) d\xi d\eta \quad (2.39)$$

e

$$q_2 = \int \int \eta \tanh KP(\xi, \eta) d\xi d\eta. \quad (2.40)$$

Sabe-se que a energia livre será mínima se $q_1 = q_2 = q$, e isso está relacionado ao fato de que, se houver a troca $\xi \rightleftharpoons \eta$, o Hamiltoniano não se altera. Com isso, a equação da energia livre tem o seguinte resultado:

$$f = \frac{1}{\beta} \left[\frac{1}{2} (k_1 m^2 + 2k_2 q^2) - \int \int \ln(2 \cosh KP(\xi, \eta)) d\xi d\eta \right] \quad (2.41)$$

e o parâmetro de ordem vidro de spin

$$q = \frac{1}{2} \int \int (\xi + \eta) \tanh KP(\xi, \eta) d\xi d\eta, \quad (2.42)$$

em que $K = k_1 m + k_2 q(\xi + \eta) + k_3$, com $k_1 = \beta J_0$, $k_2 = \beta J$ e $k_3 = \beta H$.

Para ilustrar o que acontece quando se utiliza cada uma das distribuições de probabilidade propostas, segue um diagrama de fases da temperatura em função do acoplamento ferromagnético J_0 para a distribuição bimodal (Figura (2.7a)) e para a gaussiana (Figura (2.7b)). Em ambas distribuições, observa-se que, reduzindo a temperatura a partir da fase paramagnética, com valores baixos de J_0 , a fase PM sofre uma transição de segunda ordem para a fase vidro de spin, ou para a fase ferromagnética se os valores de J_0 forem altos. Porém, uma fase mista, em que os parâmetros de ordem vidro de spin q e magnetização m são diferentes de zero, é encontrada na distribuição bimodal. Mas essa fase não é observada quando se utiliza a distribuição gaussiana.

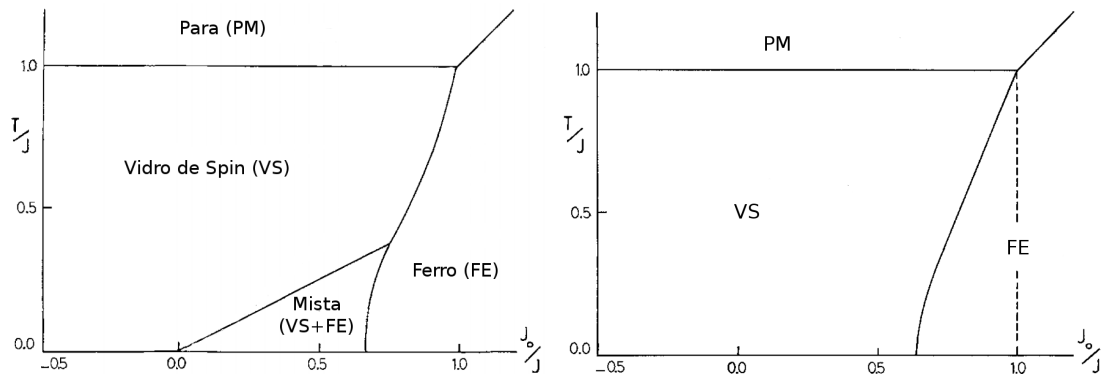


Figura 2.7: Diagrama de fases da temperatura T/J em função do acoplamento ferromagnético J_0/J (a) para a distribuição bimodal (ξ e $\eta = \pm 1$). (b) para a distribuição gaussiana. Figuras adaptadas de (HEMMEN; ENTER; CANISIUS, 1983).

2.2 Transições Inversas

As transições inversas são uma classe de transições de fases em que a fase usualmente ordenada aparece em temperaturas maiores que a fase desordenada. As transições inversas podem ser classificadas através da entropia de um sistema, pois nessa situação, a fase ordenada tem entropia maior que a fase desordenada, o que não ocorre nas transições de fase usuais. Assim, há uma inversão no conteúdo entrópico entre as fases envolvidas no sistema. Embora contraintuitivo, esse fenômeno foi encontrado em sistemas físicos bem conhecidos, como alguns polímeros (RUTH; RASTOGI, 2004), sais de Rochelle (ZEKS; SHUKLA; BLINC, 1971; JONA; SHIRANE, 1962) ou cristais líquidos (CLADIS et al., 1977, 1981), e o estudo das transições inversas tem crescido ultimamente através da descoberta de vários sistemas físicos que apresentam esse tipo de transição, como por exemplo, nanopartículas de ouro (DONNIO et al., 2010), isótopos de Hélio He^3 e He^4 (SCHUPPER; SHNERB, 2005), filmes finos magnéticos (PORTMANN; VATERLAUS; PESCIA, 2001) e supercondutores de altas temperaturas (AVRAHAM et al., 2001). As transições inversas são classificadas de duas formas: derretimento e congelamento inverso, que serão explicadas com mais detalhes nas próximas seções.

2.2.1 Derretimento Inverso

O surgimento do derretimento inverso se dá através da transição entre uma fase líquida (em sistemas magnéticos, a fase PM) a baixas temperaturas e uma fase cristalina (FE) em altas temperaturas (SCHUPPER; SHNERB, 2004). Este tipo de transição ocorre quando

a entropia do estado ordenado é maior do que a entropia do estado desordenado.

Para discutir os possíveis tipos de transições de fase, utiliza-se a equação de Clausius-Clapeyron, que relaciona a inclinação da curva de coexistência no diagrama $p - T$ com as descontinuidades da entropia e volume molar quando se passa de uma fase à outra (OLIVEIRA, 2005). Com base nessa equação, que pode ser relacionada à inclinação da curva de derretimento em transições de primeira ordem e descreve o contorno entre as fases líquida e cristalina, pode-se entender um pouco mais sobre derretimento inverso (SCHUPPER; SHNERB, 2004).

Seja

$$\frac{dP}{dT} = \frac{S^l - S^s}{V^l - V^s} \quad (2.43)$$

a equação que define a pressão dependente da temperatura, com S a entropia e V o volume molar, e ainda, os índices l e s representando as fases em alta e baixa temperatura e que oferece quatro tipos diferentes de curvas de derretimento, o que facilita a identificação de cenários que representam transições de primeira ordem, como mostra a figura (2.8), adaptada de (SCHUPPER; SHNERB, 2005).

Geralmente, a fase líquida ocorre a temperaturas mais altas do que a fase sólida, o que implica que a entropia molar do líquido é maior do que a do sólido, $S^l > S^s$. Na maioria das substâncias puras, a densidade do líquido é menor do que a do sólido, que equivale a dizer que o volume molar do líquido é maior do que o sólido, $V^l > V^s$ (SCHUPPER; SHNERB, 2004). Nesse caso então, o valor da inclinação da curva de primeira ordem é positivo ($\frac{dp}{dT} > 0$) e o sistema apresenta um derretimento normal. Ou seja, há um aumento da entropia e do volume molar quando o cristal se torna líquido, e pode ser visto na figura (2.8), representado pela curva CD . A curva BC representa a situação para $S^s - S^l < 0$ e $V^s - V^l > 0$, em que o volume molar do líquido é menor que o do sólido, o sinal da inclinação da curva de transição de primeira ordem é negativo e, nesse caso, a temperatura de derretimento decresce quando a pressão aumenta. Nesse intervalo, ocorre um derretimento anormal. Já nos casos em que a transição envolve calor latente, em qualquer situação de derretimento inverso tem-se $S^s - S^l > 0$, seja $V^s - V^l > 0$ (curva negativa) ou $V^s - V^l < 0$ (curva positiva), isto é, o aquecimento isobárico conduz o sistema de uma fase líquida para uma fase cristalina. Esse exemplo pode ser melhor entendido nos intervalos AB e AD , onde ocorre o derretimento inverso.

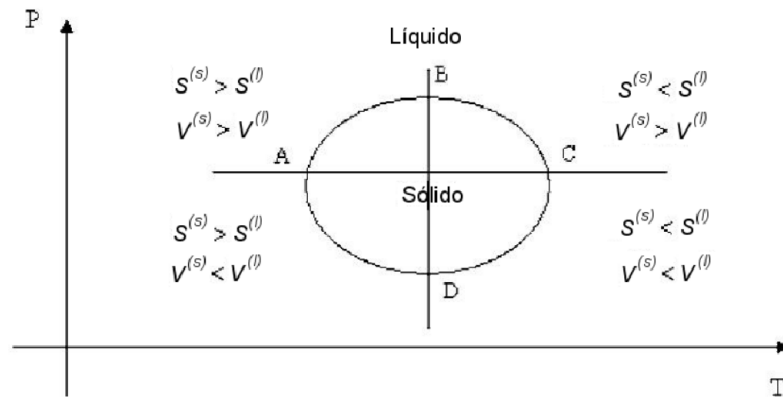


Figura 2.8: Gráfico da pressão como função da temperatura para diferentes curvas de derretimento resultantes da equação (2.43) (SCHUPPER; SHNERB, 2004, 2005).

Um modelo clássico que pode ser utilizado para estudar esse tipo de transição inversa é o modelo Blume-Capel (BC) (BLUME, 1966; CAPEL, 1966), definido pelo Hamiltoniano

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + D \sum_{i=1}^N S_i^2 \quad (2.44)$$

com $S_i = 0, \pm 1$. Observa-se que esse modelo não contém desordem e é para spin 1. Neste caso, há duas interações competindo: uma interação de troca J que favorece os estados $S = \pm 1$ (interagentes) e um campo cristalino D que favorece os estados $S = 0$ (não interagentes). Nesse caso, J é responsável por introduzir um acoplamento ferromagnético que pode levar ao surgimento da fase FE. Por outro lado, D favorece a fase PM em temperaturas baixas. Então, esse modelo inclui uma condição básica do derretimento inverso: a preferência energética dos estados não interagentes quando D é grande. Entretanto, para se obter transição inversa, é necessário adicionar uma vantagem entrópica através do parâmetro de degenerescência $r = l/k \geq 1$, em que l define a degenerescência dos estados com $S = \pm 1$ e k a degenerescência dos estados $S = 0$, para que então, ocorra o surgimento de derretimento inverso (BLUME, 1966; CAPEL, 1966). Esse parâmetro de degenerescência tem a função de favorecer o aumento entrópico da fase ordenada.

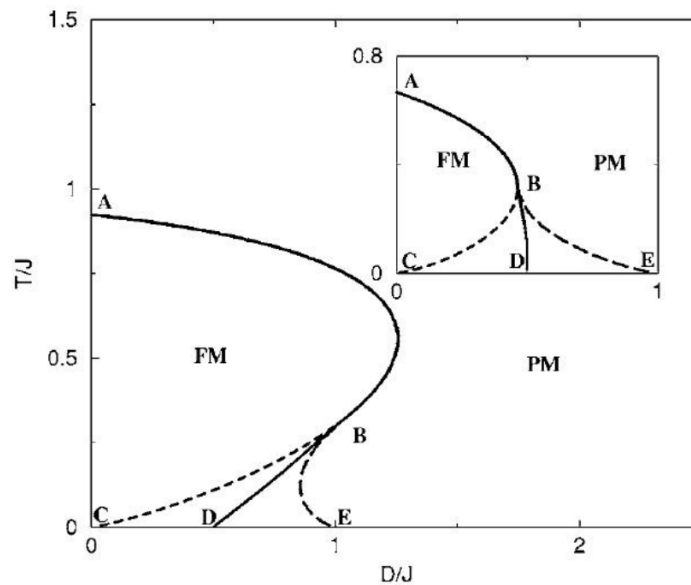


Figura 2.9: Diagrama de fases do modelo Blume-Capel da temperatura T em função do campo cristalino D , para $r = 1$ na figura menor, que não apresenta derretimento inverso, e para $r = 6$ na figura principal, que exibe derretimento inverso (SCHUPPER; SHNERB, 2004, 2005).

A Figura (2.9)(imagem menor) apresenta os resultados do modelo BC original (quando $r = 1$) sem vantagem entrópica. A linha AB representa uma transição de segunda ordem entre as fases PM e FE. Seja B o ponto tricrítico e BD a transição de primeira ordem, as linhas BC e BE definem o limite de validade das soluções PM e FE, respectivamente. Nesse caso, o sistema não apresenta um derretimento inverso. Porém, os resultados são diferentes se o valor de r for modificado. Por exemplo, quando $r = 6$ a fase FE ocupa maior área no diagrama de fases, fato que reflete a vantagem entrópica dos estados $S = \pm 1$. Se BD é a transição de primeira ordem entre as fases, o diagrama indica a presença de derretimento inverso, pois com o aumento da temperatura a partir de uma fase PM (desordenada), se obtém uma fase FE (ordenada).

É importante salientar que o derretimento inverso não aparece espontaneamente no modelo BC, é preciso introduzir a vantagem entrópica para que isso ocorra ($r > 1$).

2.2.2 Congelamento Inverso

Congelamento inverso é o aparecimento (reversível) de características vidro em um sistema ao aumentar sua temperatura. Ou seja, é uma transição inversa entre uma fase líquida (PM) em baixas temperaturas e uma fase vidro (VS) em altas temperaturas (SCHUPPER; SHNERB, 2004).

Em polímeros, uma solução de metilcelulose em água pode ser citada como um exemplo de sistema que apresenta congelamento inverso (SCHUPPER; SHNERB, 2005). Quando uma solução de metilcelulose é aquecida (acima de 55°C para uma solução de 5g/l) e se transforma em um gel branco, pode-se dizer que essa transição é reversível, pois o resfriamento do sistema fará com que a solução retorne ao estado natural. Em sua fase de temperatura mais elevada, o gel metilcelulose apresenta características vidro (SCHUPPER; SHNERB, 2005). Neste caso, a conformação dobrada (fechada) é favorecida energeticamente enquanto que a sua conformação desdobrada (aberta) é favorecida entropicamente, como pode ser visto na Figura (2.10). O aumento da entropia da conformação aberta pode ser atribuído ao número de possíveis configurações do polímero em si como também pode estar relacionado ao arranjo espacial das moléculas de água na vizinhança. Para explicar as transições inversas nesses sistemas, o seguinte mecanismo é proposto: no estado líquido, as moléculas de água são mantidas em estruturas comparadas a “gaiolas” formadas por constituintes hidrofóbicos presentes na solução. Entretanto, quando o gel é formado e os segmentos hidrofóbicos se agregam, formando ligações cruzadas, as “gaiolas” são abertas, e as moléculas de água ficam livres para se movimentarem na rede. Conseqüentemente, tanto a quantidade de configurações possíveis quanto a entropia das moléculas de água, que eram baixas na fase líquida, acabam aumentando quando os agregados hidrofóbicos se reagrupam e formam o gel. A principal causa de transição inversa em vidro é que a alta entropia das conformações abertas do polímero são também as estruturas interagentes, permitindo a formação de ligações hidrofóbicas com outros polímeros na solução, um processo que conduz a formação do gel (SCHUPPER; SHNERB, 2005).

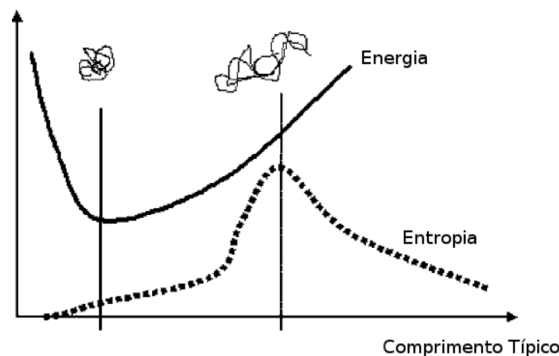


Figura 2.10: Dependência da energia e da entropia em função do comprimento típico de um polímero de metilcelulose em água. As conformações dobradas (não interagentes) são favorecidas energeticamente e menos entrópicas. Já as conformações desdobradas (interagentes) possuem energias mais altas, mas também admitem um número maior de configurações microscópicas, tornando-as mais favorecidas em temperaturas mais altas (SCHUPPER; SHNERB, 2004, 2005).

2.2.2.1 Congelamento inverso em modelos clássicos

Um modelo capaz de reproduzir algumas características do congelamento inverso é o modelo clássico de Ghatak e Sherrington (GS) (GHATAK; SHERRINGTON, 1977) definido pelo Hamiltoniano

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j + D \sum_{i=1}^N S_i^2 \quad (2.45)$$

com $S = \pm 1, 0$ e a interação de troca J_{ij} é uma variável aleatória que segue uma distribuição de probabilidade gaussiana. Este termo aleatório J_{ij} é responsável por introduzir desordem e frustração ao problema, levando assim ao surgimento da fase VS. Particularmente, o termo de desordem introduz também uma complicação ao problema, que ocorre no cálculo de sua média e deve ser realizado utilizando o método das réplicas (SCHUPPER; SHNERB, 2005), que já foi brevemente discutido na seção (2.1.2).

Entretanto, neste modelo não há necessidade de introduzir vantagem entrópica através da degenerescência dos estados interagentes para que ocorra o surgimento de uma transição inversa, mais especificamente, o congelamento inverso. Esse assunto foi recentemente estudado utilizando também a proporção de degenerescência r (CRISANTI; LEUZZI, 2005). Porém, os resultados mais interessantes foram observados para o caso que corresponde à situação $r = 1$, que como visto anteriormente, não há vantagem entrópica.

Como principal resultado é encontrada uma transição entre as fases PM e VS que é obtida para uma certa região de D , no qual observa-se que abaixo de uma linha de transição de primeira ordem a entropia da fase PM é menor que a da fase VS. Isto é, ocorre uma reentrância nas fases VS/PM associada ao congelamento inverso. Em contraste com o modelo BC, aqui a transição inversa surge espontaneamente. Isto é atribuído à desordem não trivial que introduz frustração, além da presença dos estados de spin $S = 0$ (CRISANTI; LEUZZI, 2005; MORAIS et al., 2012).

2.2.2.2 Congelamento inverso em modelos fermiônicos

Outro modelo recentemente usado para estudar transições inversas é o modelo Vidro de Spin de Ising Fermiônico (VSIF), que é descrito pelo hamiltoniano (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2010)

$$\hat{H} = - \sum_{ij} J_{ij} \hat{S}_i \hat{S}_j - \mu \sum_i \hat{n}_i, \quad (2.46)$$

em que os spins são escritos em termos de operadores fermiônicos de criação e destruição atuando sobre o espaço de Fock com quatro estados por sítio: dois magnéticos ($|0\downarrow\rangle$ e $|\uparrow 0\rangle$) e dois não magnéticos ($|\uparrow\downarrow\rangle$ e $|00\rangle$). Então os operadores de spin são definidos por $\hat{S} = c_{\uparrow}^{\dagger}c_{\uparrow} - c_{\downarrow}^{\dagger}c_{\downarrow}$ e \hat{n} é o número de ocupação, dado por $\hat{n} = c_{\uparrow}^{\dagger}c_{\uparrow} + c_{\downarrow}^{\dagger}c_{\downarrow}$, em que c_{σ}^{\dagger} cria um férmion com spin σ , enquanto que c_{σ} destrói um férmion com spin σ , com $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow .

Na equação (2.46) a interação aleatória J_{ij} também segue uma distribuição de probabilidade semelhante ao proposto pelo modelo SK, e novamente, o termo J_{ij} introduz desordem e frustração ao problema, favorecendo a fase VS.

Nesse modelo, o potencial químico μ tem a função de controlar a ocupação média de férmions por sítio e introduzir flutuações de carga (flutuações no número de ocupação), o que favorece a fase PM. No ensemble grande canônico, os modelos VSIF têm ligação com o modelo GS clássico através de um mapeamento entre o potencial químico e o parâmetro anisotrópico D (FELDMANN; OPPERMANN, 2000). De fato, o VSIF foi estudado na referência (MORAIS et al., 2012) e mostra o surgimento espontâneo de congelamento inverso para uma região de μ . Tal congelamento inverso está associado à diluição magnética, que significa o aumento de sítios duplamente ocupados, e à frustração introduzida pela interação aleatória J_{ij} .

Como exposto neste capítulo, a presença da fase VS, nesses modelos capazes de apresentar estados de spin $S = 0$, pode ser relevante no estudo de transições inversas. Com base nisso, no próximo capítulo será apresentado o modelo de van Hemmen em uma formulação fermiônica, que é o objeto de estudo deste trabalho.

3 Modelo de van Hemmen Fermiônico

Neste capítulo, será apresentada uma formulação fermiônica para o modelo de van Hemmen, em que os operadores de spin são escritos como uma combinação bilinear dos operadores fermiônicos de criação e destruição (MAGALHAES; ZIMMER; MORAIS, 2010; ZIMMER; BERGER; MAGALHAES, 2012). Neste caso, os operadores de spin são quânticos, em contraste com o modelo de vH clássico discutido na seção 2.1.2. Como os operadores de criação e destruição atuam sobre o espaço de Fock que admite estados com zero, um ou dois elétrons (com spins diferentes) por sítio, então os operadores de spin atuam no espaço com quatro autoestados possíveis por sítio: dois magnéticos ($|\uparrow 0\rangle, |0 \downarrow\rangle$) e dois não magnéticos ($|\uparrow \downarrow\rangle, |0 0\rangle$).

A formulação fermiônica permite que o problema seja tratado em duas versões. A primeira delas é conhecida como modelo de dois estados (2S), e impõe uma restrição na função de partição de que somente estados com um único férmion por sítio são permitidos (THEUMANN; SCHIMIDT; MAGALHAES, 2002). A outra versão considera todos os quatro estados, e é conhecida como modelo 4S, e por isso pode-se calcular a função de partição no ensemble grande canônico, em que a introdução do potencial químico regula a ocupação média dos sítios e introduz flutuações de carga, possibilitando observar comportamentos interessantes nas transições de fase. Entretanto, neste trabalho será abordada somente a versão do modelo com quatro estados (4S), pois trabalhos anteriores que usam desordem do tipo SK mostraram que o modelo fermiônico no ensemble grande canônico pode exibir congelamento inverso para uma determinada região de μ (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2010; ZIMMER et al., 2011; MORAIS; ZIMMER; MAGALHAES, 2011). Porém, no que diz respeito a transições inversas, ainda não foi realizado um estudo de modelos fermiônicos com outro tipo de desordem. Este é um dos objetivos do presente trabalho.

3.1 Modelo adotado

O modelo fermiônico de van Hemmen quântico é definido pelo Hamiltoniano

$$\hat{H} = -2\frac{J_0}{N} \sum_{i \neq j} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - 2 \sum_{i \neq j} J_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - 2\Gamma \sum_i \hat{S}_i^x \quad (3.1)$$

sendo as somas feitas sobre todos os N sítios. J_0 representa a interação ferromagnética e Γ o campo transversal, cuja função é inverter quanticamente os momentos magnéticos do sistema. \hat{S}_i^z e \hat{S}_i^x são os operadores quânticos de spin (representados na equação (3.5)) e J_{ij} o acoplamento responsável pela desordem e frustração do modelo (características fundamentais para existir a fase vidro de spin), dado por (HEMMEN, 1982; HEMMEN; ENTER; CANISIUS, 1983)

$$J_{ij} = \frac{J}{N} [\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i] \quad (3.2)$$

em que ξ e η são variáveis aleatórias sujeitas a diferentes distribuições de probabilidades: a bimodal (distribuição discreta) e a gaussiana (distribuição contínua). Essas distribuições são, respectivamente, expressas como

$$P(x_i) = \frac{1}{2} [\delta(x_i - 1) + \delta(x_i + 1)] \quad (3.3)$$

e

$$P(x_i) = \frac{1}{2\pi} \exp\left[-\frac{x_i^2}{2}\right], \quad (3.4)$$

com $x_i = \xi_i$ ou η_i .

Cada uma dessas distribuições exibe resultados particulares, e ambas introduzem frustração no problema (HEMMEN, 1982; HEMMEN; ENTER; CANISIUS, 1983), mas a distribuição contínua apresenta diferentes valores de interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas J_{ij} , que podem gerar resultados diferentes dos observados pela distribuição bimodal (ver seção (2.1.2.2)).

Os operadores de spin do modelo (3.1) são definidos em termos dos operadores fermiônicos de criação ($c_{i\sigma}^\dagger$) e destruição ($c_{i\sigma}$),

$$\hat{S}_i^z = \frac{1}{2} [\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}] \quad \text{e} \quad \hat{S}_i^x = \frac{1}{2} [c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}] \quad (3.5)$$

em que o operador número $\hat{n}_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ faz a contagem do número de férmions do sítio i , com a projeção de spin σ (\uparrow ou \downarrow). Esses operadores de spin, escritos em segunda quantização, permitem-nos analisar a interação entre flutuação de carga e spin na presença de um mecanismo de “*flipagem*” dos spins, dado por Γ . Portanto, no modelo (3.1) o

primeiro termo (J_0) favorece a fase FE ($J_0 \gg 0$), o segundo pode levar à fase VS ($J \gg 0$), e o terceiro termo é capaz de destruir as ordens magnéticas ($\Gamma \gg 0$) (MAGALHAES; ZIMMER; MORAIS, 2010).

3.2 Obtenção do Potencial Termodinâmico

Para obter as quantidades termodinâmicas do modelo (3.1) inicia-se a descrição da função de partição,

$$Z = \text{tr} e^{-\beta H} \quad (3.6)$$

onde tr representa o traço e $\beta = 1/k_B T$ (T é a temperatura e k_B é a constante de Boltzmann. Aqui, assume-se que $k_B = 1$).

Pelo fato do modelo ser representado com operadores fermiônicos, é aconselhável utilizar o formalismo das integrais de caminho fermiônicas, que expressa Z da seguinte forma (NEGELE; ORLAND, 1988):

$$Z = \int D(\phi^* \phi) \exp \left[\int_0^\beta d\tau \sum_{i,\sigma} \phi_{i\sigma}^*(\tau) \left[-\frac{\partial}{\partial \tau} + \mu \right] \phi_{i\sigma}(\tau) - H(\phi^*(\tau), \phi(\tau)) \right] \quad (3.7)$$

em que μ é o potencial químico. O formalismo das integrais de caminho fermiônicas pode ser visto em mais detalhes no Apêndice B.

O formalismo utilizado no cálculo dessas integrais de caminho usa campos de Grassmann ϕ^* e ϕ , que estão associados aos operadores c^\dagger e c . O ordenamento temporal é introduzido por meio de um tempo imaginário (τ), com $0 \leq \tau \leq \beta$, para tratar a não comutatividade dos operadores de spin presentes no Hamiltoniano (NEGELE; ORLAND, 1988).

No limite termodinâmico, a função de partição pode ser escrita como:

$$Z = \int D(\phi^* \phi) \exp \left[\int_0^\beta d\tau (A_\Gamma(\tau) + A_I(\tau, \xi, \eta)) \right] \quad (3.8)$$

com

$$A_\Gamma(\tau) = \sum_{i,\sigma} \phi_{i\sigma}^*(\tau) \left[-\frac{\partial}{\partial \tau} + \mu \right] \phi_{i\sigma}(\tau) + \Gamma \sum_i S_i^x(\tau), \quad (3.9)$$

e

$$A_I(\tau, \xi, \eta) = A_{FE}(\tau) + A_{VS}(\tau), \quad (3.10)$$

sendo as partes ferromagnética e aleatória da ação de interação A_I , respectivamente

$$A_{FE}(\tau) = \frac{J_0}{2N} \sum_{(i,j)} S_i^z(\tau) S_j^z(\tau) \quad \text{e} \quad A_{VS}(\tau) = \sum_{(i,j)} \frac{J_{ij}}{2} S_i^z(\tau) S_j^z(\tau), \quad (3.11)$$

em que S^z e S^x estão definidos nas Eq.(3.12) e (3.13) em termos dos Campos de Grassmann

$$S_i^z(\tau) = [\phi_{i\uparrow}^*(\tau)\phi_{i\uparrow}(\tau) - \phi_{i\downarrow}^*(\tau)\phi_{i\downarrow}(\tau)] \quad (3.12)$$

$$S_i^x(\tau) = [\phi_{i\uparrow}^*(\tau)\phi_{i\downarrow}(\tau) + \phi_{i\downarrow}^*(\tau)\phi_{i\uparrow}(\tau)]. \quad (3.13)$$

Com o uso de algumas relações matemáticas, reescreve-se a ação A_I como:

$$A_I(\tau, \xi, \eta) = \frac{J_0}{2N} \left[\sum_i S_i^z(\tau) \right]^2 - \frac{J}{2N} \left[\sum_i \xi_i S_i^z(\tau) \right]^2 - \frac{J}{2N} \left[\sum_i \eta_i S_i^z(\tau) \right]^2 + \frac{J}{2N} \left[\sum_i (\xi_i + \eta_i) S_i^z(\tau) \right]^2, \quad (3.14)$$

que depende de um único sítio, porém, possui termos quadráticos de produtos notáveis. Aqui, as Equações (3.12) e (3.13) podem ser escritas de forma matricial:

$$S_i^z(\tau) = \underline{\phi}_i^\dagger(\tau) \underline{\sigma}^z \underline{\phi}_{i\sigma}(\tau) \quad (3.15)$$

$$S_i^x(\tau) = \underline{\phi}_i^\dagger(\tau) \underline{\sigma}^x \underline{\phi}_{i\sigma}(\tau) \quad (3.16)$$

com as matrizes definidas por:

$$\underline{\phi}_i = \begin{bmatrix} \phi_{i\uparrow}(\tau) \\ \phi_{i\downarrow}(\tau) \end{bmatrix}, \quad \underline{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

Observa-se novamente que a função Z está descrita em termos das variáveis ϕ^* e ϕ que anticomutam. Os termos quadráticos da Eq. (3.14) podem ser linearizados pelo uso de transformações Hubbard-Stratonovich

$$\exp(\lambda a^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{-x^2}{2} + a\sqrt{2\lambda}x\right) dx. \quad (3.18)$$

Esse procedimento resulta na seguinte expressão:

$$Z = \int Dm(\tau) \int Dq_3(\tau) \int Dq_1(\tau) \int Dq_2(\tau) \exp\left[-\frac{N}{2} \int_0^\beta d\tau [J_0 m^2(\tau) + Jq_3^2(\tau) - Jq_1^2(\tau) - Jq_2^2(\tau)] - \ln(\Lambda)\right] \quad (3.19)$$

em que

$$\Lambda = \int D(\phi^* \phi) \exp \left[\int_0^\beta \left\{ A_\Gamma(\tau) + \sum_i h_i(\xi, \eta, \tau) S_i^z(\tau) \right\} \right], \quad (3.20)$$

com o campo interno

$$h_i(\xi, \eta, \tau) = J_0 m(\tau) + J(q_3(\tau) - q_1(\tau)) \xi_i + J(q_3(\tau) - q_2(\tau)) \eta_i. \quad (3.21)$$

Deve-se ressaltar que os termos quadráticos em (3.14) dependem de τ , portanto para cada τ utilizou-se um campo auxiliar dependente de τ .

Nas equações (3.19) e (3.20) é tomada a aproximação estática, que consiste em $q_n = q_n(\tau)$ e $m = m(\tau)$, com $n = 1, 2$ ou 3 , resultando na seguinte expressão:

$$Z = \int Dm \int Dq_3 \int Dq_1 \int Dq_2 \exp \left[-\frac{N}{2} \beta [J_0 m^2 + Jq_3^2 - Jq_1^2 - Jq_2^2] - \ln(\Lambda^{\text{est}}) \right], \quad (3.22)$$

onde Λ^{est} é semelhante ao definido pela equação (3.20), porém, sem a dependência de τ no campo interno h_i .

Utiliza-se a transformada de Fourier para expressar Λ^{est} , em que

$$\phi_i(\tau) = \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \frac{\tau}{\beta}} \phi_i(\omega) \quad \text{e} \quad \phi_i^*(\tau) = \sum_{\omega_m} e^{+i\omega_m \frac{\tau}{\beta}} \phi_i^*(\omega) \quad (3.23)$$

e a integral em (τ) pode ser substituída por um somatório sobre as frequências de Matsubara, da qual obtém-se a expressão

$$\Lambda(\xi, \eta) = \int D(\phi^* \phi) \exp \sum_{i=1}^N \sum_{n=0}^{\infty} \phi_i^*(\omega) \underline{G}^{-1}(h_i, w) \phi_i(\omega) \quad (3.24)$$

com

$$\underline{G}^{-1}(h_i, w) = [(i\omega + \beta\mu)\underline{I} + \beta h_i \underline{\sigma}^z + \beta \Gamma \underline{\sigma}^x], \quad (3.25)$$

em que $\underline{\phi}$, $\underline{\sigma}^z$ e $\underline{\sigma}^x$ estão definidas na Eq.(3.17) e \underline{I} é a matriz identidade.

A integral sobre os campos de Grassmann na Eq.(3.24) é realizada calculando o determinante da matriz \underline{G}^{-1} . Feito isso, a soma sobre as frequências de Matsubara é resolvida seguindo a referência (THEUMANN; SCHIMIDT; MAGALHAES, 2002).

Uma interpretação física aos campos q_n e m segue como: no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$), as integrais funcionais sobre $q_n(\tau)$ ($n=1,2$ e 3) e $m(\tau)$ na Eq. (3.19) podem ser

resolvidas pelo uso do método do ponto de sela, da qual obtém-se

$$q_1 = q_1(\tau) = \frac{1}{N} \sum_i \langle \xi_i S_i^z(\tau) \rangle \quad (3.26)$$

e

$$q_2 = q_2(\tau) = \frac{1}{N} \sum_i \langle \eta_i S_i^z(\tau) \rangle \quad (3.27)$$

como sendo os parâmetros de ordem da fase vidro de spin (com $q_3 = q_1 + q_2$), e

$$m = m(\tau) = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^z(\tau) \rangle, \quad (3.28)$$

que representa a magnetização, característica da fase ferromagnética (HEMMEN, 1982; HEMMEN; ENTER; CANISIUS, 1983). A notação $\langle \dots \rangle$ representa a média sobre o problema efetivo da Eq. (3.20).

O potencial termodinâmico por partícula é dado por

$$\Omega(\xi, \eta) = -\frac{1}{\beta N} \ln Z(\xi, \eta), \quad (3.29)$$

e depende das variáveis aleatórias ξ e η . Então calcula-se a média configuracional sobre essas variáveis para obter Ω . Para tal, $\Omega = \langle \langle \Omega(\xi, \eta) \rangle \rangle$, em que $\langle \langle \dots \rangle \rangle$ representa a média sobre a distribuição bimodal ou sobre a distribuição gaussiana e, então,

$$\Omega = \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{2} (J_0 m^2 + J q_3^2 - J q_2^2 - J q_1^2) - \beta \mu - \langle \langle \ln 2 [\cosh(\beta \mu) + \cosh(\beta \sqrt{\Delta})] \rangle \rangle \right\} \quad (3.30)$$

com $\Delta = h_i^2 + \Gamma^2$. Isto é, $\Delta = [J_0 m - J q_1 \xi - J q_2 \eta + J(\xi + \eta) q_3]^2 + \Gamma^2$.

Assumindo que o campo magnético transversal é nulo ($\Gamma = 0$), Δ pode ser reescrito da seguinte maneira: $\Delta = [J_0 m - J q_1 \xi - J q_2 \eta + J(\xi + \eta) q_3]^2$.

A aproximação estática foi introduzida ao problema através da relação $q = q_n(\tau)$ e $m = m(\tau)$, com o objetivo de tratar a não comutatividade dos operadores de spin S_i^x e S_i^z . Porém, quando $\Gamma = 0$, os operadores comutam entre si, comprovando que a validade da aproximação estática é exata.

Tomando o mínimo do potencial termodinâmico $\left(\frac{\partial}{\partial m} \beta \Omega = 0 \right)$ em relação à magnetização por spin, a expressão definida pela Eq. (3.28) toma a seguinte forma:

$$J_0 m - \left\langle \left\langle \frac{\sinh \beta \sqrt{\Delta}}{\cosh \beta \mu + \cosh \beta \sqrt{\Delta}} \right\rangle \right\rangle J_0 = 0. \quad (3.31)$$

Portanto,

$$m = \left\langle \left\langle \frac{\sinh \beta \sqrt{\Delta}}{\cosh \beta \mu + \cosh \beta \sqrt{\Delta}} \right\rangle \right\rangle. \quad (3.32)$$

Da mesma forma para o parâmetro de ordem Vidro de Spin das Eq. (3.26) e (3.27), com $\left(\frac{\partial}{\partial q} \beta \Omega = 0\right)$ obtém-se que

$$q_1 = \left\langle \left\langle \frac{\xi \sinh \beta \sqrt{\Delta}}{\cosh \beta \mu + \cosh \beta \sqrt{\Delta}} \right\rangle \right\rangle \quad (3.33)$$

$$q_2 = \left\langle \left\langle \frac{\eta \sinh \beta \sqrt{\Delta}}{\cosh \beta \mu + \cosh \beta \sqrt{\Delta}} \right\rangle \right\rangle, \quad (3.34)$$

além disso, assume-se que $q_3 = q_1 + q_2$.

Sendo assim, a equação do potencial termodinâmico (3.30) pode ser reescrita na seguinte forma:

$$\Omega = \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{2} [J_0 m^2 + J(q_1 + q_2)^2 - Jq_2^2 - Jq_1^2] - \beta \mu - \langle \langle \ln 2 [\cosh(\beta \mu) + \cosh(\beta \sqrt{\Delta})] \rangle \rangle \right\}. \quad (3.35)$$

Sabendo que $q = q_1 = q_2$, finalmente o potencial grande canônico por sítio, dado por $\Omega = -\frac{1}{N\beta} \langle \langle \ln Z \rangle \rangle$, pode ser obtido:

$$\beta \Omega = \frac{\beta J_0}{2} m^2 + \beta J q^2 - \beta \mu - \langle \langle \ln 2 K(\xi, \eta) \rangle \rangle \quad (3.36)$$

com

$$K(\xi, \eta) = \cosh(\beta \mu) + \cosh(\beta [J_0 m + J(\xi + \eta)q]). \quad (3.37)$$

A notação $\langle \langle \dots \rangle \rangle$ representa a média sobre as variáveis aleatórias ξ e η que podem seguir tanto a distribuição bimodal Eq. (3.3) quanto a distribuição gaussiana Eq. (3.4).

3.3 Cálculo da média configuracional

Para ilustrar como se realiza a média configuracional, utilizam-se os procedimentos a seguir. A partir das distribuições de probabilidade bimodal (3.3) e gaussiana (3.4), respectivamente, tem-se que

$$P(\xi, \eta) = P(\xi)P(\eta) = \left\{ \frac{1}{2} [\delta(\xi - 1) + \delta(\xi + 1)] \right\} \left\{ \frac{1}{2} [\delta(\eta - 1) + \delta(\eta + 1)] \right\} \quad (3.38)$$

$$P(\xi, \eta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-\xi^2}{2}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-\eta^2}{2}\right). \quad (3.39)$$

O cálculo da média configuracional pode ser desenvolvido, através de

$$\langle\langle f(\xi, \eta) \rangle\rangle = \int \int f(\xi, \eta) P(\xi, \eta) d\xi d\eta. \quad (3.40)$$

Lembrando que a partir da Eq.(3.36) do potencial termodinâmico, é possível obter as equações do parâmetro de ordem q e da magnetização m , através de $\frac{\partial \beta \Omega}{\partial q} = 0$ e $\frac{\partial \beta \Omega}{\partial m} = 0$,

$$q = \frac{1}{2} \langle\langle (\xi + \eta) \frac{\sinh \beta [J_0 m + J(\xi + \eta) q]}{\cosh \beta \mu + \cosh \beta [J_0 m + J(\xi + \eta) q]} \rangle\rangle \quad (3.41)$$

e

$$m = \langle\langle \frac{\sinh \beta [J_0 m + J(\xi + \eta) q]}{\cosh \beta \mu + \cosh \beta [J_0 m + J(\xi + \eta) q]} \rangle\rangle. \quad (3.42)$$

Para uma explicação ainda mais completa sobre os cálculos das médias, as duas distribuições de probabilidades serão apresentadas separadamente nos próximos tópicos.

3.3.1 Distribuição de probabilidade bimodal

Partindo da distribuição de probabilidade bimodal (3.38), é possível resolver analiticamente as equações do potencial termodinâmico, parâmetro de ordem vidro de spin e magnetização.

Portanto, as equações (3.36), (3.41) e (3.42) tomarão as seguintes formas:

$$\beta \Omega = \frac{\beta J_0 m^2}{2} + \beta J q^2 - \beta \mu - \frac{1}{4} \int \int \ln 2 [\cosh \beta \mu + \cosh \beta [J_0 m + J(\xi + \eta) q]] [\delta(\xi - 1) + \delta(\xi + 1)] [\delta(\eta - 1) + \delta(\eta + 1)] d\xi d\eta \quad (3.43)$$

$$q = \frac{1}{8} \int \int (\xi + \eta) \frac{\sinh \beta [J_0 m + J(\xi + \eta) q]}{\cosh \beta \mu + \cosh \beta [J_0 m + J(\xi + \eta) q]} [\delta(\xi - 1) + \delta(\xi + 1)] [\delta(\eta - 1) + \delta(\eta + 1)] d\xi d\eta \quad (3.44)$$

$$m = \frac{1}{4} \int \int \frac{\sinh \beta [J_0 m + J(\xi + \eta) q]}{\cosh \beta \mu + \cosh \beta [J_0 m + J(\xi + \eta) q]} [\delta(\xi - 1) + \delta(\xi + 1)] [\delta(\eta - 1) + \delta(\eta + 1)] d\xi d\eta. \quad (3.45)$$

Usando a propriedade da função delta de Dirac

$$\int f(x)\delta(x-x_0)dx = f(x_0), \quad (3.46)$$

tem-se como resultado analítico para a média sobre a desordem das equações (3.36), (3.41) e (3.42):

$$\begin{aligned} \beta\Omega = & \frac{\beta J_0 m^2}{2} + \beta J q^2 - \beta\mu - \frac{1}{4} [\ln 2[\cosh \beta\mu + \cosh \beta(J_0 m + 2Jq)] \\ & + 2\ln 2[\cosh \beta\mu + \cosh \beta(J_0 m)] + \ln 2[\cosh \beta\mu + \cosh \beta(J_0 m - 2Jq)]], \end{aligned} \quad (3.47)$$

$$q = \frac{1}{4} \left[\frac{\sinh \beta[J_0 m + 2Jq]}{\cosh \beta\mu + \cosh \beta[J_0 m + 2Jq]} - \frac{\sinh \beta[J_0 m - 2Jq]}{\cosh \beta\mu + \cosh \beta[J_0 m - 2Jq]} \right], \quad (3.48)$$

$$\begin{aligned} m = \frac{1}{4} \left[\frac{\sinh \beta[J_0 m + 2Jq]}{\cosh \beta\mu + \cosh \beta[J_0 m + 2Jq]} + \frac{2\sinh \beta J_0 m}{\cosh \beta\mu + \cosh \beta J_0 m} \right. \\ \left. + \frac{\sinh \beta[J_0 m - 2Jq]}{\cosh \beta\mu + \cosh \beta[J_0 m - 2Jq]} \right]. \end{aligned} \quad (3.49)$$

3.3.2 Distribuição de probabilidade gaussiana

A utilização desta distribuição de probabilidade necessita que sejam usados processos numéricos, como soluções de integrais, para se obterem resultados a partir das equações do potencial termodinâmico, do parâmetro de ordem vidro de spin e magnetização. Portanto, é impossível resolver analiticamente, pois as variáveis ξ e η podem assumir valores entre $[-\infty, \infty]$.

$$\begin{aligned} \beta\Omega = & \frac{\beta J_0 m^2}{2} + \beta J q^2 - \beta\mu - \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \ln 2[\cosh \beta\mu + \\ & \cosh \beta(J_0 m + J(\xi + \eta)q)] \times \exp \left[-\frac{1}{2}(\xi^2 + \eta^2) \right] d\xi d\eta, \end{aligned} \quad (3.50)$$

$$q = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (\xi + \eta) \frac{\sinh \beta[J_0 m + J(\xi + \eta)q]}{\cosh \beta\mu + \cosh \beta[J_0 m + J(\xi + \eta)q]} \exp \left[-\frac{1}{2}(\xi^2 + \eta^2) \right] d\xi d\eta, \quad (3.51)$$

$$m = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sinh \beta [J_0 m + J(\xi + \eta)q]}{\cosh \beta \mu + \cosh \beta (J_0 m + J(\xi + \eta)q)} \exp \left[-\frac{1}{2}(\xi^2 + \eta^2) \right] d\xi d\eta. \quad (3.52)$$

3.4 Outras quantidades termodinâmicas obtidas a partir do potencial grande canônico

Outras quantidades termodinâmicas de interesse podem ser derivadas a partir de Ω , como exemplo, a entropia S e o número de ocupação médio ν , que são dados por (lembrando que $\Gamma = 0$)

$$S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T} \quad \text{e} \quad \nu = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}. \quad (3.53)$$

Calculando S e ν , obtém-se como resultado

$$S = \ln 2 + \langle \langle \ln [\cosh \beta \mu + \cosh \beta h] \rangle \rangle - \beta \mu \sinh \beta \mu \left\langle \left\langle \frac{1}{\cosh \beta \mu + \cosh \beta h} \right\rangle \right\rangle - \beta J Q^2 - \beta J_0 m^2 \quad (3.54)$$

e

$$\nu = 1 + \left\langle \left\langle \frac{\beta \sinh \beta \mu}{\cosh \beta \mu + \cosh \beta h} \right\rangle \right\rangle, \quad (3.55)$$

com $h = [J_0 m + J(\xi + \eta)q]$. O cálculo da média configuracional sugere processos análogos aos expostos nas seções anteriores. O cálculo da susceptibilidade magnética é feito a partir da relação

$$\chi = \lim_{H \rightarrow 0} \left(\frac{\partial m}{\partial H} \right) \quad (3.56)$$

em que m é a magnetização e H um campo magnético externo aplicado que, após tomar o limite termodinâmico, assume-se $H \rightarrow 0$. Em termos do potencial termodinâmico (Ω), a magnetização é dada por

$$m = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial H} \right). \quad (3.57)$$

Assim, a susceptibilidade escrita em termos do potencial termodinâmico fica

$$\chi = \lim_{H \rightarrow 0} \left(\frac{\partial^2 \Omega}{\partial H^2} \right) \quad (3.58)$$

que neste caso é encontrada como

$$\chi = \frac{\beta \langle \langle \Xi(\mu, \bar{h}, \beta) \rangle \rangle}{1 - \beta J_0 \langle \langle \Xi(\mu, \bar{h}, \beta) \rangle \rangle} \quad (3.59)$$

em que

$$\Xi(\mu, \bar{h}, \beta) = \left[\frac{\cosh \beta \bar{h}}{\cosh \beta \mu + \cosh \beta \bar{h}} - \frac{\sinh^2 \beta \bar{h}}{[\cosh \beta \mu + \cosh \beta \bar{h}]^2} \right]. \quad (3.60)$$

Lembrando que K (Eq.(3.37)) agora possui um campo adicional H . Portanto, $K = \cosh(\beta \mu) + \cosh(\beta[h_i + H])$, com h_i definido na equação (3.21).

4 *Resultados*

Neste capítulo serão discutidos os resultados já publicados no artigo (ZIMMER; BERGER; MAGALHAES, 2012) e analisadas as soluções numéricas para as equações dos parâmetros de ordem e das quantidades termodinâmicas do modelo, conforme equações (3.41), (3.42), (3.54) e (3.55). Os principais resultados são apresentados em forma de gráficos que exploram o comportamento dos parâmetros de ordem q e m e da entropia S em função da temperatura T para diversos valores de interação ferromagnética J_0 e potencial químico μ .

Considerando que os parâmetros de ordem são usados para definir as fases magnéticas, segue uma breve caracterização das fases envolvidas no sistema.

Em temperaturas suficientemente baixas, ocorre o surgimento da fase vidro de spin (VS), caracterizada pelo parâmetro de ordem $q > 0$ e uma magnetização $m = 0$. Ou seja, abaixo de uma certa temperatura de transição, chamada T_f (*Temperatura de congelamento*), os spins estão congelados em direções aleatórias e a magnetização é nula.

Quando a magnetização assume valores diferentes de zero ($m > 0$) e o parâmetro de ordem $q = 0$, identifica-se a fase ferromagnética (FE), que é caracterizada pelo ordenamento de seus spins em um mesmo sentido e por uma magnetização espontânea.

No caso em que ambos os parâmetros são iguais a zero, isto é, $q = 0$ e $m = 0$, tem-se a fase paramagnética (PM). Nessa fase, os spins estão orientados aleatoriamente devido a flutuações térmicas e a magnetização só aparece se um campo magnético externo for aplicado.

Como discutido nos capítulos anteriores, este trabalho analisa dois tipos diferentes de desordem temperada que podem gerar frustração nas interações desordenadas de vH: uma dada pela distribuição de probabilidade bimodal (discreta) e outra dada pela distribuição de probabilidade gaussiana (contínua), equações (3.3) e (3.4), respectivamente.

Na utilização da distribuição bimodal, uma outra fase pode ser observada no diagrama

de fases da temperatura T pelo acoplamento ferromagnético J_0/J . É a fase mista, em que os parâmetros de ordem VS e magnetização são diferentes de zero. Ou seja, $q \neq 0$ e $m \neq 0$ para baixas temperaturas e valores intermediários de J_0/J .

Cada uma dessas distribuições proporciona resultados particulares, que serão discutidos em detalhes nas seções 4.1 e 4.2.

4.1 Resultados obtidos para a distribuição bimodal

Na utilização desta distribuição de probabilidade, em que as variáveis ξ e η podem assumir valores 1 e -1, é possível calcular analiticamente a média sobre a desordem e obter resultados para as equações termodinâmicas do sistema, conforme as equações (3.54) e (3.55), além dos resultados obtidos numericamente para os parâmetros de ordem q e m . A seguir, são apresentados os gráficos desses parâmetros de ordem pela temperatura na qual o potencial químico $\mu = 0$, o que corresponde à ocupação média de um férmion por sítio, para dois valores de J_0/J .

A Figura (4.1(a)), para $J_0/J = 0$, exibe uma fase paramagnética (PM) em altas temperaturas e, nessa região, os parâmetros de ordem q e m são nulos. Ao diminuir a temperatura, ocorre uma transição de fase em que o parâmetro de ordem q assume valores diferentes de zero e $m = 0$, caracterizando uma fase vidro de spin (VS).

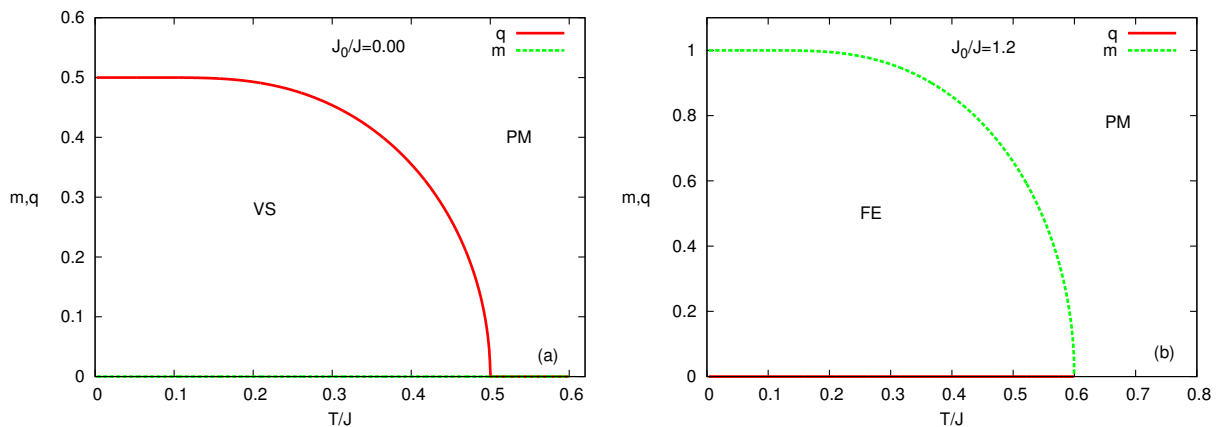


Figura 4.1: Comportamento dos parâmetros de ordem q e m em função da temperatura T/J para dois valores diferentes de J_0/J : (a) $J_0 = 0.0$ e (b) $J_0/J = 1.2$. Em ambos os casos, $\mu/J = 0$.

Já para $J_0/J = 1.2$ (Figura (4.1(b))), a fase paramagnética ainda aparece em altas temperaturas, mas agora, para temperaturas mais baixas, a magnetização $m \neq 0$ e o parâmetro de ordem $q = 0$, o que significa que o aumento de J_0 favorece a fase ferromagnética (FE).

Para valores intermediários de J_0/J , e temperaturas mais baixas, há o surgimento de uma fase mista, em que tanto o parâmetro de ordem vidro de spin quanto a magnetização são diferentes de zero. Tal fase pode ser vista no gráfico da Figura (4.2).

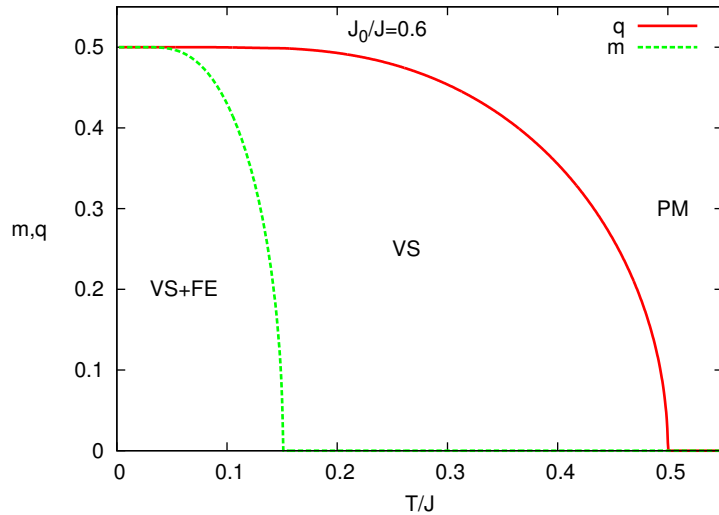


Figura 4.2: Parâmetros de ordem q e m versus T/J para $J_0/J = 0.6$. Há o surgimento de uma fase em que q e m são diferentes de zero, chamada fase mista, considerando que $\mu/J = 0$.

A análise das transições de fases pode ser melhor entendida com auxílio de diagramas de fases construídos a partir do comportamento dos parâmetros de ordem (ver Figuras (4.1 (a) e (b)) e (4.2)). Para tal, mostra-se a Figura (4.3), que apresenta um diagrama de fases da temperatura como uma função do acoplamento ferromagnético médio J_0 quando $\mu/J = 0$. Ao reduzir a temperatura, a fase PM sofre uma transição de segunda ordem para a fase VS se J_0/J for pequeno, ou para a fase FE se J_0/J for alto. Para temperaturas ainda mais baixas, e valores intermediários de J_0/J , há o surgimento da fase mista. Além disso, a fase VS sofre uma transição de primeira ordem para a fase FE, a partir de um certo valor de J_0/J . Por isso é necessário analisar o gráfico do potencial termodinâmico Ω como função da temperatura T para localizar a solução de menor Ω , como exibido na Figura (4.4). Nota-se que, em baixas temperaturas, a fase FE apresenta a menor curva de potencial termodinâmico.

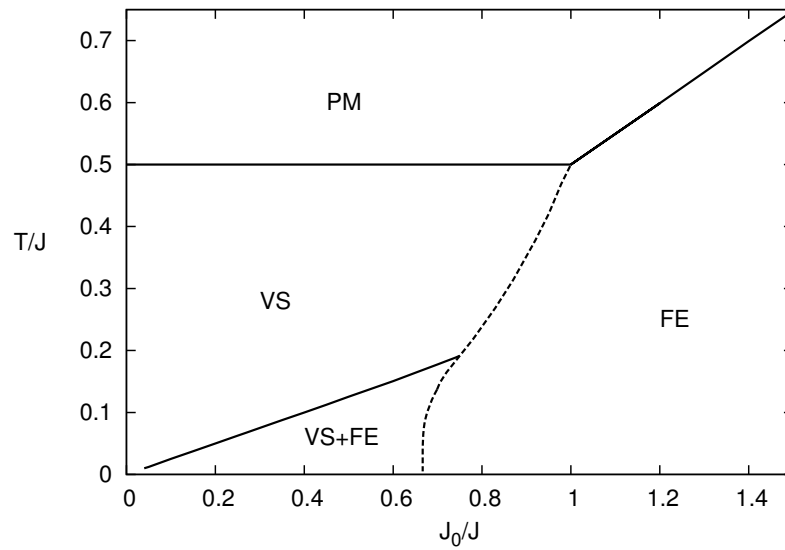


Figura 4.3: Diagrama de fases T/J versus J_0/J quando $\mu/J = 0$. As linhas cheias representam as transições de segunda ordem e as tracejadas as transições de primeira ordem.

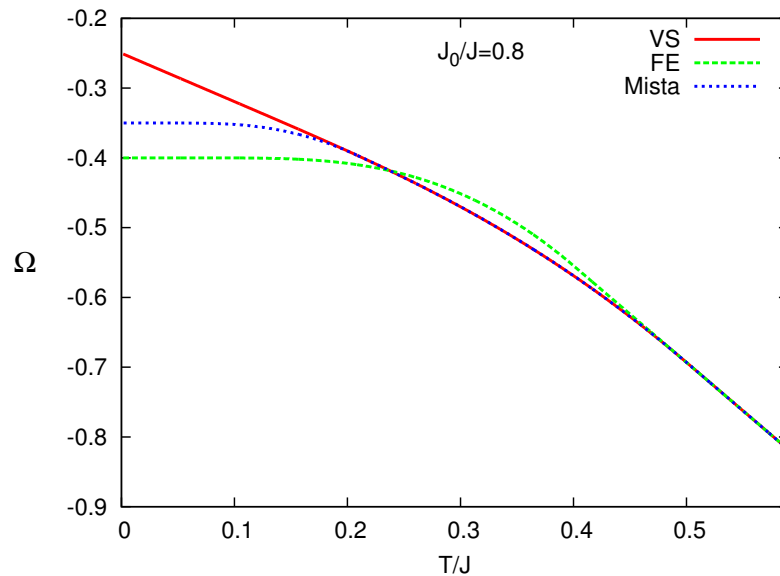


Figura 4.4: Gráfico do potencial termodinâmico em função da temperatura para $J_0/J = 0.8$ que representa a transição de primeira ordem entre as fases VS e FE. Assume-se que $\mu/J = 0$.

É importante salientar que os resultados apresentados na Figura (4.3) estão de acordo com os resultados obtidos na referência (ZIMMER; BERGER; MAGALHAES, 2012) e possui um comportamento qualitativo semelhante ao da referência (HEMMEN, 1982; HEMMEN; ENTER; CANISIUS, 1983).

Após analisar os efeitos do J_0/J sobre a competição entre as fase VS e FE, pretende-se analisar os efeitos do potencial químico sobre o problema, que por sua vez, controla a

ocupação média de férmions por sítio. Na Figura (4.5) são introduzidos valores para o μ/J , e um diagrama de fases $T/J \times \mu/J$ é exibido para $J_0/J = 0$.

A fase paramagnética é predominante em altas temperaturas e, conforme o valor do potencial químico aumenta, a transição de segunda ordem PM/VS é reduzida até um ponto tricrítico, em que passa a ocorrer uma transição de primeira ordem. Esse fato está relacionado às flutuações de carga, que são introduzidas ao problema através do μ , causando mudanças nas fronteiras das fases PM/VS e suprimindo as fases magnéticas.

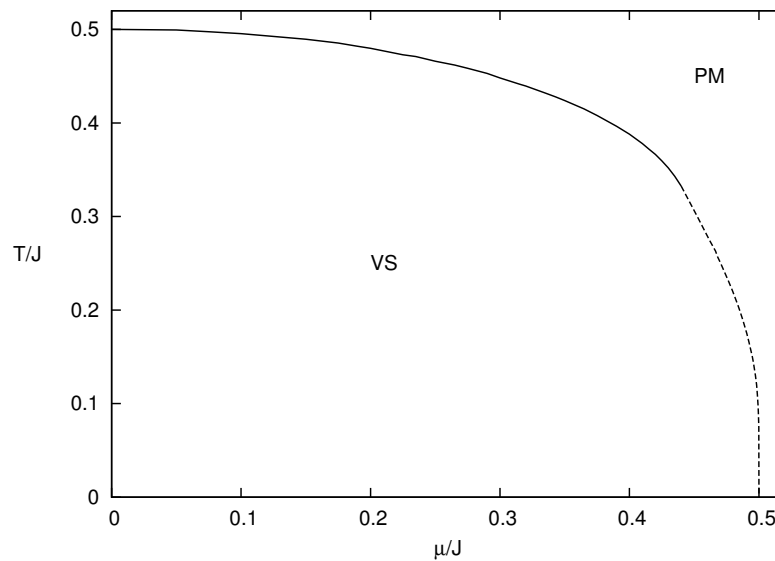


Figura 4.5: Diagrama de fases T/J versus μ/J quando $J_0/J = 0$. A linha cheia representa a transição de segunda ordem e a transição de primeira ordem é representada pela linha tracejada.

Portanto, as transições de segunda ordem são localizadas com o auxílio dos gráficos dos parâmetros de ordem pela temperatura, em que se fixa μ e se varia T e da expansão de Landau, exposta com mais detalhes no Apêndice A. Já as linhas de transições de primeira ordem são obtidas fixando a temperatura e variando o potencial químico, observadas em gráficos do Ω pelo μ , que permite escolher a solução de menor potencial termodinâmico, como mostra a Figura (4.6).

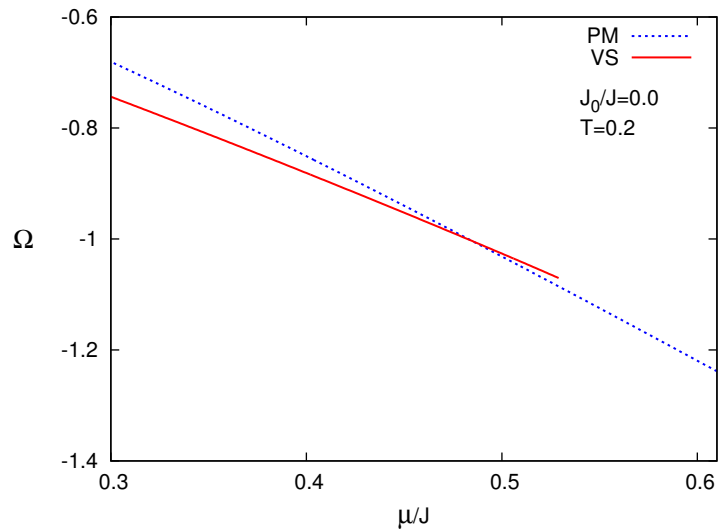


Figura 4.6: Gráfico do potencial termodinâmico versus o potencial químico para o valor de $J_0 = 0.0$ e $T = 0.2$. A transição de primeira ordem entre as fases PM e VS ocorre aproximadamente em $\mu = 0.485$.

Quando J_0/J assume valores maiores, como no caso de $J_0/J = 0.9$ da Figura (4.7), as transições entre as fases PM/VS apresentam os mesmos comportamentos de quando $J_0/J = 0$, com a diferença de que agora a fase ferromagnética se faz presente e, a baixas temperaturas, a transição de primeira ordem VS/FE é aos poucos suprimida pelo aumento do μ/J . Percebe-se, também, que o aumento do μ/J suprime completamente a fase FE, enquanto que a fase VS é preservada.

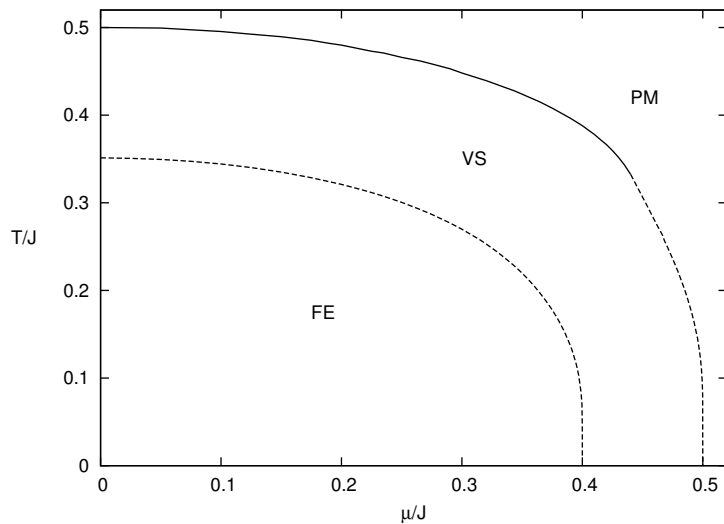


Figura 4.7: Diagrama de fases T/J versus μ/J quando $J_0/J = 0.9$. As transições de segunda ordem são representadas pelas linhas cheias do diagrama e as transições de primeira ordem, pelas linhas tracejadas.

4.2 Resultados obtidos para a distribuição gaussiana

Diferente da distribuição de probabilidade bimodal discreta, a distribuição de probabilidade gaussiana é contínua, e as variáveis ξ e η podem assumir valores no intervalo $]-\infty, +\infty[$, e são infinitas as configurações para o produto $\xi_i \eta_i$. Esse fato dificulta a obtenção de resultados analíticos para as médias sobre a desordem e, portanto, é necessário fazer uso de cálculos numéricos (soluções de equações integrais) para se obterem resultados para as equações do potencial termodinâmico, dos parâmetros de ordem vidro de spin e magnetização, (3.50), (3.51), (3.52), respectivamente.

O comportamento dos parâmetros de ordem como função da temperatura para $J_0/J = 0$ e $J_0/J = 1.2$ são apresentados nas Figuras (4.8(a)) e (4.8(b)), respectivamente. Em altas temperaturas, tanto para $J_0/J = 0$ quanto para $J_0/J = 1.2$, predomina a fase paramagnética (PM), em que os parâmetros de ordem q e m são nulos. Diminuindo a temperatura, a fase PM sofre uma transição para a fase VS ($q \neq 0$ e $m = 0$) quando $J_0/J = 0$ (Figura (4.8 a)). Na Figura (4.8 b), $J_0/J = 1.2$ e os parâmetros $m \neq 0$ e $q = 0$, ou seja, ao reduzir a temperatura, a fase PM sofre uma transição para a fase FE.

Observa-se que as temperaturas em que q deixa de ser zero e $m > 0$ são praticamente idênticas às da distribuição discreta (ver discussão do Apêndice A). Isso porque, particularmente, a localização das linhas de transição de segunda ordem entre as fases PM/VS e PM/FE, bem como as propriedades termodinâmicas das fases PM e FE, são independentes da distribuição de probabilidades utilizada. Porém, as propriedades da fase VS são bastante dependentes da desordem, conforme discutido anteriormente no capítulo 2.

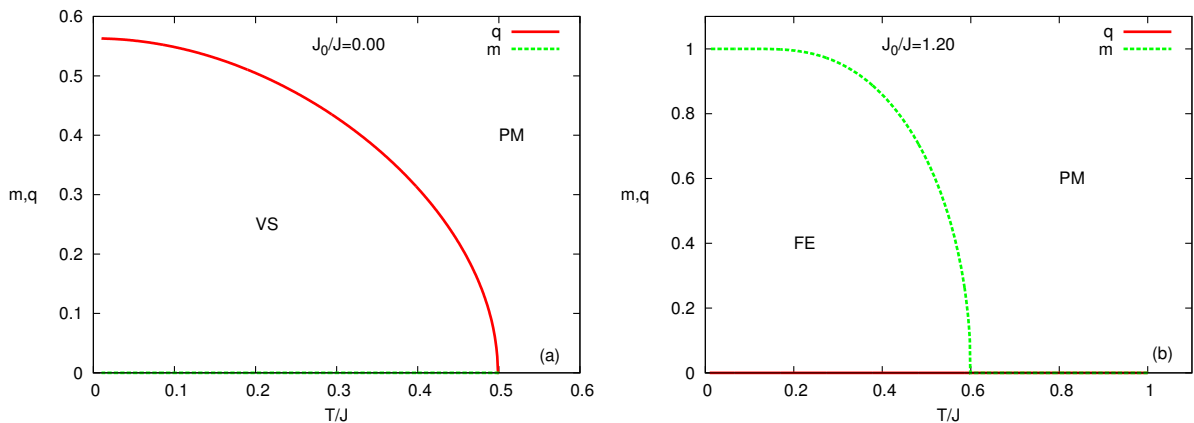


Figura 4.8: Comportamento dos parâmetros de ordem q e m em função da temperatura T/J para $\mu/J = 0$. a) $J_0/J = 0.0$ e b) $J_0/J = 1.2$.

Para valores intermediários de J_0/J , como no caso da Figura (4.9(a)), em que o valor

usado para a interação ferromagnética J_0/J foi de 0.75, e potencial químico $\mu/J = 0$, observa-se que, a altas temperaturas, a fase paramagnética é predominante e, para baixas temperaturas, ocorre uma transição para a fase VS. Mas para temperaturas ainda mais baixas, q volta a ser zero e $m > 0$, e o sistema sofre uma transição para a fase ferromagnética. Em $T/J = 0.2$, há uma região de descontinuidade nos parâmetros de ordem entre as fases, sugerindo que o sistema apresenta uma transição de fase de primeira ordem e, portanto, é preciso analisar o gráfico do potencial termodinâmico para localizar a temperatura de transição com um valor fixo de J_0/J e $\mu/J = 0$ (ver Fig.4.9(b)).

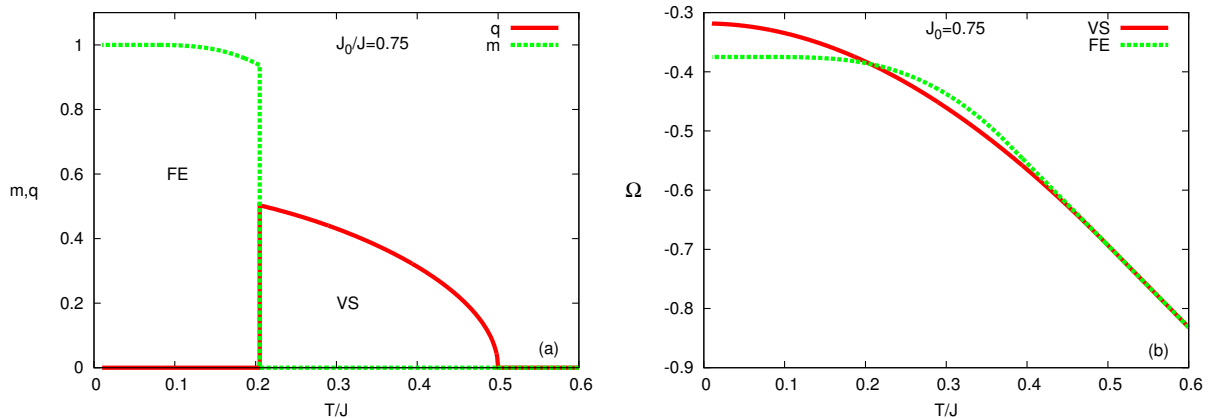


Figura 4.9: $J_0/J = 0.75$ e $\mu/J = 0.0$: a) parâmetros de ordem como função da temperatura e b) potencial termodinâmico em função da temperatura.

A construção de diagramas de fases com base no comportamento dos parâmetros de ordem facilita a compreensão e a análise das transições de fases. A Figura (4.10) exibe um diagrama de fases da temperatura como função de J_0/J (acoplamento ferromagnético) quando $\mu/J = 0$. Observa-se que, em altas temperaturas, a fase paramagnética é encontrada. Reduzindo-se a temperatura, a fase PM sofre uma transição de segunda ordem para a fase VS se J_0/J for pequeno e, para a fase FE, se J_0/J for alto, semelhante ao caso da distribuição discreta. Com o aumento do J_0/J , a fase VS sofre uma transição de primeira ordem para a fase FE. Entretanto, a fase mista é inexistente quando se usa essa distribuição. Isto pode estar relacionado ao fato de que a quantidade de interações frustradas geradas pela desordem na distribuição contínua ser maior que a quantidade de interações frustradas geradas pela distribuição discreta para um pequeno valor de J_0/J .

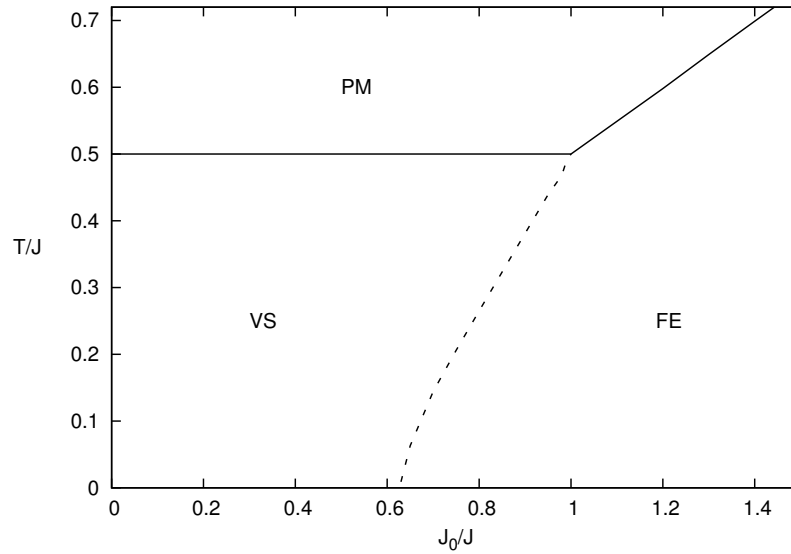


Figura 4.10: Diagrama de fases T/J versus J_0/J quando $\mu/J = 0$. As linhas cheias e tracejadas representam as transições de segunda e primeira ordem, respectivamente.

Quando se acrescenta o potencial químico μ ao problema, há uma diminuição da temperatura de transição entre fases magnéticas envolvidas no sistema. Por exemplo, comparando-se os gráficos da Figura (4.11) onde $\mu/J = 0.35$ com os da Figura (4.8) em que $\mu/J = 0$, observa-se que as transições de segunda ordem entre as fases PM e VS e entre as fases PM e FE ocorrem em temperaturas mais baixas.

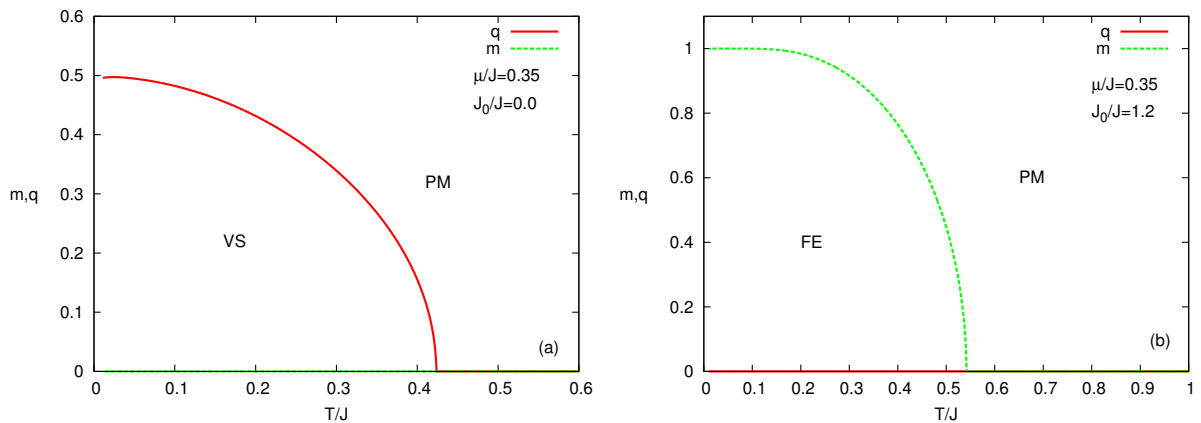


Figura 4.11: Comportamento dos parâmetros de ordem em função da temperatura para potencial químico $\mu/J = 0.35$ para dois valores de J_0 : (a) $J_0/J = 0.0$ e (b) $J_0/J = 0.75$.

Este comportamento de queda da temperatura de transição, devido aos efeitos do μ , fica mais evidente em um diagrama de fases $T/J \times \mu/J$, como o da Figura (4.12), que mostra que a transição de segunda ordem entre as fases PM e VS decresce com o aumento do potencial químico μ . O μ faz com que a temperatura crítica se reduza até um ponto

tricrítico, semelhante ao que ocorre na distribuição bimodal. Observa-se também que, para um determinado valor de μ/J , a fase VS é obtida pelo aumento da temperatura a partir da fase PM. Essa região de transição de primeira ordem PM/VS exibe uma transição reentrante, que está associada com congelamento inverso.

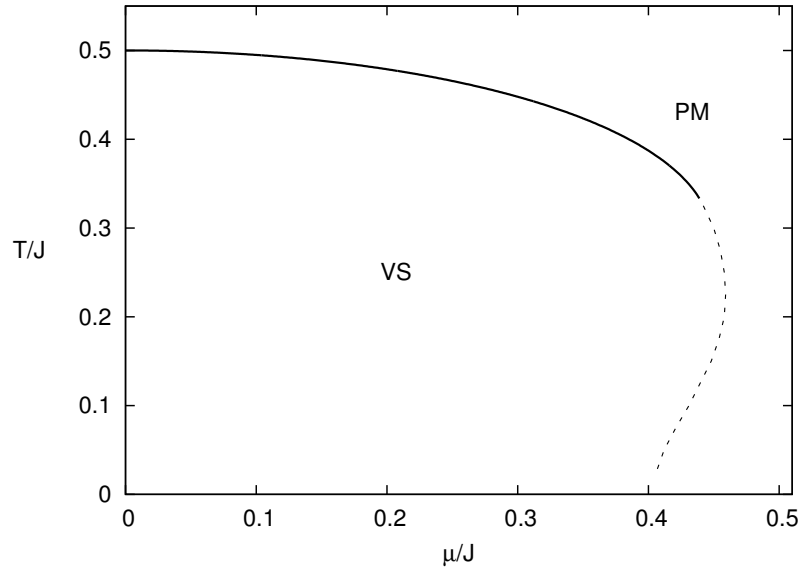


Figura 4.12: Diagrama de fases da T/J pelo μ/J para $J_0/J = 0.00$. A transição de primeira ordem PM/VS apresenta uma reentrância em $\mu/J = 0.43$, que está associada ao congelamento inverso.

Nesse caso particular, a transição reentrante é uma transição reversível, ou seja, o sistema pode retornar ao seu estado original através da reversão do processo que ocasionou a mudança de estado. Portanto, se aumentar a temperatura a partir de uma fase desordenada obtém-se uma fase ordenada, esse processo pode voltar ao seu estado inicial se a temperatura for reduzida.

Para comprovar a existência do congelamento inverso, é preciso analisar o comportamento da entropia do sistema. A Figura (4.13) apresenta um gráfico da entropia S como uma função da temperatura na região reentrante com $\mu/J = 0.43$ quando $J_0/J = 0.0$ (ver Figura (4.12)). Para $T/J > 0.35$ observa-se uma fase PM de maior entropia, que sofre uma transição de segunda ordem para a fase VS em $T/J = 0.35$. Já para o intervalo $0.1 < T/J < 0.35$, somente uma fase VS é encontrada, e para $T/J < 0.1$ novamente surge uma fase PM. No caso de $T/J = 0.1$, onde há uma transição de primeira ordem da fase VS para a fase PM, observa-se que a entropia da fase VS é maior que a da fase PM, demonstrando o surgimento de uma transição inversa. Isto é, há uma inversão no conteúdo entrópico das fases envolvidas no sistema.

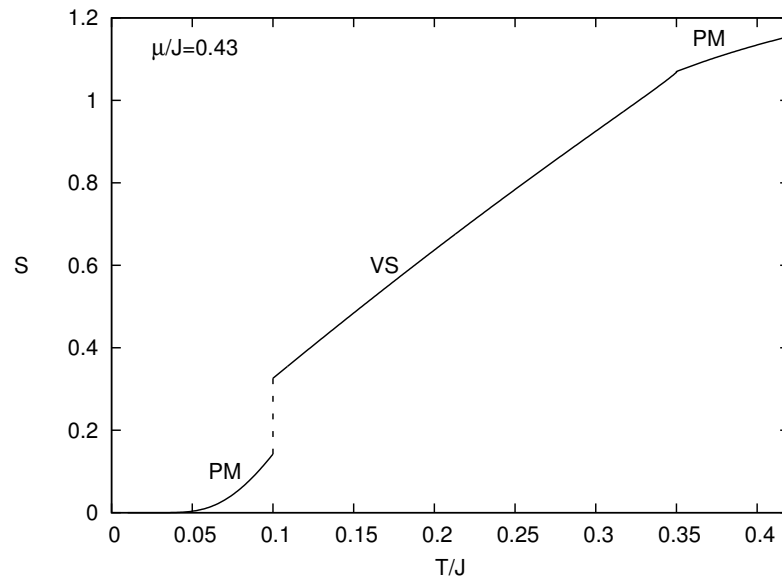


Figura 4.13: Entropia como função da temperatura com $J_0/J = 0.0$ e $\mu/J = 0.43$.

No ensemble grande canônico, o potencial químico desempenha o mesmo papel para o número de ocupação que a temperatura desempenha para a energia no ensemble canônico. Ou seja, pode-se estabelecer um valor médio para o número de férmions no sistema a partir de um potencial químico fixo da mesma forma que a energia média pode ser estabelecida a partir de uma temperatura fixa no ensemble canônico, isto é, o potencial químico controla a ocupação média dos sítios, de forma que, nesse modelo fermiônico, os estados podem ocorrer com zero, um ou dois férmions por sítio.

A Figura (4.14 a) apresenta o número de ocupação ν Eq. (3.55) como uma função da temperatura para diversos valores de potencial químico μ . Para $\mu/J = 0.0$, a ocupação média de férmions por sítio é igual a 1, porém, para $\mu/J = 0.2, 0.4$ e 0.6 há um aumento no número de ocupação dos sítios. Em outras palavras, o aumento do μ favorece o aumento da ocupação média dos sítios. É importante salientar que a ocupação média para $\mu/J > 0$ também é dependente da temperatura, o que se pode observar nas linhas de $\mu/J = 0.2$ e 0.4 , que mostram que ν na fase VS é fracamente dependente da temperatura, enquanto que na fase PM depende de T , pois ν apresenta um certo comportamento na fase PM e outro na fase VS. Outro fato importante é que, para um alto valor de μ/J , o número de ocupação média $\nu \rightarrow 2$ quando $T \rightarrow 0$, podendo levar a uma fase PM em baixas temperaturas com $m = 0$ e momento magnético por sítio muito próximo de zero. É o que acontece também no caso de $\mu/J = 0.43$, que exibe a região de transição associada com o congelamento inverso, como mostra a Figura (4.14 b). Neste gráfico, observa-se uma mudança no comportamento do ν em baixas temperaturas quando entra na fase VS.

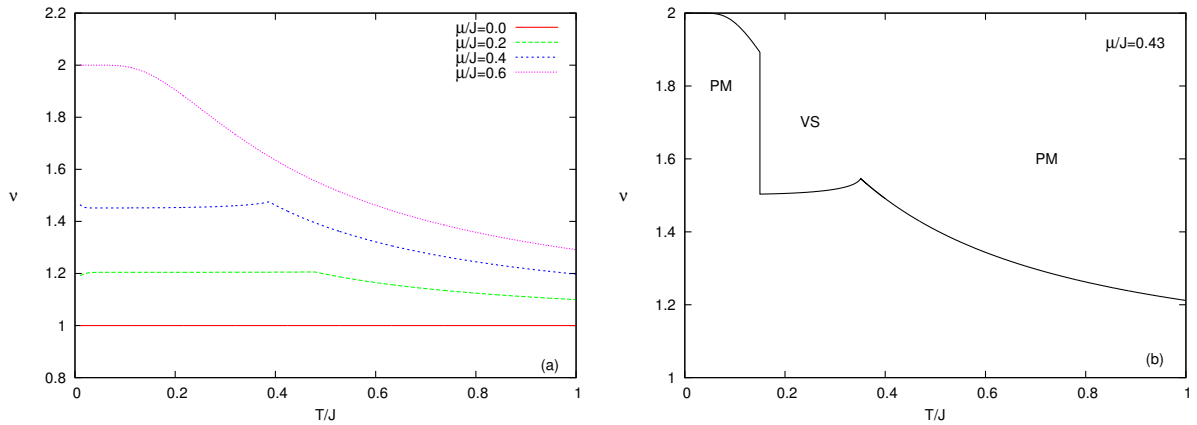


Figura 4.14: (a) Número de ocupação v como função da temperatura T/J para diversos valores de potencial químico μ/J e $J_0 = 0.0$. (b) v versus T na região em que ocorre o congelamento inverso, com $\mu/J = 0.43$.

O comportamento do número de ocupação média por sítio é agora analisado em função de μ para dois valores de temperatura, $T/J = 0.1$ e $T/J = 0.2$, e os resultados são apresentados na Figura (4.15). Em baixas temperaturas ($T/J = 0.1$), o gráfico exibe um congelamento inverso na região onde a fase PM apresenta maior valor de v . O μ favorece a diluição magnética, e nesse caso, a dupla ocupação torna-se dominante na fase PM de baixa temperatura, o que pode explicar o seu baixo valor entrópico. Além disso, o aumento da temperatura reduz o número de ocupação, principalmente da fase PM, como discutido acima.

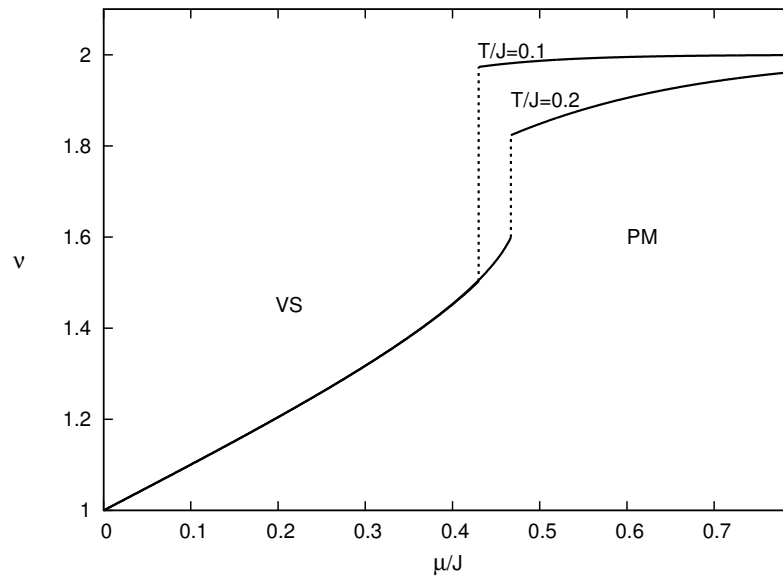


Figura 4.15: Comportamento do número de ocupação média por sítio v em função do potencial químico μ/J para duas isothermas, $T/J = 0.1$ e $T/J = 0.2$ e $J_0/J = 0.0$.

Conforme já citado anteriormente (Figura 4.10), o aumento de J_0/J favorece a fase

FE. Então para $J_0/J > 0$ pode-se analisar os efeitos do μ sobre a fase FE. Por exemplo, em valores intermediários de J_0/J o aumento do μ/J destrói as fases magnéticas, como pode ser visto na Figura (4.16). Este diagrama ainda exibe uma transição reentrante entre as fases PM e VS em um certo intervalo de μ/J , e para temperaturas mais baixas, apresenta uma transição de primeira ordem entre as fases VS e FE.

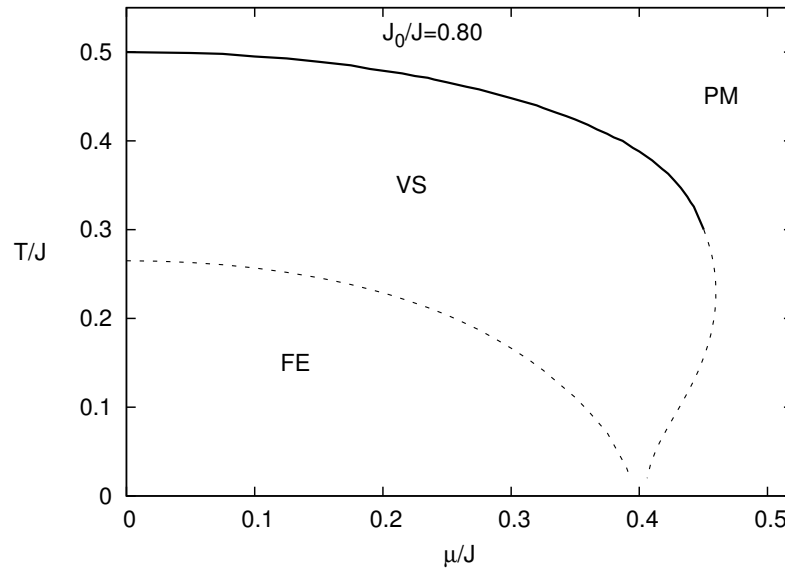


Figura 4.16: Diagrama de fases da temperatura como uma função do potencial químico, para $J_0/J = 0.80$. Linhas cheias e tracejadas representam transições de segunda e primeira ordem, respectivamente.

No diagrama seguinte, em que $J_0/J = 0.9$, aparece um ponto triplo, ou seja, em um determinado valor de μ , as três fases PM, VS e FE se encontram. Particularmente, esse ponto triplo é obtido quando o potencial termodinâmico Ω das fases PM, VS e FE assumem o mesmo valor. Além disso, há uma transição de fase de primeira ordem entre as fases VS e FE, e uma descontinuidade na transição entre as fases FE e PM, mas sem apresentar reentrância.

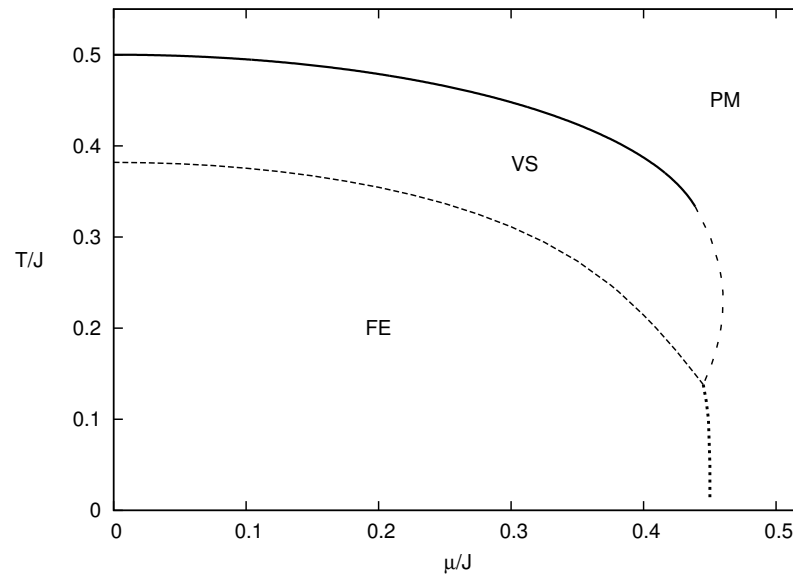


Figura 4.17: Diagrama de fases da temperatura como uma função do potencial químico, para $J_0/J = 0.90$. Linhas cheias representam transições de segunda ordem e as linhas tracejadas as de primeira ordem.

Comparando o diagrama acima (Figura (4.17)) com o da Figura (4.7) para o mesmo valor de J_0/J , percebe-se que, na distribuição bimodal, a fase FE é suprimida antes da fase VS, conforme o potencial químico μ aumenta. Além disso, para um valor mais elevado de J_0/J , como no caso de $J_0/J = 1.2$ da Figura (4.18), observa-se que a fase VS é completamente suprimida, devido ao alto valor da interação ferromagnética. Nesse caso, há uma transição de segunda ordem entre as fases PM e FM em altas temperaturas. Com o aumento do potencial químico ao mesmo tempo em que a temperatura é reduzida, a fase PM sofre uma transição de primeira ordem para a fase FE, mas sem apresentar reentrância. Desse modo, para um valor suficientemente grande de J_0/J , em que só ocorrem transições entre as fases PM e FE e a fase VS é inexistente, não há o surgimento de congelamento inverso.

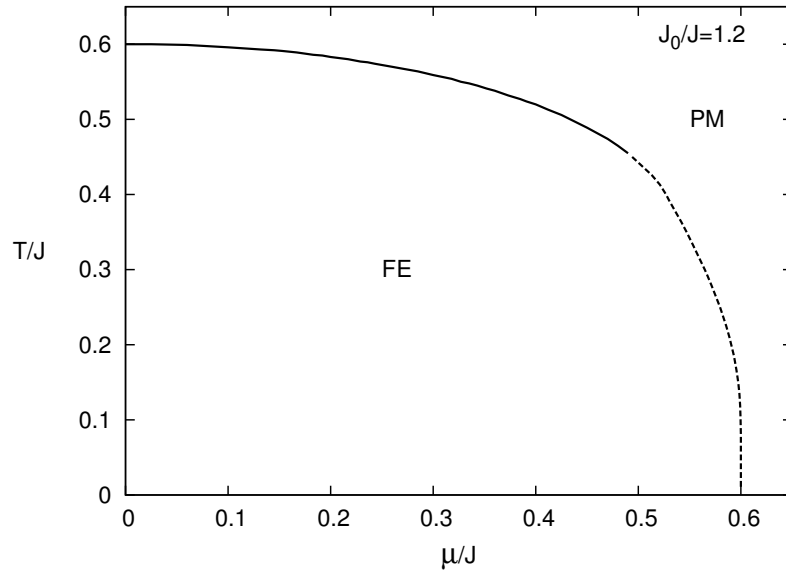


Figura 4.18: Diagrama de fases da temperatura como uma função do potencial químico para $J_0/J = 1.2$. As transições de primeira e segunda ordem são representadas pelas linhas tracejadas e contínuas, respectivamente.

4.3 Comparativo entre os principais resultados obtidos nas distribuições de probabilidades utilizadas

Comparando-se os resultados obtidos para as duas distribuições de probabilidades utilizadas no problema, pode-se afirmar que a existência de congelamento inverso no modelo se dá através de resultados obtidos com o uso das interações desordenadas da distribuição gaussiana. Quando a distribuição bimodal é adotada, uma fase mista (VS+FE) pode ser encontrada abaixo da fase VS para baixas temperaturas, o que não acontece quando se utiliza a distribuição gaussiana.

As transições de fases foram estudadas com a possibilidade de mudança da ocupação média de férmions nos sítios, reguladas pelo potencial químico μ , que controla as flutuações de carga diminuindo as temperaturas de transição até um ponto tricrítico. Em outras palavras, o aumento do potencial químico suprime as fases magnéticas, pois favorece a dupla ocupação dos sítios causando a diluição magnética.

A localização das linhas de transição de segunda ordem entre as fases PM e VS e entre as fases PM e FE são independentes da distribuição de probabilidades utilizada. Porém, as transições de primeira ordem entre as fases PM e VS e entre as fases VS e FE dependem fortemente de uma desordem particular. Nesse caso, há uma diferença importante na localização da transição de primeira ordem entre as fases PM e VS, pois pode apresentar

uma transição reentrante que está associada com o congelamento inverso. Portanto, a transição de primeira ordem entre as fases PM e VS, em um determinado intervalo de μ , apresenta um congelamento inverso quando a distribuição gaussiana é adotada, e esse comportamento não é encontrado quando se utiliza a distribuição bimodal.

Em ambas distribuições, o aumento de J_0/J , que favorece a fase ferromagnética, também pode introduzir uma transição descontínua entre as fases PM e FE, mas sem apresentar reentrância, e assim, sem apresentar congelamento inverso.

5 *Considerações Finais*

Neste trabalho, o fenômeno das transições inversas foi estudado através da adoção de uma formulação fermiônica para o modelo vidro de spin (VS) de van Hemmen. Essa versão fermiônica considera operadores de spin escritos em segunda quantização como uma combinação bilinear dos operadores fermiônicos de criação e destruição. O tratamento do problema segue com a função de partição escrita em termos dos campos de Grassmann, em que através do formalismo das integrais de caminho fermiônicas, uma solução de campo médio é obtida sem utilizar o método das réplicas. O potencial químico foi inserido ao problema com a função de controlar a ocupação média dos sítios, introduzindo flutuações de carga e causando a diluição magnética, que neste trabalho significa o favorecimento dos estados com spin $S = 0$ (não interagentes).

Os resultados foram então analisados em gráficos que mostram o comportamento dos parâmetros de ordem vidro de spin (q) e magnetização (m), da entropia e ocupação média. Além disso, diagramas de fases da temperatura T em função do potencial químico μ e da temperatura como função do acoplamento ferromagnético médio J_0 também foram analisados e, a partir desses diagramas, pode-se observar que a fase VS é encontrada para baixos valores de J_0/J , enquanto que a fase ferromagnética (FE) é dominante para J_0/J altos. Em particular, o potencial grande canônico foi analisado para duas interações desordenadas distintas: uma dada pela distribuição bimodal e a outra dada pela distribuição gaussiana. Cada uma delas apresenta resultados peculiares, que foram analisados separadamente.

Na utilização da distribuição bimodal, uma fase mista (VS+FE) é encontrada abaixo da fase VS em baixas temperaturas. Porém, essa mesma fase não é obtida na distribuição gaussiana. Vale salientar que a fase VS não aparece em temperaturas suficientemente baixas na distribuição bimodal, mas é observada para essa mesma região na distribuição gaussiana. Esse fato pode estar relacionado à quantidade de interações frustradas geradas pela desordem obtida com a distribuição gaussiana, que pode ser maior que a desordem obtida com a distribuição bimodal para um pequeno valor de J_0 .

De fato, a localização das linhas de transição de segunda ordem entre as fases PM/VS e entre as fases PM/FE, bem como as propriedades termodinâmicas das fases PM e FE são independentes da distribuição de probabilidades adotada. Porém, a fase VS é fortemente dependente da desordem e por isso a transição de primeira ordem entre as fases PM/VS depende de uma desordem particular, podendo apresentar reentrância na distribuição gaussiana. Nesse caso, quando se analisa a entropia em função da temperatura observa-se que, na região de reentrância, a fase PM apresenta entropia menor do que a fase VS, pois a desordem que gera frustração aumenta a entropia da fase ordenada VS, e o potencial químico μ pode aumentar o número de estados com $S = 0$, que gera uma fase PM de baixa entropia. Isso indica que o modelo VS fermiônico de van Hemmen também é capaz de exibir congelamento inverso sem a necessidade de se adicionar qualquer parâmetro de degenerescência, comprovando sua validade para o estudo de transições inversas.

Em outras palavras, quando se utiliza a distribuição gaussiana, uma transição inversa do tipo congelamento inverso é encontrada na transição de primeira ordem entre as fases PM/VS para um determinado valor de potencial químico e esse fato não foi observado com o uso da distribuição bimodal. É importante apontar que a desordem no modelo aqui analisado foi tratada sem as complicações oriundas do método das réplicas.

Os resultados mostram que o complexo cenário da energia livre não é uma condição necessária para que determinado modelo apresente transição inversa, como sugerido por modelos que seguem interações desordenadas do tipo SK, uma vez que o modelo de van Hemmen fermiônico não apresenta essa representação da energia livre e se mostrou capaz de gerar espontaneamente uma transição do tipo congelamento inverso. Com o modelo VS fermiônico de van Hemmen pode-se dizer que a presença de frustração (característica de modelos VS) e diluição magnética (favorecimento dos estados não interagentes) mostram-se como condições básicas para o aparecimento de congelamento inverso.

Como perspectivas futuras, pretende-se estudar a desordem de van Hemmen em um modelo de spin 1 semelhante ao modelo GS, pelo fato de que a desordem vH não necessita de réplicas para seu tratamento.

APÊNDICE A -- Expansão de Landau para potencial termodinâmico

A teoria de Landau para transições de fases contínuas, baseia-se na introdução do conceito de parâmetro de ordem e no estabelecimento de uma expansão de energia livre em termos dos invariantes dessa grandeza (SALINAS, 1997). No presente trabalho, usa-se a expansão de Landau para obter-se as temperaturas críticas expandindo o potencial termodinâmico, Eq.(3.36), em termos dos parâmetros de ordem q e m , o que resulta na seguinte expressão:

$$\beta\Omega = a_0 + a_2q^2 + a_4q^4 + b_2m^2 + b_4m^4 \quad (\text{A.1})$$

em que

$$a_0 = -\beta\mu - \ln 2(K_0). \quad (\text{A.2})$$

$$a_2 = \frac{\partial^2 \beta\Omega}{\partial q^2} = \frac{1}{2!} \left[2\beta J - \left\langle \left\langle \frac{\beta^2 J^2 (\xi + \eta) \cosh h}{K} - \frac{\beta J (\xi + \eta) \sinh^2 h}{K} \right\rangle \right\rangle_{q=0, m=0} \right] \quad (\text{A.3})$$

$$a_2 = \beta J - \frac{\beta^2 J^2}{2} \frac{1}{K_0} \langle \langle (\xi + \eta)^2 \rangle \rangle, \quad (\text{A.4})$$

com $K(\xi, \eta) = \cosh(\beta\mu) + \cosh(\beta h)$, $h = J_0 m + J(\xi + \eta)q$ e $K_0 = \cosh(\beta\mu) + 1$, e ainda,

$$a_4 = \frac{\partial^4 \beta\Omega}{\partial q^4} = \frac{1}{4!} \left[-\beta^4 J^4 \left(-\frac{1}{K_0} - \frac{3}{K_0} \right) \right] \langle \langle (\xi + \eta)^4 \rangle \rangle. \quad (\text{A.5})$$

Da mesma forma,

$$b_2 = \frac{\partial^2 \beta\Omega}{\partial m^2} = \frac{1}{2!} \left[\beta J_0 - \frac{\beta^2 J_0^2}{K_0} \right], \quad (\text{A.6})$$

$$b_4 = \frac{\partial^4 \beta\Omega}{\partial m^4} = \frac{1}{4!} \left[-\beta^4 J^4 \left(\frac{1}{K_0} - \frac{3}{K_0} \right) \right]. \quad (\text{A.7})$$

Calculando a média sobre as desordens, obtém-se para ambas distribuições utilizadas

$$a_2 = \beta J - \frac{\beta^2 J^2}{\cosh(\beta\mu) + 1} \quad (\text{A.8})$$

$$b_2 = \frac{1}{2} \left[\beta J - \frac{\beta^2 J_0^2}{\cosh(\beta \mu) + 1} \right]. \quad (\text{A.9})$$

Portanto, através dos valores obtidos nas equações acima, a equação do potencial termodinâmico (A.1) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\beta \Omega = a_0 + a_2 q^2 + \frac{x \beta^4 J^4 A}{K_0} q^4 + b_2 m^4 + \frac{\beta^4 J_0^4 A}{8K_0} m^4, \quad (\text{A.10})$$

com

$$A = \frac{1}{4!} \left[\left(1 - \frac{3}{K_0} \right) \right] \quad (\text{A.11})$$

e $x = 1$ para distribuição bimodal e $x = 3/2$ para distribuição gaussiana. Neste caso, o ponto tricrítico é o mesmo para ambas distribuições pois A independe do tipo de distribuição adotada.

A transição de segunda ordem entre as fases PM e VS é obtida quando $a_2 = 0$ e $A > 0$. Já a transição de segunda ordem entre as fases PM e FE ocorre quando $b_2 = 0$ e $A > 0$. Os pontos tricríticos ocorrem quando $a_2 = 0$ e $A = 0$ (transição entre as fases PM e VS) ou quando $b_2 = 0$ e $A = 0$ (transição entre as fases PM e FE). Como a_2 é idêntico para ambas distribuições, a localização da transição de segunda ordem é independente do tipo de distribuição utilizada, da mesma forma que a transição de segunda ordem entre as fases PM e FE, em que $b_2 = 0$, é igual para ambas. A linha PM/VS pode ser obtida a partir da relação $\mu/J = T/J \cosh^{-1}(T/J - 1)$, em que se considera que o ponto tricrítico foi encontrado com valor igual a $1/3$.

APÊNDICE B -- Integrais de Caminho Fermiônicas

Como um complemento ao formalismo Lagrangeano utilizado nesta dissertação, este apêndice trás mais detalhadamente os procedimentos realizados no cálculo das integrais de caminho fermiônicas, com base na referência (NEGELE; ORLAND, 1988). Para uma melhor compreensão das integrais de caminho fermiônicas é importante definir, primeiramente, o que são estados coerentes. Estados coerentes são autoestados dos operadores de destruição, e devido às propriedades de anticomutação desses operadores, é conveniente utilizar números que também possuam essas propriedades, isto é, números que anticomutam. Esses números são chamados de variáveis de Grassmann e podem ser relacionadas aos operadores de criação e destruição na seguinte forma:

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

onde ϕ_{α}^* e ϕ_{α} são geradores da álgebra de Grassmann associados aos operadores de criação c_{α}^{\dagger} e destruição c_{α} , respectivamente. Após definir as variáveis de Grassmann, é possível definir o espaço generalizado de Fock como sendo o conjunto de combinações lineares dos estados do espaço de Fock com coeficientes na álgebra de Grassmann. Qualquer vetor $|\psi\rangle$ no espaço generalizado de Fock pode ser escrito na forma

$$|\psi\rangle = \chi_{\alpha} |\phi\rangle, \quad (\text{B.2})$$

em que χ_{α} representam variáveis de Grassmann e $|\phi\rangle$ vetores do espaço de Fock.

A relação de clausura permite expandir qualquer vetor do espaço generalizado de Fock em termos dos estados coerentes. Essa relação facilita a dedução das integrais de caminho fermiônicas, ou seja, ajuda a obter, através dos estados coerentes, uma integral funcional para o operador de muitos corpos e, pode ser dada por:

$$\int \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha}^* d\phi_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}} |\phi_{\alpha}\rangle \langle \phi_{\alpha}| = I, \quad (\text{B.3})$$

em que ϕ_α^* e ϕ_α são as variáveis de Grassmann e $|\phi_\alpha\rangle$ e $\langle\phi_\alpha|$ são estados coerentes.

A função de partição no ensemble grande canônico descreve um sistema em equilíbrio com um reservatório de partículas e térmico, com o qual pode trocar partículas. A descrição dos estados em que o sistema e o reservatório possuem energia total e número de partículas fixos, conduz a uma probabilidade de observar o sistema com energia E e número de partículas N dado por $\exp[\beta(E - \mu N)]$. Além da energia média do sistema, o número médio de partículas é fixo, controlado pelo potencial químico μ . A função de partição para um sistema de muitos corpos é definida como

$$Z = \text{Tr} \exp[-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})], \quad (\text{B.4})$$

em que $\hat{H} = \hat{H}(c_\alpha^\dagger, c_\alpha)$ é um operador Hamiltoniano escrito em segunda quantização, μ é o potencial químico, β é o inverso da temperatura e $\hat{N} = \sum_\alpha c_\alpha^\dagger c_\alpha$ é o operador número, que faz a contagem de partículas α em todos os estados.

Uma base ortonormal no espaço de Fock é definida pelo estado $|n\rangle$, em que se pode então calcular o traço

$$\text{Tr} \hat{A} = \sum_n \langle n | \hat{A} | n \rangle, \quad (\text{B.5})$$

ou seja, a soma dos elementos da matriz diagonal, que são os autovalores do operador atuando em uma base discreta,

$$Z = \sum_n \langle n | \exp[-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})] | n \rangle. \quad (\text{B.6})$$

Para construir a função de partição com base nos estados coerentes fermiônicos, introduz-se a relação de clausura (B.3) antes do operador \hat{A} na equação (B.5), e obtém-se então

$$\begin{aligned} \text{Tr} \hat{A} &= \sum_n \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \langle n | \phi_\alpha \rangle \langle \phi_\alpha | \hat{A} | n \rangle \\ \text{Tr} \hat{A} &= \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \langle -\phi_\alpha | \hat{A} \sum_n | n \rangle \langle n | \phi_\alpha \rangle \\ \text{Tr} \hat{A} &= \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \langle -\phi_\alpha | \hat{A} | \phi_\alpha \rangle, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

em que os estados coerentes fermiônicos ($|\phi_\alpha\rangle$ e $\langle\phi_\alpha|$) são combinações lineares dos elementos da base do espaço de Fock, cujos coeficientes contêm as variáveis de Grassmann (ϕ_α^* e ϕ_α). Devido as propriedades de anticomutação dessas variáveis, tem-se que

$$\langle n | \phi_\alpha \rangle \langle \phi'_\alpha | n \rangle = \langle -\phi'_\alpha | n \rangle \langle n | \phi_\alpha \rangle, \quad (\text{B.8})$$

assim, a função de partição (B.4) pode ser reescrita como

$$Z = \int \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha}^* d\phi_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha}} \langle -\phi_{\alpha} | e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} | \phi_{\alpha} \rangle. \quad (\text{B.9})$$

O Hamiltoniano também deve ser escrito em termos das variáveis de Grassmann. Para isso, deve-se introduzir o conceito de um operador $\hat{O}(c^{\dagger}, c)$ de ordem normal, cuja notação é dada por $:\hat{O}(c^{\dagger}, c):$, o que significa que os operadores de criação ficam à esquerda dos operadores de destruição. Desse modo, supondo $\hat{H}(c^{\dagger}, c)$ um operador de ordem normal e expandindo a exponencial desse operador, tem-se

$$\begin{aligned} e^{[\varepsilon \hat{H}(c^{\dagger}, c)]} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[\varepsilon \hat{H}(c^{\dagger}, c)]^n}{n!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varepsilon^n : [\hat{H}(c^{\dagger}, c)]^n :}{n!} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\varepsilon^n [\hat{H}(c^{\dagger}, c)]^n}{n!} - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\varepsilon^n : [\hat{H}(c^{\dagger}, c)]^n :}{n!} \\ &= : e^{[\varepsilon \hat{H}(c^{\dagger}, c)]} : + \varepsilon^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varepsilon^n}{(n+2)!} [\hat{H}(c^{\dagger}, c)]^{n+2} - : [\hat{H}(c^{\dagger}, c)]^n : \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Os elementos de matriz do operador $e^{[\varepsilon \hat{H}(c^{\dagger}, c)]}$ na base dos estados coerentes são representados por

$$\langle \phi | e^{[\varepsilon \hat{H}(c^{\dagger}, c)]} | \phi' \rangle = \langle \phi | \left[: e^{[\varepsilon \hat{H}(c^{\dagger}, c)]} : + O(\varepsilon^2) \right] | \phi' \rangle, \quad (\text{B.11})$$

e, sendo $\hat{A}(c_{\alpha}^{\dagger}, c_{\alpha})$ um operador escrito em ordem normal, que pode ser escrito na base dos estados coerentes como

$$\langle \phi | \hat{A}(c_{\alpha}^{\dagger}, c_{\alpha}) | \phi' \rangle = e^{\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \phi'_{\alpha}} \hat{A}(\phi_{\alpha}^*, \phi'_{\alpha}), \quad (\text{B.12})$$

então o operador $e^{[\varepsilon \hat{H}(c^{\dagger}, c)]}$, na base dos estados coerentes, será

$$\langle \phi | e^{[\varepsilon \hat{H}(c^{\dagger}, c)]} | \phi' \rangle = e^{\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \phi'_{\alpha}} e^{\sum_{\alpha} \varepsilon \hat{H}(\phi_{\alpha}^*, \phi'_{\alpha})} + O(\varepsilon^2), \quad (\text{B.13})$$

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

O resultado encontrado na equação (B.13) como alternativa para o cálculo da função de partição, se torna viável se o fator β da equação (B.9) assumir valores da ordem de ε , ou seja, para que as relações de comutação dos operadores quânticos presentes no Hamiltoniano possam ser negligenciadas, subdivide-se β em pequenos intervalos, associados a tempos imaginários.

Comparando o último termo da função de partição (B.9) com a soma dos elementos

da matriz do operador evolução temporal, que é dado por

$$U(\phi_\alpha^* t_f, \phi_\alpha t_i) = \langle \phi_\alpha t_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(c^\dagger, c)(t_f - t_i)} | \phi_\alpha t_i \rangle, \quad (\text{B.14})$$

e impondo as condições de contorno antiperiódicas,

$$\phi_\alpha t_i = \phi_\alpha \quad \text{e} \quad \phi_\alpha^* t_f = -\phi_\alpha^*, \quad (\text{B.15})$$

é possível identificar β como um tempo imaginário: $\beta = \frac{i(t_f - t_i)}{\hbar}$.

Considerando ainda, $it = \tau$ e $\hbar = 1$, então $\beta = \tau_f - \tau_i$, a função de partição pode ser reescrita da seguinte forma:

$$Z = \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\Sigma_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \langle -\phi | e^{-(\tau_f - \tau_i)(\hat{H} - \mu \hat{N})} | \phi \rangle. \quad (\text{B.16})$$

O intervalo de tempo imaginário β pode ser dividido em M fatias iguais de tempo de tamanho ε , isso é,

$$\varepsilon = \frac{\tau_f - \tau_i}{M}. \quad (\text{B.17})$$

Quando assume-se que $\tau_i = 0$, tem-se que $\tau_f = M\varepsilon$. Assim, a função de partição pode ser representada por

$$Z = \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\Sigma_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \langle -\phi | e^{-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})^M} | \phi \rangle. \quad (\text{B.18})$$

Assumindo que M seja grande e introduzindo $M - 1$ vezes o operador unitário da equação (B.3), pode-se separar cada etapa da evolução do operador tempo imaginário (equação (B.18)), estabelecendo um índice k ($k = 1, 2, \dots, M - 1$) que especifica a ordem cronológica. Portanto, a função de partição fica

$$Z = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\Sigma_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \int \prod_{k=1}^{M-1} \prod_\alpha d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} e^{-\Sigma_{k=1}^{M-1} \Sigma_\alpha \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k}} \times \langle -\phi | e^{-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})} | \phi_{M-1} \rangle \langle \phi_{M-1} | \dots \times \dots | \phi_1 \rangle \langle \phi_1 | e^{-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})} | \phi \rangle. \quad (\text{B.19})$$

Impondo novas condições de contorno antiperiódicas,

$$\phi_{\alpha,0} = \phi_\alpha \quad \text{e} \quad \phi_{\alpha,M}^* = -\phi_\alpha^* \quad (\text{B.20})$$

e, definindo a variável $\phi_{\alpha,M} \equiv -\phi_{\alpha,M}$, a expressão (B.19) assume a forma

$$\begin{aligned}
Z &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} e^{-\sum_{k=1}^M \Sigma_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k}} \\
&\times \langle -\phi | e^{-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})} | \phi_{M-1} \rangle \prod_{k=2}^{M-1} \langle \phi_k | e^{-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})} | \phi_{k-1} \rangle \\
&\times \langle \phi_1 | e^{-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})} | \phi \rangle.
\end{aligned} \tag{B.21}$$

Na equação acima, não é possível calcular os elementos de matriz diretamente, devido à não comutatividade dos operadores de criação e destruição. Supondo que $\hat{H}(c^{\dagger}, c)$ está em ordem normal, o que possibilita a dedução da integral de caminho, encontra-se

$$\begin{aligned}
Z &\approx \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} e^{-\sum_{k=1}^M \Sigma_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k}} \times \langle -\phi | : e^{-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})} : | \phi_{M-1} \rangle \\
&\times \exp \sum_{k=2}^{M-1} \sum_{\alpha} [\phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1} - \varepsilon(H(\phi_{\alpha,k}^*; \phi_{\alpha,k-1}) - \mu \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1})] \\
&\times \langle \phi_1 | : e^{-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})} : + O(\varepsilon^2) | \phi \rangle,
\end{aligned} \tag{B.22}$$

que, com as condições antiperiódicas de contorno (B.20) e a definição $\phi_{\alpha} \equiv -\phi_{\alpha,M}$, se torna

$$\begin{aligned}
Z &\approx \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} \\
&\times \exp \left\{ \varepsilon \sum_{k=1}^M \sum_{\alpha} \left[\phi_{\alpha,k}^* \left(\frac{\phi_{\alpha,k} - \phi_{\alpha,k-1}}{\varepsilon} - \mu \phi_{\alpha,k-1} \right) + H(\phi_{\alpha,k}^*; \phi_{\alpha,k-1}) \right] \right\},
\end{aligned} \tag{B.23}$$

em que os termos de ordem ε^2 são desprezados. Assim, a função de partição está escrita em termos das variáveis de Grassmann.

A equação (B.23) pode ser reescrita em uma notação 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. Isso permite substituir $H(\phi_{\alpha,k}^*; \phi_{\alpha,k-1})$ por $H(\phi_{\alpha}^*(\tau); \phi_{\alpha}(\tau))$. No limite $M \rightarrow \infty$, o somatório em k pode ser substituído por uma integral em τ , tal que

$$\frac{\phi_{\alpha,k} - \phi_{\alpha,k-1}}{\varepsilon} = \frac{\phi_{\alpha}(\tau) - \phi_{\alpha}(\tau - \varepsilon)}{\varepsilon} = \frac{\partial}{\partial \tau} \phi_{\alpha}(\tau). \tag{B.24}$$

Desse modo, obtém-se para a função de partição (B.23)

$$Z = \int_{\phi_\alpha(\beta)=\zeta\phi_\alpha(0)} D(\phi_\alpha^*(\tau)\phi_\alpha(\tau)) \times \exp \left[- \int_0^\beta d\tau \left(\sum_\alpha \phi_\alpha^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) \phi_\alpha(\tau) + H(\phi_\alpha^*(\tau), \phi_\alpha(\tau)) \right) \right], \quad (\text{B.25})$$

com o uso da notação

$$\int_{\phi_\alpha(\beta)=\zeta\phi_\alpha(0)} D(\phi_\alpha^*(\tau)\phi_\alpha(\tau)) = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_\alpha d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k}. \quad (\text{B.26})$$

No capítulo 3 deste trabalho, o formalismo das integrais de caminho fermiônicas (B.25) é utilizado no cálculo da função de partição do modelo fermiônico.

Referências Bibliográficas

- AVRAHAM, N. et al. Inverse melting of a vortex lattice. *Nature*, v. 411, p. 451, 2001.
- BINDER, K.; YOUNG, A. P. Spin Glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions. *Rev. Mod. Phys.*, v. 58, out 1986.
- BLUME, M. Theory of the First-order Magnetic Phase Change in UO₂. *Phys. Rev.*, v. 141, p. 517, 1966.
- CAPEL, H. W. On the possibility transitions of first-order in Ising systems with zero-field phase of triplet ions splitting. *Physica*, v. 32, p. 966, 1966.
- CLADIS, P. E. et al. High-Pressure Investigation of the Reentrant Nematic - Bilayer-Smectic-A Transition. *Phys. Rev. Lett.*, v. 39, p. 720, 1977.
- CLADIS, P. E. et al. Reentrant nematic transitions in cyano-octyloxybiphenyl (8OCB). *Phys. Rev. A*, v. 23, p. 2594, 1981.
- COSTA, F. A. da. Tricriticality and reentrance in an S=1 spin glass. *Phys. Rev. B*, v. 82, p. 052402, 2010.
- CRISANTI, A.; LEUZZI, L. Stable Solution of the Simplest Spin Model for Inverse Freezing. *Phys. Rev. Lett.*, v. 95, p. 087201, 2005.
- DONNIO, B. et al. Very slow high-temperature relaxation of the remnant magnetic moment in 2nm mesomorphic gold nanoparticles. *Soft Matter*, v. 6, p. 965–970, 2010.
- DOTSENKO, V. An introduction to the Theory of Spin Glasses and Neural Networks. *World Scientific*, 1994.
- FELDMANN, H.; OPPERMAN, R. Replica symmetry breaking solution for the fermionic Ising spin-glass and the Ghatak Sherrington model. *J. Phys. A*, v. 33, p. 1325–1332, 2000.
- FISCHER, K. H.; HERTZ, J. A. *Spin glasses*. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 1991.
- GHATAK, S.; SHERRINGTON, D. Crystal field effects in a general S Ising spin glass. *J. Phys. C.*, v. 10, p. 3149, 1977.
- HEMMEN, J. L. van. Classical spin-glass model. *Phys. Rev. Lett.*, v. 49, p. 409–412, 1982.
- HEMMEN, J. van; ENTER, A. van; CANISIUS, J. On a Classical Spin Glass Model. *J., Z. Phys. B: Condensed Matter*, v. 50, p. 311, 1983.
- JONA, F.; SHIRANE, G. *Ferroelectric Crystals*. 1962.

- KIRKPATRICK, S.; SHERRINGTON, D. Infinite-range models of spin glasses. *Phys. Rev. B*, v. 17, n. 11, p. 4384, 1978.
- MAGALHAES, S. G.; MORAIS, C. V.; ZIMMER, F. M. Role of the transverse field in inverse freezing in the fermionic Ising spin-glass model. *Phys. Rev. B*, v. 77, p. 134422, 2008.
- MAGALHAES, S. G.; MORAIS, C. V.; ZIMMER, F. M. Inverse freezing in the hopfield fermionic ising spin glass. *Phys. Rev. B*, v. 81, p. 014207, Jan 2010.
- MAGALHAES, S. G.; ZIMMER, F. M.; MORAIS, C. V. Fermionic van Hemmen spin glass model with a transverse field. *Phys. Lett. A*, v. 374, p. 3554, 2010.
- MORAIS, C. V. et al. Inverse freezing in the Ghatak-Sherrington model with a random field. *Phys. Rev. E*, v. 85, p. 031133, 2012.
- MORAIS, C. V.; ZIMMER, F. M.; MAGALHAES, S. G. Inverse freezing in the Hopfield fermionic Ising spin glass with a transverse magnetic field. *Phys. Lett. A*, v. 375, p. 689, 2011.
- MYDOSH, J. A. Disordered magnetism and spin glasses. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 157-158, p. 606–610, 1996.
- NEGELE, J. W.; ORLAND, H. *Quantum Many-Particle Systems*. Reading, MA, USA: Addison-Wesley, 1988.
- OLIVEIRA, M. J. de. *Termodinamica*. Sao Paulo, SP, Brasil: Livraria da Fisica, 2005.
- PAOLUZZI, M.; LEUZZI, L.; CRISANTI, A. Thermodynamic First Order Transition and Inverse Freezing in a 3D Spin Glass. *Phys. Rev. Lett.*, v. 104, p. 120602, 2010.
- PATHRIA, R. K. *Statistical Mechanics*. Second edition. Woburn, MA, USA: Butterworth Heinemann, 1996.
- PORTMANN, O.; VATERLAUS, A.; PESCIA, D. An inverse transition of magnetic domain patterns in ultrathin films. *Nature*, v. 422, p. 701, 2001.
- RAMIREZ, A. P. Strongly Geometrically Frustrated Magnets. *Annual Reviews Mater. Sci.*, v. 24, p. 453–480, 1994.
- RUTH, N. J. L. van; RASTOGI, S. Nonlinear Changes in Specific Volume. A Route To Resolve an Entropy Crisis. *Macromolecules*, v. 37, p. 8191, 2004.
- SALINAS, S. R. *Introducao a Fisica Estatistica*. Sao Paulo, SP, Brasil: EDUSP, 1997.
- SCHUPPER, N.; SHNERB, N. M. Spin Model for Inverse Melting and Inverse Glass Transition. *Physical Rev. Lett.*, v. 93, p. 037202, 2004.
- SCHUPPER, N.; SHNERB, N. M. Inverse melting and inverse freezing: a spin model. *Physical Review E*, v. 72, p. 046107, 2005.
- THEUMANN, A.; SCHIMIDT, A. A.; MAGALHAES, S. G. The Ising spin glass in a transverse field revisited. Results of two fermionic models. *Physica A*, v. 311, p. 498, 2002.

THOMAS, C. K.; KATZGRABER, H. G. Simplest model to study reentrance in physical systems. *Phys. Rev. E*, v. 84, p. 040101(R), 2011.

VIANA, J. R. *Estudo do Vidro de Spin Quantico*. Dissertação (Mestrado em Física) — Universidade Federal do Amazonas, Amazonas, 2002.

ZEKS, B.; SHUKLA, G. C.; BLINC, R. Dynamics of Ferroelectric Rochelle Salt. *Phys. Rev. B*, v. 3, p. 2306, 1971.

ZIMMER, F. M.; BERGER, I. C.; MAGALHAES, S. G. Inverse freezing in the van Hemmen Fermionic Ising spin glass with a transverse magnetic field. *Phys. Lett. A*, v. 376, p. 566–572, 2012.

ZIMMER, F. M. et al. Inverse freezing in the cluster fermionic spin glass model with a transverse field. *J. Stat. Mech.*, v. 2011, p. 05026, 2011.