

**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 COM CLUSTERS**

**TESE DE DOUTORADO**

**Cíntia Fernandes da Silva**

**Santa Maria, RS, Brasil**

**2014**

# **CONGELAMENTO INVERSO EM UM MODELO DE VIDRO DE SPIN COM CLUSTERS**

**Cíntia Fernandes da Silva**

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física, Área de Concentração em Física da Matéria Condensada, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para obtenção do grau de  
**Doutor em Física.**

**Orientador: Prof. Fábio Mallmann Zimmer**

**Santa Maria, RS, Brasil**

**2014**

Ficha catalográfica elaborada através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Central da UFSM, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Fernandes da Silva, Cíntia  
Congelamento Inverso em um Modelo de Vidro de Spin  
com Clusters / Cíntia Fernandes da Silva.-2014.  
83 f.; 30cm

Orientador: Fábio Mallmann Zimmer  
Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa  
Maria, Centro de Ciências Naturais e Exatas, Programa de  
Pós-Graduação em Física, RS, 2014

1. Vidro de Spin 2. Cluster 3. Congelamento Inverso  
I. Mallmann Zimmer, Fábio II. Título.

---

©2014

Todos os direitos autorais reservados a Cíntia Fernandes da Silva. A reprodução de partes ou do todo deste trabalho só poderá ser feita mediante a citação da fonte.

End. Eletr.: fsj.cintia@gmail.com

---

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

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

**CONGELAMENTO INVERSO EM UM MODELO DE VIDRO DE SPIN  
COM CLUSTERS**

elaborada por  
**Cíntia Fernandes da Silva**

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

**COMISSÃO EXAMINADORA:**

**Fábio Mallmann Zimmer, Dr.**  
(Presidente/orientador)

**JOSE CARLOS MERINO MOMBACH, Dr. (UFSM)**

**MATHEUS JATKOSKE LAZO, Dr. (FURG)**

**ROGERIO JOSE BAIERLE , Dr. (UFSM)**

**SERGIO GARCIA MAGALHÃES, Dr. (UFF)**

Santa Maria, 29 de agosto de 2014.

## **AGRADECIMENTOS**

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

- ao professor Fábio Mallmann Zimmer, pela orientação e dedicação;
- aos meus colegas e amigos do Laboratório de Teoria em Física da Matéria Condensada do Departamento de Física da UFSM;
- ao departamento de Física e aos funcionários da pós-graduação;
- aos meus pais Luís Carlos e Maria Cleci, pelo carinho e apoio de toda minha vida;
- à minha família, meu marido Jair, meus enteados Dionathan, Nathan e Letícia e minha filha Maria Luíza, pelo amor, carinho e incentivo em todos os momentos;

## RESUMO

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

### CONGELAMENTO INVERSO EM UM MODELO DE VIDRO DE SPIN COM CLUSTERS

AUTORA: CÍNTIA FERNANDES DA SILVA

ORIENTADOR: FÁBIO MALLMANN ZIMMER

Data e Local da Defesa: Santa Maria, 29 de agosto de 2014.

Este trabalho analisa um modelo de vidro de spin (VS) com clusters em duas versões: uma versão clássica com spins de Ising e uma versão fermiônica com operadores de spins. Neste modelo, as entidades básicas são clusters correlacionados que interagem entre si de modo desordenado (interação intercluster). Considera-se também interações de curto-alcance entre momentos magnéticos pertencentes ao mesmo cluster (interação intracluster), que podem ser ferromagnéticas (FE) ou antiferromagnéticas (AF). As interações desordenadas intercluster são calculadas analiticamente através do método das réplicas com aproximação de um passo de quebra de simetria de réplicas. Após o tratamento, chega-se a um modelo efetivo de um único cluster resolvido por diagonalização exata. A versão fermiônica do modelo pode introduzir flutuações quânticas por meio de um campo magnético transversal  $\Gamma$ . Como resultados, a curva de susceptibilidade magnética  $\chi$  em função da temperatura  $T$  apresenta um pico agudo na temperatura de transição  $T_f$  e a curva do calor específico  $C_v$  em função de  $T$  apresenta um máximo arredondado à temperatura  $T^*$  cerca de 20% acima de  $T_f$ . Porém, para um  $\Gamma$  suficientemente alto, esta diferença é muito maior, comportamento que é observado por alguns autores para o composto  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$  a baixas concentrações. Além disso, o modelo VS fermiônico com clusters no ensemble grão-canônico (onde o potencial químico  $\mu$  introduz flutuações de carga) é usado para investigar os mecanismos responsáveis pelo congelamento inverso. Nesta análise, para uma certa região de  $\mu$ , uma reentrância relacionada ao congelamento inverso surge. Entretanto, o aumento das interações FE intracluster  $J_0$  pode levar o ponto tricrítico para valores de  $T$  mais baixos, fazendo com que uma transição reentrante de segunda-ordem apareça. Por outro lado, o efeito de  $\Gamma$  é destruir o congelamento inverso gradativamente. Os mecanismos necessários para o surgimento da transição congelamento inverso também são estudados através do modelo de VS com clusters em uma versão clássica utilizando spins de Ising. Este estudo é realizado primeiramente considerando somente primeiros vizinhos intracluster AF e em um segundo momento considerando interações intracluster entre primeiros e segundos vizinhos, onde

é possível introduzir frustração geométrica intracluster. A presença de interações antiferromagnéticas intracluster diminui o momento magnético total dos clusters, levando a uma fase PM de baixa entropia, favorecendo o aparecimento de congelamento inverso. Por outro lado, a presença de frustração geométrica é contrária ao surgimento de congelamento inverso.

**Palavras-chave:** Vidro de Spin. Cluster. Congelamento Inverso.

## ABSTRACT

Doctoral Dissertation  
Programa de Pós-Graduação em Física  
Universidade Federal de Santa Maria

### INVERSE FREEZING IN A CLUSTER SPIN GLASS MODEL

AUTHOR: CÍNTIA FERNANDES DA SILVA

ADVISOR: FÁBIO MALLMANN ZIMMER

Local and date: Santa Maria, August 29, 2014.

This work analyzes a spin glass (SG) model with cluster in two versions: a classic version with Ising spins and in a fermionic version with spin operators. In this model, the basic entities are correlated clusters that interact each other disorderedly (intercluster interaction). It is also considered short-range interactions among spins belonging to the same cluster (intracluster interaction), which can be ferromagnetic (FE) or antiferromagnetic (AF). Disordered intercluster interactions are analytically calculated by using the framework of Parisi one-step replica symmetry breaking. After this treatment, we get an effective single cluster model solved by exact diagonalization. The fermionic version of the model can introduce quantum fluctuations by means of a transverse magnetic field  $\Gamma$ . As a result, the linear susceptibility  $\chi$  has a cusp at the transition temperature  $T_f$  and the specific heat  $C_v$  has a broad maximum at temperature  $T^*$  about 20% above  $T_f$ . However, for  $\Gamma$  sufficiently high, this difference is greater. This behavior is observed by some authors for the compound  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$  at low concentration. Furthermore, the fermionic SG model with cluster in the grand canonical ensemble (where the chemical potential  $\mu$  introduces charge fluctuations) is used to investigate the mechanisms responsible for the inverse freezing (IF). In this analysis, for a certain region of  $\mu$ , a reentrance related to the inverse freezing arises. However, the increase of the FE intracluster interactions  $J_0$  can take the tricritical point to lower  $T$ , introducing a second-order IF transition. On the other hand, the  $\Gamma$  destroys gradually the inverse freezing. The necessary mechanisms for the emergence of inverse freezing transition are also studied using the cluster SG model in a classic version with Ising spins. This study is firstly conducted considering only first-neighbors intracluster interactions AF and in a second moment considering intracluster interactions among second neighbors, where it is possible to introduce intracluster geometrical frustration. The presence of antiferromagnetic intracluster interactions decreases the total magnetic moment of the clusters, leading to a PM phase with low entropy, favoring the appearance of inverse freezing. Moreover, the presence of geometrical frustration is contrary to the emergence of inverse freezing.

**Keywords:** Spin Glass. Cluster. Inverse Freezing.



## LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Gráficos de $\chi$ em função de $T$ para o sistema de $\text{CeNi}_{0.8}\text{Cu}_{0.2}$ . No detalhe são apresentadas as curvas da magnetização à ZFC e à FC para o sistema (MARCANO et al., 2007). . . . .	16
Figura 1.2 – Gráfico da magnetização em função de $T$ para o composto $\text{AgMn}$ (2.6%). O ciclo (1 $\rightarrow$ 2 $\rightarrow$ 3 $\rightarrow$ 4 $\rightarrow$ 5) refere-se ao procedimento ZFC, e o ciclo (5 $\rightarrow$ 4 $\rightarrow$ 6 $\rightarrow$ 4 $\rightarrow$ 5) ao procedimento FC (MYDOSH, 1996). . . . .	17
Figura 1.3 – (a) Gráficos do $C_v$ em função de $T$ para o sistema de $\text{CuMn}$ com 2.79% de Mn (BINDER; YOUNG, 1986; FISCHER; HERTZ, 1991), (b) para o composto $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ com concentração de Ho igual a $x = 0.167$ , com máximo em $T^* = 0.18\text{K}$ (REICH et al., 1990) e (c) para $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ com concentração de Ho $x = 0.045$ (QUILLIAM; MUGFORD; GOMEZ; KYCIA; KYCIA, 2007). . . . .	19
Figura 1.4 – Representação esquemática de uma rede quadrada frustrada (RAMIREZ, 1994). 20	
Figura 1.5 – Exemplos de redes geometricamente frustradas:(a) rede triangular e (b) rede de Kagomé . . . . .	21
Figura 1.6 – Espaço de fase representativo de um vidro de spin (BINDER; YOUNG, 1986). 21	
Figura 1.7 – Diagramas de fase magnético para o modelo SK (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978). . . . .	26
Figura 1.8 – Diagramas de fase temperatura versus campo transversal para os modelos 2S e 4S (THEUMANN; SCHMIDT; MAGALHAES, 2002). . . . .	36
Figura 2.1 – Esboço da dependência da energia e da entropia com o tamanho linear de um polímero de metilcelulose em água (SCHUPPER; SHNERB, 2005). . . . .	38
Figura 2.2 – Diagrama de fase do modelo BC para $r = 6$ na figura principal e para $r = 1$ no detalhe da figura (SCHUPPER; SHNERB, 2005). . . . .	40
Figura 2.3 – (a) Diagrama de fase do modelo GS para $r = 1/2, 1, 2$ (CRISANTI; LEUZZI, 2005). (b) Entropia versus temperatura para um valor de campo cristalino $D = 0.96$ para o modelo GS. . . . .	41
Figura 2.4 – Diagrama de fase de $T/J$ versus $\mu/J$ para o modelo de VS de Ising fermiônico, onde $T_{2f}$ e $T_{1f}$ representam as linhas de transição entre as fases PM/VS de primeira e segunda ordem, respectivamente, $T_{tc}$ representa o ponto tricrítico. Abaixo do $T_{tc}$ as linhas à esquerda e à direita da linha $T_{1f}$ representam as espinodais das soluções paramagnética e VS, respectivamente (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2008). . . . .	43
Figura 2.5 – Entropia versus $T/J$ para $\mu/J = 0.92$ . A linha vertical pontilhada é a espinodal da soluções VS e a linha vertical cheia representa a linha de transição de segunda ordem $T_{2f}$ (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2008). . . . .	44
Figura 2.6 – Entropia versus $T/J$ para $\mu/J = 0.92$ . A linha vertical pontilhada é a espinodal da soluções VS e a linha vertical cheia representa a linha de transição de segunda ordem $T_{2f}$ (MORAIS; ZIMMER; MAGALHAES, 2011). . . . .	45
Figura 4.1 – Parâmetros de ordem com 1P-QSR normalizados e susceptibilidade linear em função de $T/J$ para $J_0/J = 3.80$ , $\Gamma = 0$ (linhas sólidas) e $\Gamma/J = 0.5$ (linhas pontilhadas) (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010). . . . .	58
Figura 4.2 – Calor específico versus $T/J$ para $n_s = 6$ e $J_0/J = 2.0, 3.39$ e $5.0$ para (a) $\Gamma/J = 0.0$ e (b) $\Gamma/J = 1.0$ (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010). . . . .	59
Figura 4.3 – Calor específico versus $T/J$ para $n_s = 9$ e $J_0/J = 2.0, 3.39$ e $5.0$ para (a)	

	$\Gamma/J = 0$ e (b) $\Gamma/J = 1.0$ . No detalhe, o comportamento de $\chi$ correspondente a cada $J_0$ (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010). . . . .	60
Figura 4.4	– Calor específico versus $T/J$ para: (a) $n_s = 4, 6, 9$ e $12$ com $J_0/J$ escolhido para manter o mesmo $T^*/T_f$ com $\Gamma = 0$ ; (b) $n_s = 6$ e $J_0/J = 3.8$ para $\Gamma/J = 0, 0.5$ e $1.0$ (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010). . . . .	60
Figura 4.5	– (a) Diagramas de fase $T \times \Gamma$ para $n_s = 6$ e três valores de $J_0/J$ : $J_0 = 2.0, 3.39$ e $5.0$ . (b) Diagramas de fase $T \times \Gamma$ para $J_0/J = 3.39$ e três valores de $n_s$ : $n_s = 4, 6$ e $9$ (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010). . . . .	61
Figura 4.6	– Comportamento de $T_f$ e $T^*$ em função de $\Gamma$ , onde $n_s$ e $J_0/J$ são escolhidos para manter $T^*/T_f = 1.28$ (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010). . . . .	61
Figura 4.7	– Diagramas de fase $T/J$ versus $\mu/J$ para $\Gamma/J = 0$ e $n_s = 5$ quando $J_0/J = 3.00, 7.35$ e $9.00$ . As linhas sólidas representam transições de segunda ordem entre as fases PM e VS, enquanto as linhas tracejadas representam transições de primeira ordem. Figuras (b), (c) e (d) mostram as linhas de primeira ordem em detalhes, onde as linhas pontilhadas são as linhas espinodais (ZIMMER; SILVA; MORAIS; MAGALHAES, 2011). . . . .	62
Figura 4.8	– Diagramas de fase $T/J$ versus $\mu/J$ são exibidos para $\Gamma/J = 2.2$ e $n_s = 5$ com $J_0/J = 3.00, 7.35$ e $9.00$ . Figuras (b) e (c) mostram a linha de primeira ordem em detalhes. As linhas pontilhadas são as espinodais das soluções PM e VS e a linha tracejada a transição de primeira ordem (ZIMMER; SILVA; MORAIS; MAGALHAES, 2011). . . . .	63
Figura 4.9	– Entropia em função da temperatura para $n_s = 5$ , $J_0/J = 7.35$ , diferentes valores de $\mu$ com $\Gamma/J = 0.0$ e $2.2$ . O fundo mostra a entropia para uma transição reentrante de segunda ordem (ZIMMER; SILVA; MORAIS; MAGALHAES, 2011). . . . .	64
Figura 4.10	– Calor específico versus $T/J$ para: (a) $\Gamma/J = 0$ , $\mu/J = 0$ e $n_s = 5$ com $J_0/J = 7.35$ e $9.00$ ; (b) $\Gamma/J = 0$ , $n_s = 5$ com $J_0/J = 7.35$ e vários valores de $\mu$ . No fundo da figura (a) são comparados os resultados para $n_s = 5$ e $n_s = 9$ (ZIMMER; SILVA; MORAIS; MAGALHAES, 2011). . . . .	65
Figura 4.11	– Ocupação média por cluster $\nu$ para $n_s = 5$ e $\Gamma/J = 0$ . Figura (a) mostra $\nu$ versus $T/J$ para $J_0/J = 7.35$ e vários valores de $\mu$ . A figura (b) mostra $\nu$ versus $\mu/J$ para $T/J = 0.5$ e três valores de $J_0/J$ (ZIMMER; SILVA; MORAIS; MAGALHAES, 2011). . . . .	66
Figura 4.12	– $C_v$ em função da temperatura para $\Gamma/J = 2.2$ , $n_s = 5$ com $J_0/J = 7.35$ e vários valores de $\mu$ . . . . .	66
Figura 4.13	– (a) Parâmetros de ordem e susceptibilidade em função da temperatura para $J_1/J$ pequeno. Em detalhe, resultados para região $J_1/J$ alto. (b) Parâmetros de ordem e susceptibilidade em função da interação de curto-alcance antiferromagnética para $T/J$ pequeno. Ambos resultados para $n_s = 8$ (SILVA; ZIMMER; MAGALHAES; LACROIX, 2012). . . . .	67
Figura 4.14	– Diagramas de fase $T/J$ versus $J_1/J$ para vários tamanhos de clusters $n_s$ com valores pares de $n_s$ . Linhas sólidas representam transições de segunda ordem e linhas tracejadas transições de primeira ordem. (a) As formas dos clusters estão representadas no topo da figura para $n_s = 4, 8, 12, 16$ e $20$ da esquerda para a direita. Linhas pontilhadas correspondem a temperatura onde $\chi$ apresenta o valor máximo. (b-d) Transições de primeira ordem em detalhes, onde linhas ponto-tracejadas são as espinodais PM e VS. Detalhe na figura (a) Entropia em função da temperatura para $J_1/J = 0.803$ . . . . .	68

- Figura 4.15 – Diagramas de fase  $T/J$  versus  $J_1/J$  para  $n_s$  ímpares. A mesma convenção de linhas da figura 4.14 é usada. (a) As formas dos clusters estão representadas no topo da figura para  $n_s = 5, 7, 9$  e  $15$  aumentando da esquerda para a direita. 69
- Figura 4.16 – Susceptibilidade magnética  $\chi$  e parâmetro  $r$  em função de  $T/J$  para valores altos de  $J_1/J$ . ..... 70
- Figura 4.17 – Diagramas de fase  $T/J_1$  versus  $J/J_1$  para vários valores de  $J_2/J_1$  com diferentes tamanhos de clusters e acoplamentos AF intracluster. As formas dos clusters são mostradas em cada painel, onde as linhas pretas representam interações entre primeiros vizinhos e as linhas pontilhadas vermelhas, as interações entre segundos vizinhos. As linhas sólidas representam transições VS/PM de segunda ordem e as linhas pontilhadas, transições de primeira ordem. As linhas tracejadas representam o máximo da susceptibilidade. O detalhe em (b) mostra o comportamento de  $T^*/J_1$  versus  $J_2/J_1$  para  $J = 0$ . O detalhe em (d) mostra o parâmetro  $R$  em função de  $J_2/J_1$  dentro da fase PM a baixas temperaturas. .... 72
- Figura 4.18 – Parâmetros de ordem no regime de baixa desordem ( $J/J_1 = 2.0$ ) para vários valores de  $J_2/J_1$  e  $n_s = 16$  com a mesma forma da figura 4.17(b). O detalhe exhibe a susceptibilidade em função de  $T$ . .... 73
- Figura 4.19 – Resultados para interações intracluster FE e AF com  $n_s = 16$  e a mesma forma da figura 4.17(b). (a) Diagramas de fase  $T/J_1$  versus  $J/J_1$  para vários valores de  $J_2/J_1$ . (b) Parâmetro de ordem  $R$  em função de  $J_2/J_1$  para temperaturas mais baixas. O detalhe exhibe o comportamento de  $T^*/J_1$  versus  $J_2/J_1$  para  $J = 0$ . .... 74

## SUMÁRIO

<b>RESUMO</b> .....	<b>4</b>
<b>ABSTRACT</b> .....	<b>6</b>
<b>INTRODUÇÃO</b> .....	<b>11</b>
<b>1 VIDRO DE SPIN</b> .....	<b>16</b>
<b>1.1 CARACTERIZAÇÃO EXPERIMENTAL DA FASE VIDRO DE SPIN</b> .....	<b>16</b>
<b>1.2 MODELOS TEÓRICOS DE VIDRO DE SPIN</b> .....	<b>22</b>
1.2.1 Vidro de Spin Clássico.....	22
1.2.2 Modelo Clássico de Vidro de Spin com Clusters.....	27
1.2.3 Vidro de Spin Fermiônico em um Campo Transverso.....	29
<b>2 TRANSIÇÕES INVERSAS</b> .....	<b>37</b>
<b>2.1 DESCRIÇÃO GERAL SOBRE AS TRANSIÇÕES INVERSAS</b> .....	<b>37</b>
<b>2.2 MODELOS TEÓRICOS PARA DESCRIÇÃO DAS TRANSIÇÕES INVERSAS</b> .....	<b>39</b>
2.2.1 Descrição para o derretimento inverso.....	39
2.2.2 Descrição para o congelamento inverso.....	40
2.2.3 Modelo Vidro de Spin Fermiônico e mapeamento entre o modelo Ghatak-Sherrington.....	42
<b>3 MODELO E MÉTODOS</b> .....	<b>47</b>
<b>3.1 MODELO DE VIDRO DE SPIN COM CLUSTERS</b> .....	<b>47</b>
3.1.1 Aproximação de Simetria de Réplicas.....	50
3.1.2 Aproximação de um Passo de Quebra de Simetria de Réplicas.....	51
<b>3.2 MODELO VIDRO DE SPIN COM CLUSTERS EM UMA FORMULAÇÃO FERMIÔNICA</b> .....	<b>52</b>
<b>4 RESULTADOS</b> .....	<b>58</b>
<b>4.1 MODELO VIDRO DE SPIN COM CLUSTERS EM UM CAMPO TRANSVERSO</b> .....	<b>58</b>
<b>4.2 CONGELAMENTO INVERSO EM UM MODELO FERMIÔNICO DE VIDRO DE SPIN COM CLUSTERS</b> .....	<b>62</b>
<b>4.3 CONGELAMENTO INVERSO EM UM MODELO DE VIDRO DE SPIN DE ISING COM CLUSTERS PARA INTERAÇÕES INTRACLUSTER ANTIFERROMAGNÉTICAS</b> .....	<b>67</b>
<b>4.4 VIDRO DE SPIN COM CLUSTERS GEOMETRICAMENTE FRUSTRADOS</b> .....	<b>70</b>
4.4.1 Interações Intracluster Antiferromagnéticas.....	71
4.4.2 Interações Intracluster Ferromagnéticas e Antiferromagnéticas.....	73
<b>5 CONSIDERAÇÕES FINAIS</b> .....	<b>75</b>
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	<b>78</b>

## INTRODUÇÃO

A desordem em sistemas de spins representa uma fonte de problemas desafiadores, devido principalmente a riqueza de propriedades físicas que emergem a partir desses sistemas. Como exemplo, podemos citar o comportamento de vidro de spin (VS), que é caracterizado pelo congelamento aleatório dos momentos magnéticos abaixo de uma temperatura  $T_f$ , onde desordem e frustração (competição nas interações) são características fundamentais (DOTSENKO, 1996; MYDOSH, 1996). O estudo teórico dessa fase tem sido objeto de muitos trabalhos e apresenta dificuldades na descrição do VS na presença de efeitos quânticos. Do ponto vista teórico, existem alguns problemas em aberto que são focos desta tese, como a presença de correlações ferromagnéticas ou antiferromagnéticas em sistemas de VS com clusters. Além disso, nos últimos anos tem recebido destaque o problema das transições inversas (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2008; SCHUPPER; SHNERB, 2005; LEUZZI; PAOLUZZI; CRISANTI, 2011), em que modelos com spin 1 fortemente desordenados são aplicados para encontrar os mecanismos relevantes em uma possível ocorrência de congelamento inverso (um dos tipos de transição inversa). Transições inversas são transformações reversíveis a partir de uma fase desordenada a baixas temperaturas para uma fase ordenada a temperaturas mais altas. Portanto, é de fundamental relevância estudar modelos teóricos que permitam descrever tais relações. Neste sentido, o trabalho aqui desenvolvido tem por objetivo estabelecer um modelo de vidro de spin com formação de clusters para o estudo das quantidades termodinâmicas de sistemas VS e posteriormente utilizá-lo no estudo das transições inversas, em particular para o congelamento inverso.

Do ponto de vista experimental, o sistema  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ , apresenta a fase VS em concentrações ( $x$ ) intermediárias de Hólmio (Ho) e pode ser descrito por spins de Ising. Na presença de um campo magnético transversal, este sistema é uma realização experimental de modelos de VS de Ising quânticos. Entretanto, no limite de baixa concentração ( $x = 0.045$ ), a natureza do sistema tem gerado muita discussão (GHOSH; ROSENBAUM; AEPPLI; COPPERSMITH, 2003; QUILLIAM; MENG; MUGFORD; KYCIA, 2008; QUILLIAM; MUGFORD; GOMEZ; KYCIA; KYCIA, 2007). Alguns autores sugerem que existe um campo magnético transversal intrínseco que destrói a ordem VS (GHOSH; ROSENBAUM; AEPPLI; COPPERSMITH, 2003), enquanto outros afirmam que há uma transição VS usual (QUILLIAM; MUGFORD; GOMEZ; KYCIA; KYCIA, 2007; QUILLIAM; MENG; MUGFORD; KYCIA, 2008). Nesta dopagem particular, há um claro desacordo no comportamento do calor específico, por exemplo. Na ref. (GHOSH; ROSENBAUM; AEPPLI; COPPERSMITH, 2003), a curva do calor específico em função da temperatura  $T$  apresenta dois picos e a susceptibilidade magnética possui um comportamento tipo lei de potência. Como sugerido por Ghosh, Rosenbaum, Aeppli e Coppersmith, 2003, este

comportamento na curva da susceptibilidade em função de  $T$  pode ser uma consequência direta de um campo magnético transversal interno. Isso significa que a ausência de ordem VS a baixas diluições é um resultado das flutuações quânticas causadas pelo campo transversal intrínseco. Contrariamente, no trabalho de Quilliam, Mugford, Gomez, Kycia, Kycia, 2007, é encontrada uma transição à fase VS em  $T_f \approx 0.043K$ . Entretanto, o comportamento observado para a curva do calor específico em função de  $T$  difere do comportamento usual para um VS canônico. O comportamento usual do calor específico em função de  $T$  para um VS apresenta um máximo arredondado à temperatura  $T^*$  entre 20 e 30% acima da temperatura de transição  $T_f$  (BINDER; YOUNG, 1986; FISCHER; HERTZ, 1991). Para o composto de  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$  em  $x = 0.045$ ,  $T^* \approx 0.13K$  (QUILLIAM; MENG; MUGFORD; KYCIA, 2008). Logo, a diferença entre  $T^*$  e  $T_f$  é muito maior do que a esperada para um VS usual. Desse modo, seria importante estabelecer modelos capazes de reproduzir qualitativamente este comportamento para o calor específico.

Sabe-se que as quantidades termodinâmicas do VS, tais como calor específico e susceptibilidade magnética, são melhores descritas em termos de modelos usando clusters de spins ao invés de spins canônicos (SOUKOULIS; LEVIN, 1978; SOUKOULIS, 1978). Nesses modelos são consideradas interações desordenadas de longo-alcance entre clusters distintos (interações intercluster) e interações de curto-alcance ferromagnéticas (FE) ou antiferromagnéticas (AF) dentro dos clusters (interações intracluster). Entretanto, estes modelos têm sido analisados somente com spins clássicos, não prevendo flutuações quânticas. Neste sentido, um modelo de VS com clusters na presença de um campo magnético transversal, o qual introduz flutuações de natureza quântica, pode ser útil para o entendimento de características complexas encontradas no sistema  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$  no limite de baixa concentração (REICH et al., 1990; WU; BITKO; ROSENBAUM; AEPPLI, 1993; WU; ELLMAN; ROSENBAUM; AEPPLI; REICH, 1991). Assim, nesta tese o modelo quântico de VS com clusters é adotado e segue uma teoria de campo médio para o tratamento das interações desordenadas interclusters usando um passo de quebra de simetria de réplicas e aproximação estática, sendo as interações intraclusters calculadas através de diagonalização exata (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010).

Outro objeto de investigação desta tese é o fenômeno conhecido como transição inversa. O crescente interesse neste tipo de transição deve-se a recentes estudos que mostram a existência de transições inversas em diversos sistemas físicos, tais como nanopartículas de ouro (DONNIO et al., 2010), filmes finos magnéticos (PORTMANN, 2003), supercondutores de altas temperaturas (AVRAHAM et al., 2001), entre outros (KRIVORUCHKO V.N.; TARENKOV, 2010; SCHOLL et al., 2010; HIRRIEN; CHEVILLARD; DESBRIERES; AXELOS; RINAUDO, 1998; SCHUPPER; SHNERB, 2005, 2004). Portanto, a identificação de mecanismos fundamentais para o surgimento de transições inversas é uma questão em aberto e muito importante.

Para melhorar o entendimento teórico sobre as transições inversas, é útil estudar

modelos capazes de reproduzir características gerais deste fenômeno. Por exemplo, o estudo do modelo Blume-Capel de spin 1 mostra que a transição inversa chamada derretimento inverso surge se uma vantagem entrópica dos estados interagentes ( $S^z = 1, -1$ ) é adicionada (SCHUPPER; SHNERB, 2005). Em outras palavras, a transição inversa aparece se os estados não-interagentes  $S^z = 0$ , controlados pelo campo anisotrópico  $D$ , são energeticamente favorecidos ao mesmo tempo que uma vantagem entrópica dos estados interagentes é assumida. Outra contribuição importante tem sido obtida através do modelo desordenado Ghatak-Sherrington (GHATAK; SHERRINGTON, 1977), no qual a transição inversa chamada congelamento inverso ocorre espontaneamente (SCHUPPER; SHNERB, 2005; LEUZZI; PAOLUZZI; CRISANTI, 2011). Devido a um mapeamento entre o campo anisotrópico  $D$  do modelo Ghatak-Sherrington e o potencial químico  $\mu$ , modelos de VS fermiônicos em um ensemble grão-canônico (FELDMANN; OPPERMANN, 1999) também são utilizados no estudo do congelamento inverso. Em particular, na formulação fermiônica os spins são escritos em termos de operadores fermiônicos que podem atuar em sítios representados por estados com um único férmion ( $|\uparrow 0\rangle, |0 \downarrow\rangle$ ), duplamente ocupados ( $|\uparrow \downarrow\rangle$ ) ou vazios ( $|00\rangle$ ), onde a diluição magnética causada pela presença de sítios vazios e duplamente ocupados (sítios não-magnéticos) tem o papel semelhante aos dos estados  $S^z = 0$  do modelo Ghatak-Sherrington. Esses resultados sugerem que a presença simultânea de frustração e estados não-interagentes são os elementos essenciais para o aparecimento de congelamento inverso espontaneamente (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2008; MORAIS; ZIMMER; MAGALHAES, 2011; LEUZZI; PAOLUZZI; CRISANTI, 2011). Desse modo, o modelo de VS com clusters em uma versão fermiônica, usado para melhorar a descrição das quantidades termodinâmicas da fase VS (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010), pode trazer uma contribuição relevante na investigação dos mecanismos fundamentais no surgimento de congelamento inverso (ZIMMER; SILVA; MORAIS; MAGALHAES, 2011).

Recentemente, estudos numéricos de um modelo de Ising bidimensional com interações aleatórias têm mostrado que desordem fraca e frustração podem introduzir espontaneamente uma transição inversa da fase ferromagnética para a fase paramagnética (PM) (THOMAS; KATZGRABER, 2011). Porém, diferentemente das análises anteriores, este resultado é obtido considerando spins de Ising ( $S^z = 1$  ou  $-1$ ). Portanto, surge a questão se um modelo VS fortemente desordenado com spins de Ising também é capaz de exibir congelamento inverso. Para tanto, nesta tese é estudado um modelo de VS com clusters considerando spins de Ising, no qual interações intercluster desordenadas de longo-alcance são adotadas com interações intracluster antiferromagnéticas (AF)  $J_1$  (SILVA; ZIMMER; MAGALHAES; LACROIX, 2012). Logo, a desordem intercluster pode introduzir frustração enquanto as interações intracluster AF podem diminuir o momento magnético dos clusters. Em particular, o aumento de  $J_1$  pode favorecer um cenário onde o momento magnético total dos clusters torna-se muito pequeno. Como consequência,

pode resultar em uma fase PM caracterizada por um grande número de clusters com momentos magnéticos pequenos ou zero, formando uma fase PM com pequena interação intercluster (SILVA; ZIMMER; MAGALHAES; LACROIX, 2012).

De acordo com os trabalhos citados anteriormente, sugere-se que frustração gerada por desordem e a presença de estados não-interagentes são os elementos essenciais para o surgimento de congelamento inverso (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2008; ZIMMER; SILVA; MORAIS; MAGALHAES, 2011; SILVA; ZIMMER; MAGALHAES; LACROIX, 2012). Desse modo, pode-se perguntar se outros tipos de frustrações são capazes também de levar à esta transição inversa. Neste sentido, é estudado um modelo de VS com clusters no qual é possível introduzir frustração geométrica nas interações intracluster. Este modelo considera clusters com uma geometria de rede quadrada e interações intracluster entre primeiros ( $J_1$ ) e segundos ( $J_2$ ) vizinhos, que podem ser ferromagnéticas (FE) e/ou antiferromagnéticas (AF). Portanto, as interações intracluster podem introduzir frustração geométrica ajustando a relação entre  $J_1$  e  $J_2$  (LACROIX, 2010). Com isso, nesta tese, também são investigados os efeitos da frustração geométrica no congelamento inverso usando o modelo de vidro de spin de Ising com clusters geometricamente frustrados (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES; LACROIX, 2014).

Em síntese, os principais objetivos desta tese são:

- Estabelecer um modelo de vidro de spin com formação de clusters capaz de descrever as propriedades termodinâmicas de sistemas vidro de spin quântico (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010);
- Utilizar o modelo estabelecido para estudar o calor específico e susceptibilidade magnética encontrados no caso da liga magnética  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$  (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010);
- Estabelecer uma versão fermiônica do modelo de vidro de spin com clusters para investigar os mecanismos chaves para o surgimento de congelamento inverso (ZIMMER; SILVA; MORAIS; MAGALHAES, 2011);
- Analisar o congelamento inverso através do modelo de vidro de spin com clusters utilizando spins de Ising e considerando interações intracluster antiferromagnéticas (SILVA; ZIMMER; MAGALHAES; LACROIX, 2012);
- Estudar os efeitos da frustração geométrica sobre o congelamento inverso (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES; LACROIX, 2014).

A partir destes objetivos, a presente tese resultou em quatro artigos publicados: Zimmer, F. M.; Silva, C. F. and Magalhaes, S. G., Phys. A, v. 389, p.5594-5601, sep. 2010; Zimmer, F. M.; Silva, C. F.; Morais, C. V. and Magalhaes, S. G., Journal of Statistical Mechanics, v. 2011, p. P05026, may 2011; Silva, C. F.; Zimmer, F. M.; Magalhaes, S. G.



and Lacroix, C., *Physical Review E*, v. 86, p.051104, Nov 2012 e Zimmer, F. M.; Silva, C. F.; Magalhaes, S. G. and Lacroix, C., *Physical Review E*, v. 89, p.022120, Feb. 2014.

Esta tese está estruturada da seguinte forma: o capítulo 1 é reservado para uma breve discussão sobre algumas características encontradas em sistemas VS e modelos teóricos utilizados para descrever a fase magnética. O comportamento das transições inversas e modelos capazes de descrever aspectos gerais do fenômeno serão discutidos no capítulo 2. O modelo de VS com clusters é analisado no capítulo 3 em duas versões: uma versão clássica utilizando spins de Ising e uma versão fermiônica com campo transversal. Os resultados obtidos a partir deste modelo são apresentados no capítulo 4. No capítulo 5 são discutidas as considerações finais desta tese.

# 1 VIDRO DE SPIN

Neste capítulo são apresentadas as características gerais encontradas em sistemas físicos de vidro de spin (VS) e alguns modelos teóricos sugeridos para a descrição dessa fase. Primeiramente, a seção 1.1 descreve os principais aspectos experimentais existentes em materiais VS. Em seguida, seção 1.2, alguns modelos teóricos de VS relevantes para o prosseguimento desta tese são discutidos.

## 1.1 CARACTERIZAÇÃO EXPERIMENTAL DA FASE VIDRO DE SPIN

Sistemas físicos vidro de spin são encontrados em uma vasta quantidade de materiais e apresentam características próprias. Esta fase é caracterizada pelo congelamento aleatório de seus momentos magnéticos abaixo da temperatura de transição  $T_f$  (BINDER; YOUNG, 1986; FISCHER; HERTZ, 1991). Outra característica importante é a ausência de ordem de longo-alcance usual, diferenciando-a de uma ordem ferromagnética ou antiferromagnética, por exemplo. Experimentalmente, o pico agudo encontrado no gráfico da susceptibilidade magnética  $\chi$  em função da temperatura  $T$ , a campos magnéticos fracos, é utilizado para apontar  $T_f$  (FISCHER; HERTZ, 1991). Essa característica pode ser observada na figura 1.1, onde é apresentada a curva de  $\chi$  para a liga  $\text{CeNi}_{1-x}\text{Cu}_x$ , caracterizada como um sistema de VS com clusters (MARCANO et al., 2007).

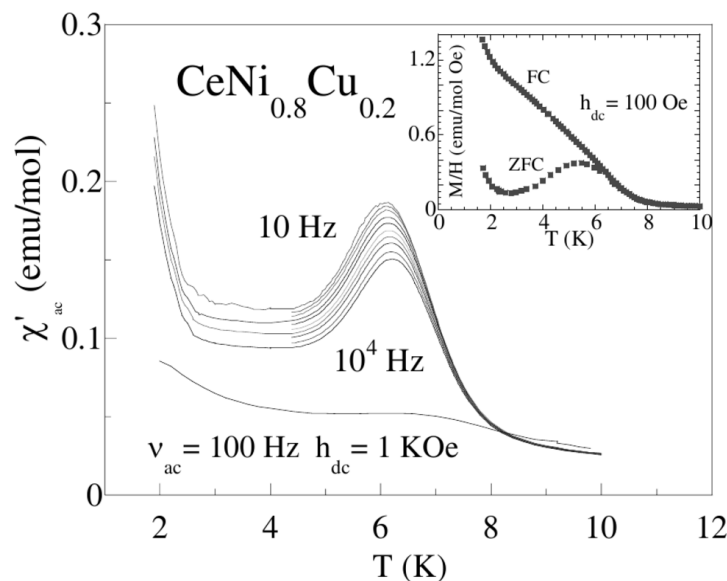


Figura 1.1: Gráficos de  $\chi$  em função de  $T$  para o sistema de  $\text{CeNi}_{0.8}\text{Cu}_{0.2}$ . No detalhe são apresentadas as curvas da magnetização à ZFC e à FC para o sistema (MARCANO et al., 2007).

Além do pico em  $T_f$ , observa-se uma dependência deste pico com a frequência do campo magnético aplicado, ou seja, o pico é deslocado para temperaturas mais baixas com a diminuição da frequência do campo aplicado (MYDOSH, 1996).

Clusters de spins são conjuntos, aglomerados de spins que se formam quando a concentração de momentos magnéticos é suficientemente alta, aumentando a possibilidade de se desenvolver correlações de curto-alcance entre os mesmos. Esses clusters atuam como unidades magnéticas interagindo entre si. A baixas temperaturas, os clusters podem congelar-se desordenadamente, entrando em uma fase VS com clusters (MARCANO et al., 2007). Pode-se diferenciar o comportamento de um sistema VS com clusters de um VS canônico através de medidas macroscópicas, como a curva da magnetização (detalhe da figura 1.1) (MARCANO et al., 2007) e, principalmente, através de medidas microscópicas, como difração magnética de nêutrons, espectroscopia de múons, entre outros, que produzem medidas magnéticas locais (MARCANO et al., 2007; MARCANO, 2004).

Em conjunto, efeitos de histerese, remanência magnética (que decai lentamente com o tempo (DOTSENKO, 1996)) e efeito de irreversibilidade da magnetização e da susceptibilidade DC abaixo de  $T_f$  também são características encontradas em sistemas físicos de VS (BINDER; YOUNG, 1986). O efeito de irreversibilidade da magnetização é exibido na figura 1.2, na qual é apresentado o gráfico da magnetização DC em função da temperatura para o composto AgMn, que pode ser realizado em dois ciclos diferentes. No ciclo (1  $\rightarrow$  2  $\rightarrow$  3  $\rightarrow$  4  $\rightarrow$  5) o sistema é resfriado sem campo externo aplicado. Este procedimento é chamado de resfriamento a campo nulo (abreviado do inglês para ZFC).

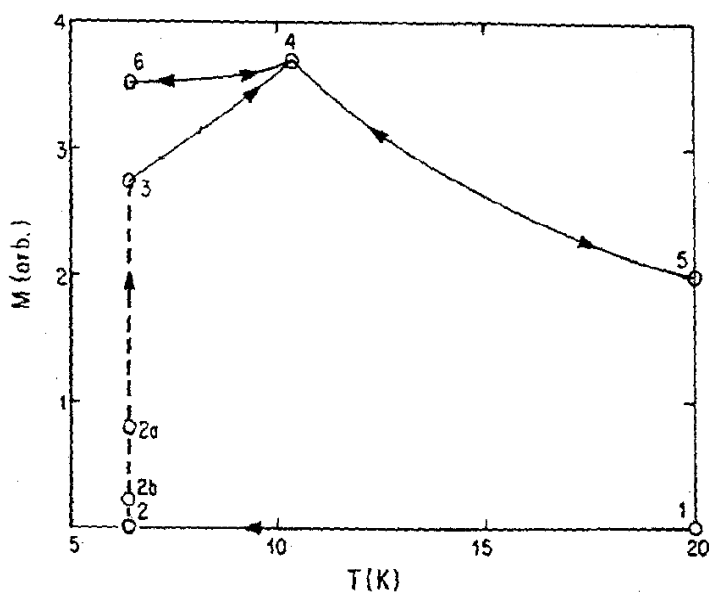


Figura 1.2: Gráfico da magnetização em função de  $T$  para o composto AgMn (2.6%). O ciclo (1  $\rightarrow$  2  $\rightarrow$  3  $\rightarrow$  4  $\rightarrow$  5) refere-se ao procedimento ZFC, e o ciclo (5  $\rightarrow$  4  $\rightarrow$  6  $\rightarrow$  4  $\rightarrow$  5) ao procedimento FC (MYDOSH, 1996).

Primeiramente, resfria-se a amostra de  $T \gg T_f$  até  $T \ll T_f$  ( $1 \rightarrow 2$ ), em seguida aplica-se um campo DC baixo e a magnetização assume valores positivos ( $2 \rightarrow 3$ ), a temperatura aumenta e a curva da magnetização segue o caminho ( $3 \rightarrow 4 \rightarrow 5$ ). Quando resfria-se a amostra, porém com campo externo constante aplicado, a magnetização segue o percurso ( $5 \rightarrow 4$ ), entretanto, para  $T < T_f$ , ela segue ( $4 \rightarrow 6$ ), sendo praticamente independente da temperatura (MYDOSH, 1996). Este procedimento é conhecido como resfriamento com campo (do inglês FC). Tal comportamento difere do mostrado no detalhe da figura 1.1 para um VS com clusters, onde a curva FC é dependente da temperatura. Esta diferença no comportamento da curva da magnetização FC é uma das características utilizadas para identificar uma fase VS com clusters (MARCANO et al., 2007).

Uma quantidade termodinâmica muito relevante para esta tese é o calor específico. O comportamento do calor específico  $C_v$  em função da temperatura  $T$  para um VS canônico é caracterizado por um máximo arredondado a uma temperatura  $T^*$  acima da temperatura de transição  $T_f$ , onde  $T^* \sim 1.2 - 1.4 T_f$ . Além disso, na temperatura de transição não observa-se nenhuma anomalia. Isto porque, aparentemente, uma considerável quantidade de graus de liberdade dos spins congelam acima de  $T_f$ , na região onde surge o máximo, que pode ser devido à formação de ordem de curto-alcance (FISCHER; HERTZ, 1991). Na figura 1.3(a) é apresentado o gráfico do calor específico em função da temperatura para o VS canônico CuMn. Nesta figura, observa-se também que, o aumento do campo magnético externo aumenta a largura do máximo de  $C_v$  (BINDER; YOUNG, 1986).

O composto  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$  é conhecido como uma realização experimental de spins de Ising, onde a presença de um campo magnético externo transversal ao eixo magnético leva à uma transição de fase quântica em  $T = 0\text{K}$  (SACHDEV, 1999; WU; BITKO; ROSENBAUM; AEPPLI, 1993; GINGRAS; HENELIUS, 2011). Para concentrações intermediárias de Ho (por exemplo,  $x = 0.167$ , mostrado na figura 1.3(b)), o composto apresenta comportamento VS com transição à temperatura  $T_f = 0.13\text{K}$  (WU; BITKO; ROSENBAUM; AEPPLI, 1993). O gráfico do calor específico para esta concentração apresenta um máximo arredondado à uma temperatura  $T^* = 0.18\text{K}$ , cerca de 20% acima de  $T_f$  (REICH et al., 1990). Isto significa que, para concentrações de Ho intermediárias, o comportamento do  $C_v$  é o esperado para um sistema físico de VS (BINDER; YOUNG, 1986). Entretanto, para baixas concentrações não há um consenso sobre a natureza do sistema. Por exemplo, na ref. (GHOSH; ROSENBAUM; AEPPLI; COPPERSMITH, 2003), para concentração  $x = 0.045$ , a curva do calor específico apresenta dois picos e a curva da susceptibilidade apresenta um comportamento tipo lei de potência, onde o autor sugere ser uma consequência direta de um campo magnético transversal interno (GHOSH; ROSENBAUM; AEPPLI; COPPERSMITH, 2003). Diferentemente, na ref. (QUILLIAM; MUGFORD; GOMEZ; KYCIA; KYCIA, 2007), para esta mesma concentração, encontra-se uma transição à fase VS em  $T_f \approx 0.043\text{K}$  e a curva do calor específico exibe um máximo ar-

redondado à temperatura  $T^* \approx 0.13K$  (figura 1.3(c)) (QUILLIAM; MENG; MUGFORD; KYCIA, 2008). Portanto, neste trabalho é encontrado uma diferença entre  $T^*$  e  $T_f$  muito maior do que os 20% usuais para um VS.

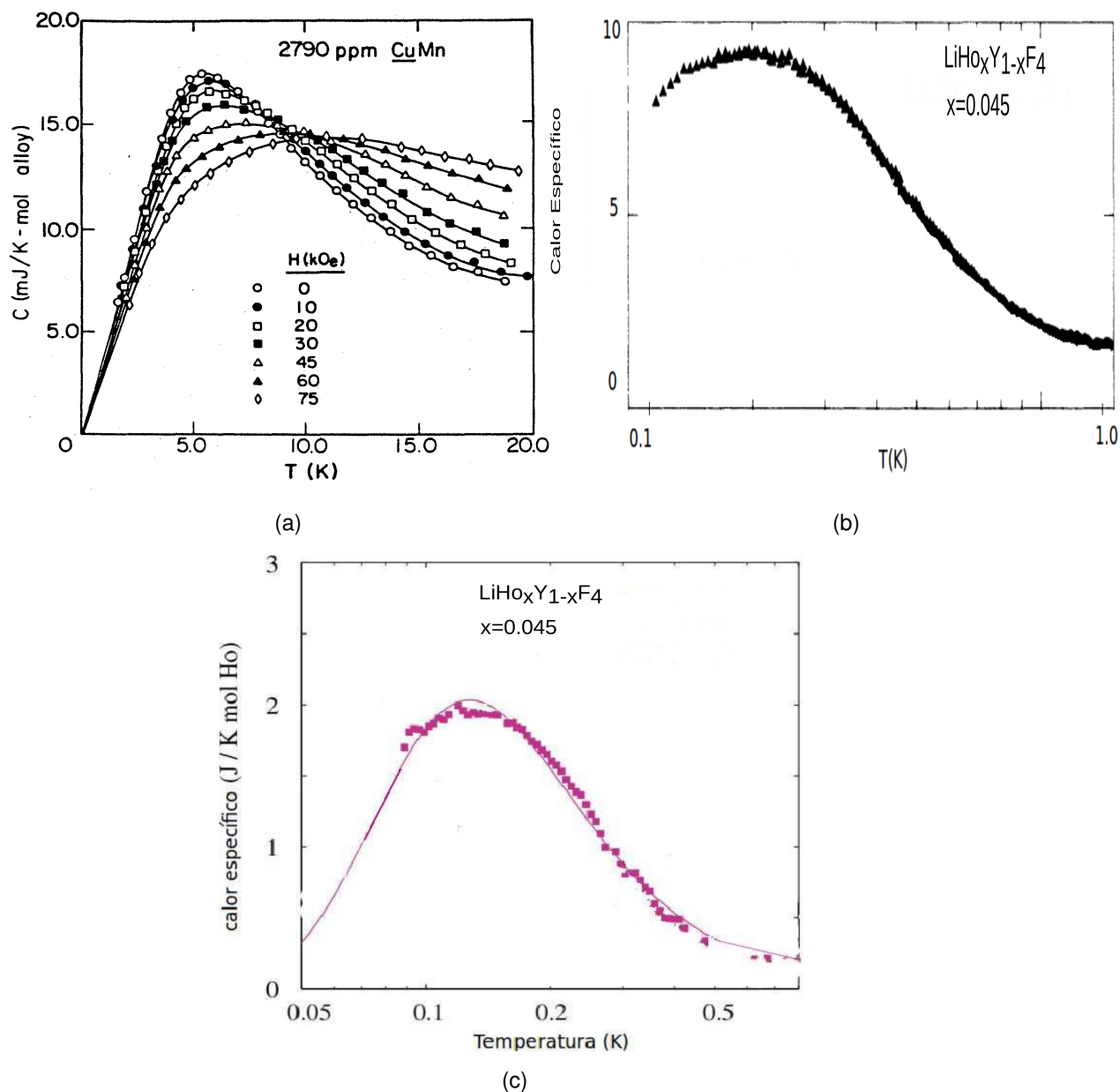


Figura 1.3: (a) Gráficos do  $C_v$  em função de  $T$  para o sistema de CuMn com 2.79% de Mn (BINDER; YOUNG, 1986; FISCHER; HERTZ, 1991), (b) para o composto  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$  com concentração de Ho igual a  $x = 0.167$ , com máximo em  $T^* = 0.18K$  (REICH et al., 1990) e (c) para  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$  com concentração de Ho  $x = 0.045$  (QUILLIAM; MUGFORD; GOMEZ; KYCIA; KYCIA, 2007).

Após esta breve caracterização experimental do comportamento do VS, é descrito como um sistema pode apresentar este estado. Dentre os materiais que apresentam a fase vidro de spin, destacam-se metais nobres (Au, Ag, Cu, Pt) em que são diluídos íons de metais de transição, tais como Fe ou Mn, que são considerados impurezas magnéti-

cas. Os momentos das impurezas produzem uma polarização dos elétrons de condução do metal hospedeiro ao seu redor, a qual é positiva para algumas distâncias e negativa para outras. Quando se adiciona outra impureza, o spin da impureza sofre a ação de um campo magnético local gerado pela polarização dos elétrons de condução do hospedeiro, tendendo a alinhar-se ao longo desse campo. Como as impurezas estão dispostas aleatoriamente, algumas das interações são positivas, favorecendo o alinhamento paralelo dos momentos magnéticos (ferromagnético) e outras negativas, favorecendo o alinhamento antiparalelo dos momentos (antiferromagnético). Assim, o espalhamento dos elétrons de condução pela presença dos spins das impurezas leva a uma interação de troca indireta, conhecida como RKKY <sup>1</sup>. Considerando a interação RKKY entre os momentos magnéticos aleatoriamente distribuídos, não é possível encontrar um único alinhamento dos spins que satisfaça simultaneamente todos os vínculos. Com isso, o sistema apresenta outra característica fundamental: frustração gerada por desordem. Portanto, os materiais VS apresentam desordem na posição das impurezas e competição nas interações (frustração), ingredientes fundamentais para produzir um estado VS.

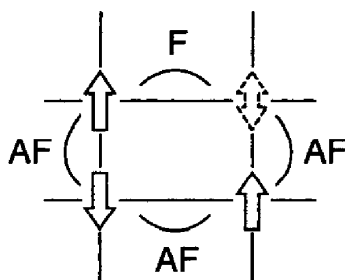


Figura 1.4: Representação esquemática de uma rede quadrada frustrada (RAMIREZ, 1994).

O conceito de frustração pode ser melhor entendido com o exemplo da figura 1.4, onde spins de Ising estão dispostos em uma rede quadrada com interações ferromagnéticas F e antiferromagnéticas AF (RAMIREZ, 1994). Nesta figura, observa-se que não é possível satisfazer as quatro interações ao mesmo tempo, pois o spin do topo do lado direito não obedece as duas interações de seus vizinhos mais próximos simultaneamente: obedecendo a interação com o spin da esquerda, ele deveria estar orientado para cima. Porém, de acordo com a interação do spin de baixo, deveria apontar para baixo. Logo, há um conflito de interações e os dois estados são igualmente possíveis. Deste modo, uma rede frustrada possui mais de uma configuração igualmente possível para o mesmo estado. Este é um tipo de frustração que deve-se às interações desordenadas, ou seja, esta frustração é gerada a partir de desordem. Um outro tipo de frustração que merece destaque é a frustração geométrica, onde sua origem deve-se à geometria da rede. Na figura 1.5 são apresentados dois exemplos de redes geometricamente frustradas: a rede

<sup>1</sup>A denominação RKKY deve-se aos autores que estudaram esse tipo de interação: Ruderman, Kittel, Kasuya e Yosida (FISCHER; HERTZ, 1991).

triangular (figura 1.5(a)) e a rede de Kagomé (figura 1.5(b)). Nas figuras 1.5(a) e 1.5(b) observa-se que para interações entre primeiros vizinhos antiferromagnéticas, as interações tornam-se frustradas, produzindo várias configurações possíveis (LACROIX, 2010).

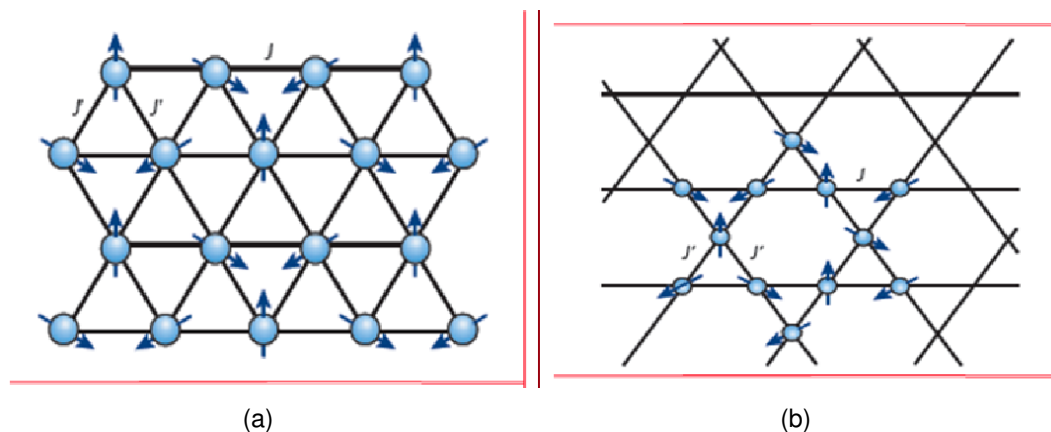


Figura 1.5: Exemplos de redes geometricamente frustradas:(a) rede triangular e (b) rede de Kagomé .

A desordem e a frustração (vinda da desordem) juntas levam o sistema a um estado fundamental multidegenerado, onde existem vários mínimos locais de energia separados por barreiras de energia livre, relacionados à quebra de ergodicidade (DOTSENKO, 1996). Logo, é c

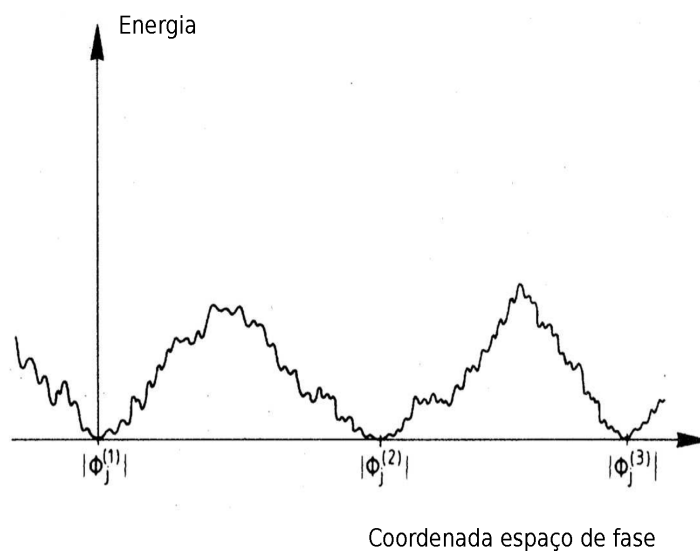


Figura 1.6: Espaço de fase representativo de um vidro de spin (BINDER; YOUNG, 1986).

Acima de  $T_f$  o sistema é ergódico <sup>2</sup>, abaixo dessa temperatura ocorre a quebra de ergodicidade, onde o espaço de fases é dividido em muitos vales separados por barreiras infinitamente altas de energia livre (no limite termodinâmico), tornando o estado fundamental altamente degenerado, e onde os vales são termodinamicamente inacessíveis uns

<sup>2</sup>Um sistema em equilíbrio é ergódico quando se encontra com uma probabilidade proporcional a  $\exp(-E/kT)$  em qualquer de suas configurações possíveis do espaço de fase (PATHRIA, 1996).

aos outros (DOTSENKO, 1996). Essa representação do espaço de fase é denominada de "picture" de muitos vales e está representada na figura (1.6) (BINDER; YOUNG, 1986). À uma temperatura  $T = T_f - \delta T$  cada vale é dividido novamente em novos vales menores separados também por barreiras infinitas de energia livre. Então, a cada diminuição da temperatura na fase VS, novas quebras de ergodicidade acontecem em cada vale e isso leva a uma sequência contínua de quebra de ergodicidade abaixo de  $T_f$  (DOTSENKO, 1996).

## 1.2 MODELOS TEÓRICOS DE VIDRO DE SPIN

Desde a descoberta do estado magnético vidro de spin, diversos modelos teóricos foram desenvolvidos com o intuito de descrever o comportamento dessa fase. Nesta seção, são discutidos alguns dos modelos mais relevantes para o prosseguimento desta tese. A seção 1.2.1 apresenta um dos modelos mais simples para o VS: o modelo clássico de alcance-infinito sugerido por Sherrington-Kirkpatrick (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978). A seção 1.2.2 é reservada para discutir um modelo clássico de VS com clusters considerando interações desordenadas entre clusters distintos e interações de curto-alcance entre spins pertencentes ao mesmo cluster, proposto por Soukoulis e Levin (SOUKOULIS; LEVIN, 1978). Na seção 1.2.3, é discutido um modelo de VS de Ising com campo transversal em uma formulação fermiônica. Esse modelo apresenta flutuações quânticas introduzidas através do campo transversal (THEUMANN; SCHMIDT; MAGALHAES, 2002).

### 1.2.1 Vidro de Spin Clássico

Edwards e Anderson (EDWARDS; ANDERSON, 1975) propuseram um modelo no qual, em lugar da aleatoriedade nas posições dos spins, as interações de troca são desordenadas. Posteriormente, Sherrington e Kirkpatrick (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978) tornaram a teoria de Edwards e Anderson exatamente solúvel, assumindo interações desordenadas de longo-alcance entre os spins.

O modelo teórico sugerido por Sherrington-Kirkpatrick (modelo SK) para estudo do vidro de spin (VS) tem sido amplamente considerado por ser um modelo com solução exata e fornecer uma descrição a nível de campo médio para o estado magnético VS. O Hamiltoniano do modelo SK pode ser descrito por (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978):

$$H = - \sum_{(i,j)} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i, \quad (1.1)$$



onde a soma é realizada sobre todos os pares de spins,  $h$  é um campo magnético externo, e as interações de troca são representadas por variáveis aleatórias independentes, que seguem uma distribuição de probabilidade gaussiana dada por:

$$P(J_{ij}) = [(2\pi)^{1/2}J]^{-1} \exp \left\{ \frac{-J_{ij}^2}{2J^2} \right\}. \quad (1.2)$$

No modelo (1.1),  $S_i$  representam variáveis clássicas de spin de Ising, que podem assumir valores 1. Para que um modelo seja capaz de descrever a fase VS, é necessário que ele apresente os ingredientes fundamentais para a existência da fase: desordem e conseqüente frustração, como discutido na seção 1.1. A desordem é garantida através das variáveis aleatórias  $J_{ij}$  e a frustração devido à distribuição de probabilidades de  $J_{ij}$ , que podem assumir valores tanto positivos quanto negativos.

Para obter informações termodinâmicas do modelo (1.1), é necessário realizar dois tipos de médias: a média termodinâmica usual e a média sobre as variáveis aleatórias  $J_{ij}$ , chamada média configuracional. A média configuracional deve ser realizada sobre a energia livre  $F$ , pois esta é uma grandeza extensiva e portanto, auto-mediável (DOTSENKO, 1996). Isto quer dizer que os resultados obtidos desta média representam os resultados observados experimentalmente. Porém, o cálculo da média sobre  $F$  não é simples de ser realizado. Para contornar este problema, Edwards e Anderson propuseram o método das réplicas (EDWARDS; ANDERSON, 1975). Entretanto, este método tem como custo aumentar a dimensionalidade efetiva de spins e usar procedimentos para transformar a média sobre a energia livre em uma média sobre a função de partição, que essencialmente consiste na identidade matemática (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978):

$$\ln x = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{x^n - 1}{n}, \quad (1.3)$$

no caso de interesse,  $x$  é a função de partição  $Z$ . Para  $n$  inteiro,  $Z^n$  pode ser expresso por

$$Z^n = \prod_{\alpha=1}^n Z_\alpha = Z^1 \cdot Z^2 \cdot Z^3 \cdot \dots \cdot Z^\alpha, \quad (1.4)$$

onde  $\alpha$  rotula as réplicas e  $Z^n$  é a função de partição replicada. Desta forma, tem-se  $n$  réplicas idênticas e não-interagentes do sistema. Neste procedimento realiza-se todos os cálculos analíticos supondo  $n$  inteiro e positivo, e toma-se o limite de  $n \rightarrow 0$  nos últimos passos da técnica (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978). Utilizando o método descrito acima, pode-se escrever a energia livre por sítio ( $f = \frac{F}{N}$ ) como:

$$f = -\frac{1}{\beta} \lim_{n \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{Nn} \left[ \int dJ_{ij} P(J_{ij}) Z^n - 1 \right], \quad (1.5)$$

onde  $Z^n = \prod_{\alpha=1}^n Z_\alpha$ , com  $Z_\alpha$  sendo a função de partição de cada réplica, dada por:

$$Z_\alpha = Tr \int dJ_{ij} P(J_{ij}) e^{-\beta H_\alpha}, \quad (1.6)$$

$Tr$  é o traço, e o Hamiltoniano de cada réplica sendo igual a equação (1.1) com o subíndice  $\alpha$ . Sendo assim, a função de partição das  $n$  réplicas pode ser escrita:

$$\begin{aligned} \langle Z_n \rangle_{J_{ij}} = Tr \int \frac{dJ_{ij}}{(2\pi J^2)^{1/2}} \exp \left\{ - \sum_{ij} \frac{1}{2} \left( \frac{J_{ij} - J_0}{J} \right)^2 - \right. \\ \left. - \sum_{\alpha} \beta \left[ - \sum_{ij} J_{ij} S_i^\alpha S_j^\alpha - h \sum_i S_i^\alpha \right] \right\}. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Para calcular a média sobre  $J_{ij}$ , a expressão anterior é reescrita na forma de quadrado perfeito. Desta forma, é possível calcular a integral sobre as variáveis aleatórias acima e a energia livre por spin fica:

$$\begin{aligned} f = -\frac{1}{\beta} \lim_{n \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{Nn} \left\{ Tr \exp \left[ \beta \sum_{\alpha} \sum_{ij} S_i^\alpha S_j^\alpha J_0 + \sum_{\alpha < \beta} \frac{J^2 \beta^2}{2} S_i^\alpha S_j^\alpha S_i^\beta S_j^\beta + \right. \right. \\ \left. \left. + h\beta \sum_{\alpha} \sum_i S_i^\alpha \right] - 1 \right\}. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Reformulando de forma conveniente a equação (1.8), encontra-se:

$$\begin{aligned} f = -\frac{1}{\beta} \lim_{n \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{Nn} \left\{ Tr \exp \left[ \frac{1}{2} \beta \sum_{\alpha} \left( \sum_i S_i^\alpha \right)^2 J_0 - \frac{1}{2} \beta J_0 n N + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{J^2 \beta^2}{2} \sum_{\alpha < \beta} \left( \sum_i S_i^\alpha S_i^\beta \right)^2 + \frac{J^2 \beta^2}{4} (N^2 n - N n^2) + h\beta \sum_{\alpha} \sum_i S_i^\alpha \right] - 1 \right\}. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Ainda é preciso linearizar os termos quadráticos da equação (1.9). Esta linearização é feita utilizando a igualdade (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978):

$$\exp(\lambda a^2) = (2\pi)^{-1/2} \int dx \exp \left[ -\frac{1}{2} x^2 + (2\lambda)^{1/2} a x \right]. \quad (1.10)$$

Esta igualdade consiste em substituir os termos de interação do Hamiltoniano por campos auxiliares que se acoplam aos spins. Utilizando-a nos termos quadráticos da equação

(1.9), obtêm-se:

$$\begin{aligned}
f = & -\frac{1}{\beta} \lim_{n \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{Nn} \left\{ \exp \frac{\tilde{J}^2}{4} \beta^2 Nn \int \left( \prod_{\alpha} \sqrt{\frac{2\pi}{N}} dx^{\alpha} \right) \left( \prod_{\alpha < \gamma} \sqrt{\frac{2\pi}{N}} dy^{\alpha} \right) \times \right. \\
& \times \exp \left\{ -N \left[ \sum_{\alpha} \frac{1}{2} (x^{\alpha})^2 + \sum_{\alpha < \gamma} \frac{1}{2} (y^{\alpha\gamma})^2 - \right. \right. \\
& \left. \left. - \ln Tr \exp \left( \sqrt{\tilde{J}_0 \beta} \sum_{\alpha} x^{\alpha} S^{\alpha} + \tilde{J} \beta \sum_{\alpha < \gamma} y^{\alpha\gamma} S^{\alpha} S^{\gamma} \right) \right] - 1 \right\} \left. \right\}. \quad (1.11)
\end{aligned}$$

onde  $x^{\alpha}$  e  $y^{\alpha\gamma}$  são os campos auxiliares introduzidos através da linearização. Para que as variáveis  $J$  e  $J_0$  tenham sentido físico adequado a seguinte parametrização foi realizada:  $J_0 = \frac{\tilde{J}_0}{N}$  e  $J = \frac{\tilde{J}}{\sqrt{N}}$ , assim, ambas as variáveis são intensivas. Têm-se agora um problema efetivo de  $n$  réplicas e de um único sítio, porém com interações entre réplicas. Como uma primeira aproximação, considera-se que todas as réplicas são iguais, isto é, que o problema tem simetria de réplicas (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978):

$$x^{\alpha} = x_n = m_n \sqrt{\tilde{J}_0 \beta} \quad \text{e} \quad y^{\alpha\gamma} = y_n = q_n \tilde{J} \beta. \quad (1.12)$$

Com estas substituições e somando sobre os índices de réplicas, a equação (1.11), fica:

$$\begin{aligned}
f = & -\frac{1}{\beta} \lim_{n \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{Nn} \left\{ \exp \frac{\tilde{J}^2}{4} \beta^2 Nn \int \left( \sqrt{\frac{2\pi\beta\tilde{J}_0}{N}} dm_n \right) \left( \sqrt{\frac{2\pi}{N}} \beta \tilde{J} dq_n \right) \times \right. \\
& \times \exp \left\{ -N \left[ \frac{n}{2} m_n^2 \beta \tilde{J}_0 + \frac{n(n-1)}{2} q_n^2 \beta^2 \tilde{J}^2 - \right. \right. \\
& \left. \left. - \ln Tr \exp \left( h\beta S_n + \tilde{J}_0 \beta m_n S_n + \beta^2 \tilde{J}^2 q_n (\sum_{\alpha} S)^2 \right) \right] \right\} - 1 \left. \right\}. \quad (1.13)
\end{aligned}$$

Linearizando o termo  $(\sum_{\alpha} S)^2$ , usando novamente a identidade (1.10), obtêm-se:

$$\begin{aligned}
f = & -\frac{1}{\beta} \lim_{n \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{Nn} \left\{ \exp \frac{\tilde{J}^2}{4} \beta^2 Nn \int \left( \sqrt{\frac{2\pi\beta\tilde{J}_0}{N}} dm_n \right) \left( \sqrt{\frac{2\pi}{N}} \beta \tilde{J} dq_n \right) \times \right. \\
& \times \exp \left\{ -N \left[ \frac{n}{2} m_n^2 \beta \tilde{J}_0 + \frac{n(n-1)}{2} q_n^2 \beta^2 \tilde{J}^2 \right] \times \right. \\
& \left. \times \frac{n}{\sqrt{2\pi}} \int dz e^{(-1/2z^2)} \ln (2 \cosh \Xi) \right\} - 1 \left. \right\}, \quad (1.14)
\end{aligned}$$

onde foi calculado o traço sobre  $S_i = Tr \exp(\Xi S) = \exp(+\Xi) + \exp(-\Xi) = 2 \cosh(\Xi)$ , com  $\Xi = (h\beta + \tilde{J}_0 \beta m_n + \tilde{J} \beta \sqrt{q_n} z)$ . No limite termodinâmico, as integrais acima podem ser calculadas utilizando o método ponto de sela (DOTSENKO, 1996). Tomando o limite

$n \rightarrow 0$ , encontramos os parâmetros de ordem:

$$m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dz e^{-1/2z^2} (\tanh \Xi), \quad (1.15)$$

que representa a magnetização do sistema, e

$$q = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dz e^{-1/2z^2} (\tanh^2 \Xi), \quad (1.16)$$

que representa o parâmetro de ordem vidro de spin. Também é possível escrever  $m$  e  $q$  da forma:

$$m = \langle \langle S_i \rangle \rangle_{J_{ij}} \quad e \quad q = \langle \langle S_i \rangle^2 \rangle_{J_{ij}}, \quad (1.17)$$

onde  $\langle \dots \rangle$  significa a média termodinâmica e  $\langle \dots \rangle_{J_{ij}}$  a média configuracional. Para  $q$  e  $m$  não nulos simultaneamente, têm-se ordem ferromagnética. Para que ocorra a fase vidro de spin, é necessário que  $m = 0$  e  $q \neq 0$  (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978). A fase paramagnética é encontrada quando ambos  $q$  e  $m$  são nulos ( $q = m = 0$ ).

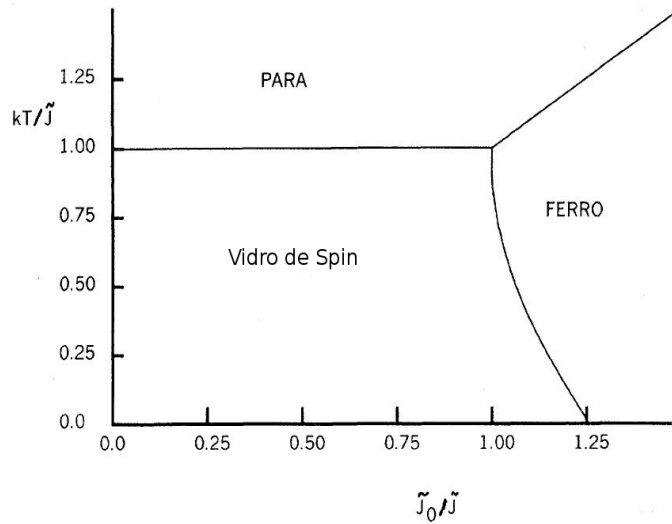


Figura 1.7: Diagramas de fase magnético para o modelo SK (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978).

Como resultado deste modelo, Sherrington e Kirkpatrick obtiveram o diagrama de fase magnético exibido na figura 1.7. Diminuindo a temperatura a partir de uma fase paramagnética chega-se à uma fase ferromagnética, para  $\tilde{J}_0 > \tilde{J}$  e à uma fase vidro de spin para  $\tilde{J} > \tilde{J}_0$ .  $\tilde{J}$  está relacionado a largura da gaussiana, ou seja, representa a desordem do sistema, e  $\tilde{J}_0$  com o valor médio de  $J_{ij}$ , isto é, com a interação média ferromagnética (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978). Os autores também obtiveram grandezas termodinâmicas, tais como calor específico, energia interna e entropia. Porém, as aproximações utilizadas para solução do modelo SK geram problemas em alguns resultados

termodinâmicos, como para a entropia do sistema. Devido à aproximação de simetria de réplicas, encontra-se uma entropia negativa na fase VS, o que é fisicamente inaceitável pois viola a segunda lei da termodinâmica. Isso ocorre pois, como mostrado por de Almeida e Thouless, a solução com simetria de réplicas produz resultados termodinamicamente instáveis em toda a fase VS (ALMEIDA; THOULESS, 1978). Entretanto, Parisi propôs um método de quebra de simetria de réplicas no qual a estabilidade da solução VS é restabelecida com infinitos passos de quebra de simetria, onde a entropia deixa de ser negativa (PARISI, 1980). Além do problema observado na entropia do modelo SK, outras quantidades termodinâmicas, como o calor específico, não apresentam o comportamento esperado para um sistema VS. Os resultados experimentais para o calor específico, como mostrado na seção 1.1, apresentam um máximo arredondado a uma temperatura  $T^*$  acima da temperatura de transição  $T_f$ . O resultado obtido a partir do modelo SK mostra um máximo abaixo de  $T_f$ . Portanto, o modelo SK, apesar de ser um dos modelos mais simples para a descrição do VS, apresenta deficiências na descrição das quantidades termodinâmicas.

### 1.2.2 Modelo Clássico de Vidro de Spin com Clusters

Um modelo proposto para melhorar a descrição termodinâmica do VS foi sugerido por Soukoulis e Levin (SOUKOULIS, 1978). Os autores propuseram um modelo que contém interações de curto-alcance, onde clusters correlacionados (ao invés de spins individuais, como no modelo SK) são as entidades magnéticas básicas (SOUKOULIS; LEVIN, 1978). Nesse modelo, pode-se considerar interações intracluster, ou seja, interações entre momentos magnéticos dentro de um mesmo cluster. O modelo considera também interações aleatórias de troca entre momentos magnéticos de clusters distintos que seguem uma distribuição de probabilidades gaussiana com média zero e variância  $J^2/N_{cl}$ . Em particular, Soukoulis propôs um modelo de VS com clusters no qual os spins são tratados como variáveis clássicas de spins de Ising, que podem assumir valores  $\pm 1$  (SOUKOULIS, 1978).

O Hamiltoniano que representa o modelo clássico de Soukoulis no estudo do VS com clusters é dado por

$$H = - \sum_{\nu < \lambda}^{N_{cl}} J_{\nu\lambda} S_{\nu} S_{\lambda} - \sum_{\nu=1}^{N_{cl}} \sum_{i < j}^{N_{sp}} J_{ij}^0 S_{i\nu} S_{j\lambda} , \quad (1.18)$$

onde  $J_{ij}^0$  são interações de troca entre spins dentro do cluster (interação intracluster),  $J_{\nu\lambda}$  variáveis aleatórias de interação de troca entre clusters (interação intercluster),  $N_{cl}$  é o número de clusters do sistema e  $N_{sp}$  o número de spins dentro de um mesmo cluster. Neste trabalho, considera-se que todos os clusters têm o mesmo tamanho  $N_{sp}$ . Nessa notação,

índices gregos referem-se a clusters e índices romanos a spins dentro do cluster (SOUKOULIS, 1978). Assim, o momento magnético do cluster  $\nu$  é dado por:  $S_\nu = \sum_i^{N_{sp}} S_{i\nu}$ , onde  $S_{i\nu} = \frac{1}{2}$ . Para o cálculo da energia livre são realizadas a média termodinâmica usual e a média configuracional, isto é, média sobre as variáveis aleatórias  $J_{\nu\lambda}$ , que é dada pela média configuracional do logaritmo da função de partição, como discutido na seção 1.2.1, assim,

$$\beta F = -\frac{1}{N_{cl}} \langle \ln Z(J_{\nu\lambda}) \rangle_{J_{\nu\lambda}}. \quad (1.19)$$

Como no modelo clássico de Sherrington-Kirkpatrick (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978), é utilizado o método das réplicas, com aproximação de simetria de réplicas, para tratar a desordem e são seguidos procedimentos semelhantes aos adotados na seção 1.2.1 para obtenção da energia livre dentro de uma teoria de campo médio (DOTSENKO, 1996; SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978).

Através do tratamento analítico, o problema original reduz-se a um problema efetivo de um único cluster. No limite termodinâmico ( $N_{cl} \rightarrow \infty$ ), as integrais sobre os campos auxiliares  $q_{\alpha\gamma}$  podem ser calculadas através do método ponto de sela  $\frac{\partial f}{\partial q_{\alpha\gamma}} = 0$ , assim:

$$q_{\alpha\gamma} = \frac{1}{N_{cl}} \langle \sum_\nu S_\nu^\alpha S_\nu^\gamma \rangle, \quad (1.20)$$

para  $\alpha \neq \gamma$ , e

$$q_{\alpha\alpha} = \frac{1}{N_{cl}} \langle \sum_\nu S_\nu^\alpha S_\nu^\alpha \rangle, \quad (1.21)$$

para  $\alpha = \gamma$ , onde os campos  $q_{\alpha\gamma}$  estão associados aos parâmetros de ordem VS, análogo ao parâmetro de ordem VS do modelo SK (1.2.1), e a correlação  $q_{\alpha\alpha}$  está associada ao momento magnético total do cluster.

Assumindo a aproximação de simetria de réplicas, encontram-se os parâmetros de ordem:

$$M = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2/2} \frac{\text{Tr} S_\nu^2 e^{-\beta H_{eff}}}{Z}, \quad (1.22)$$

que está relacionado ao momento magnético total do cluster, e

$$M - q = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2/2} x \frac{1}{\beta J \sqrt{q}} \frac{\text{Tr} S_\nu e^{-\beta H_{eff}}}{Z}, \quad (1.23)$$

onde  $q$  é o parâmetro de ordem VS usual,  $Z$  é a função de partição e  $H_{eff}$  é o modelo efetivo de um único cluster, com  $H_{eff} = -\sum_{i<j} J_{ij}^o S_{i\nu} S_{j\nu} - \beta J^2 \sqrt{q} S_\nu x + \beta J^2 (M - \frac{q}{2}) S_\nu^2$  (SOUKOULIS, 1978). O tratamento desse problema efetivo é feito numericamente usando técnicas de diagonalização exata, em particular, este modelo efetivo é diagonal na base dos spins de Ising.

Como resultados importantes, o modelo apresenta uma melhoria na curva do calor

específico ( $C_v$ ) em função da temperatura. A curva do  $C_v$  pode apresentar um máximo acima da temperatura de transição  $T_f$ , comportamento que é observado experimentalmente em sistemas reais VS (SOUKOULIS; LEVIN, 1978), como discutido na seção 1.1. O comportamento da susceptibilidade linear  $\chi$  em função da temperatura também está de acordo com os resultados experimentais, ou seja,  $\chi$  exibe um pico agudo em  $T_f$ .

### 1.2.3 Vidro de Spin Fermiônico em um Campo Transverso

A descrição do vidro de spin com dinâmica quântica tem sido objeto de muitos estudos. Um modelo dessa natureza muito utilizado é o modelo fermiônico de VS de Ising na presença de um campo magnético transverso (THEUMANN; SCHMIDT; MAGALHAES, 2002; ZIMMER; MAGALHAES, 2006, 2007; MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2008; ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010). Esse modelo apresenta dinâmica quântica, pois, o campo magnético aplicado transversalmente ao acoplamento de Ising é um termo não-comutativo, que tem a capacidade de inverter (flipar) os momentos magnéticos do sistema, fazendo com que os estados magnéticos puros se misturem, introduzindo assim as flutuações quânticas (SACHDEV, 1999). No modelo de VS quântico apresentado nesta seção, os operadores de spins são representados por combinações bilineares de operadores fermiônicos, conhecido como formalismo fermiônico para o modelo de VS (THEUMANN; SCHMIDT; MAGALHAES, 2002; THEUMANN; GUSMÃO, 1984). O tratamento do problema VS fermiônico segue a teoria de réplicas com aproximação de simetria de réplicas (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978) e, além disso, a aproximação estática é empregada (THEUMANN; SCHMIDT; MAGALHAES, 2002). A vantagem da formulação fermiônica é que ela tem uma aplicação natural nos problemas de matéria condensada, onde os operadores fermiônicos podem representar elétrons que participam de outros processos físicos, como supercondutividade e efeito Kondo (THEUMANN; SCHMIDT; MAGALHAES, 2002). Além disso, modelos de vidro de spin fermiônicos têm sido usados recentemente para o estudo das transições inversas, em particular para o estudo do congelamento inverso.

O modelo de vidro de spin fermiônico em um campo transverso é representado pelo Hamiltoniano

$$\hat{H} = - \sum_{ij} J_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - 2\Gamma \sum_i \hat{S}_i^x, \quad (1.24)$$

onde a soma é feita sobre todos os  $N$  sítios,  $\Gamma$  é o campo magnético transverso e  $J_{ij}$  são variáveis aleatórias de troca que seguem a distribuição de probabilidades gaussiana

$$P(J_{ij}) = \sqrt{\frac{N}{16\pi J^2}} \exp\left(-\frac{J_{ij}^2 N}{16J^2}\right). \quad (1.25)$$

Os operadores de spins da equação (1.24) são representados pelos operadores fermiônicos em segunda quantização por

$$\hat{S}_i^z = \frac{1}{2} [\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}] \quad \text{e} \quad \hat{S}_i^x = \frac{1}{2} [c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}] , \quad (1.26)$$

onde  $c_{i\sigma}^\dagger$  e  $c_{i\sigma}$  são os operadores fermiônicos de criação e destruição, respectivamente, com a projeção de spin  $\sigma = \uparrow$  ou  $\downarrow$ , e  $\hat{n}_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  é o operador número, que faz a contagem da ocupação do sítio. Sendo assim, o Hamiltoniano está definido no espaço de Fock com quatro estados por sítio: um estado sem férmion ( $|0\ 0\rangle$ ), dois estados com um férmion ( $|\uparrow\ 0\rangle$ ;  $|0\ \downarrow\rangle$ ) e um estado com dois férmions por sítio ( $|\uparrow\ \downarrow\rangle$ ). Logo, o operador  $\hat{S}^z$  possui quatro autovalores: dois magnéticos, quando o operador atua nos estados com um férmion por sítio, e dois não magnéticos, quando ele atua nos estados vazio ou duplamente ocupado. Assim, o modelo fermiônico difere dos modelos representados no espaço de spins, no qual o operador  $\hat{S}^z$  possui apenas os dois estados magnéticos ( $|\uparrow\ 0\rangle$ ,  $|0\ \downarrow\rangle$ ). O método apresentado nesta seção faz distinção entre dois modelos: um que permite os quatro estados por sítio, mas exige uma ocupação média de um férmion por sítio (THEUMANN; SCHMIDT; MAGALHAES, 2002; ROSENOW; OPPERMANN, 1996), e outro que admite somente os estados magnéticos, ou seja, restringe o operador  $\hat{S}^z$  a um subespaço equivalente ao espaço dos spins. O modelo que apresenta quatro estados por sítio é chamado de modelo irrestrito ou modelo 4S. Um modo de eliminar esses estados não-magnéticos foi proposto por Wiethege e Sherrington (WIETHEGE; SHERRINGTON, 1986) e posteriormente utilizado por Theumann et al. (THEUMANN; SCHMIDT; MAGALHAES, 2002) e consiste em fixar o número de ocupação em um férmion por sítio. Esse modelo é chamado de modelo restrito ou modelo 2S (WIETHEGE; SHERRINGTON, 1986). Esta restrição é imposta por meio de uma função delta de Kronecker, de modo que somente os estados onde  $n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow} = 1$  são permitidos.

Para calcular a energia livre e as demais quantidades termodinâmicas, as funções de partição dos dois modelos citados acima são analisadas. A função de partição no modelo 4S é dada por

$$Z_{4S} = \text{Tr} e^{-\beta\hat{H}} , \quad (1.27)$$

enquanto que no modelo 2S, uma restrição deve ser imposta de tal modo que somente os estados magnéticos são permitidos. Desse modo, a função de partição do modelo 2S é

$$Z_{2S} = \text{Tr} \left[ e^{-\beta\hat{H}} \prod_j \delta(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow} - 1) \right] , \quad (1.28)$$

onde  $\text{Tr}$  é o traço e  $\beta = 1/T$  é o inverso da temperatura. A função delta de Kronecker é



definida como

$$\delta(x) = \begin{cases} 1, & \text{se } x = 0 \\ 0, & \text{se } x \neq 0 \end{cases}, \quad (1.29)$$

assim, a presença desta função na equação (1.28) indica que somente os sítios com um férmion são contados para a função de partição. Os dois modelos podem ser representados por uma única expressão usando a representação integral para a função delta de Kronecker, a saber

$$\delta(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow} - 1) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_j e^{ix_j(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow} - 1)}. \quad (1.30)$$

Portanto, usando esta representação e as integrais de caminho fermiônicas, onde os operadores fermiônicos de spins são representados por campos de Grassmann (NEGELE; ORLAND, 1988), pode-se escrever a função de partição da forma

$$Z\{\mu\} = \int D[\phi^*, \phi] \int_0^{2\pi} \prod_j \frac{dx_j}{2\pi} e^{-\mu_j} e^{A\{\mu\}}, \quad (1.31)$$

com o funcional

$$\int D[\phi^*, \phi] = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_j \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} d\phi_{j\sigma}^* d\phi_{j\sigma}, \quad (1.32)$$

e onde a ação  $A\{\mu\}$  é dada por

$$A\{\mu\} = \int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_j \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left[ \phi_{j\sigma}^*(\tau) \frac{d}{d\tau} \phi_{j\sigma}(\tau) + \mu_j \phi_{j\sigma}^*(\tau) \phi_{j\sigma}(\tau) - H(\phi_{j\sigma}^*(\tau), \phi_{j\sigma}(\tau)) \right] \right\}, \quad (1.33)$$

$\phi_{j\sigma}^*$  e  $\phi_{j\sigma}$  são campos de Grassmann associados aos operadores de criação e destruição, respectivamente, e  $\mu_j$  é o potencial químico, que tem a função de controlar a ocupação média por sítio para o modelo 4S, no qual  $\mu_j = 0$ . Para o modelo 2S,  $\mu_j = ix_j$  tem a função de restringir a ocupação do sítio (POPOV; FEDOTOV, 1988). Com a intenção de escrever a função de partição em termos de campos de Grassmann, deve-se calcular a transformada de Fourier sobre os campos de Grassmann (NEGELE; ORLAND, 1988), tal que

$$\phi_{j\sigma}(\tau) = \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n\tau/\beta} \phi_{j\sigma}(\omega) \quad \text{e} \quad \phi_{j\sigma}^*(\tau) = \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n\tau/\beta} \phi_{j\sigma}^*(\omega), \quad (1.34)$$

e a transformada inversa é  $\phi_{j\sigma}(\omega) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega\tau/\beta} \phi_{j\sigma}(\tau)$ , com  $\omega_n = (2n + 1)\pi$ , para  $n = 0, \pm 1, \dots$ , sendo  $\omega_n$  as frequências de Matsubara que satisfazem as condições de

contorno antissimétricas  $\phi_{j\sigma}(\tau + \beta) = -\phi_{j\sigma}(\tau)$ . Os operadores  $\hat{S}^z$  também podem ser escritos em termos das transformadas de Fourier, tal que

$$S_j^z(\tau) = \frac{1}{2} \Psi_j^\dagger(\omega) \sigma^z \Psi_j(\omega') e^{i(\omega - \omega')\tau/\beta}, \quad (1.35)$$

e

$$S_i^z(\tau) = \frac{1}{2} \Psi_j^\dagger(\omega'') \sigma^z \Psi_j(\omega''') e^{i(\omega'' - \omega''')\tau/\beta}, \quad (1.36)$$

onde

$$\sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.37)$$

é uma matriz de Pauli e

$$\Psi_j(\omega) = \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}(\omega) \\ \phi_{j\downarrow}(\omega) \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \Psi_j^\dagger(\omega) = \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}^*(\omega) & \phi_{j\downarrow}^*(\omega) \end{bmatrix}. \quad (1.38)$$

A integral em  $\tau$  pode ser substituída por um somatório em  $\Omega$  da forma

$$\int d\tau \sum_{ij} S_i^z(\tau) S_j^z(\tau) = \sum_{\Omega} J_{ij} \beta S_i^z(\Omega) S_j^z(-\Omega), \quad (1.39)$$

onde  $S_i^z(\Omega) = \frac{1}{2} \sum_{\omega} \Psi_i^\dagger(\omega + \Omega) \sigma^z \Psi_i(\omega)$ , com  $\Omega = 2m\pi$ , para  $m = 0, \pm 1, \dots$  sendo  $\Omega$  as frequências de Matsubara simétricas (NEGELE; ORLAND, 1988).

Para o cálculo da energia livre é utilizado o método das réplicas ( $f = -\frac{1}{N} \lim_{n \rightarrow 0} \ln \frac{Z^n - 1}{n}$ ) com aproximação de simetria de réplicas (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978), como visto na seção 1.2.1. Usando procedimentos semelhantes aos adotados na seção 1.2.1 e admitindo a aproximação estática, onde considera-se  $\Omega = 0$ , a função de partição replicada toma a forma

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_{J_{ij}} &= \int_0^{2\pi} \prod_{\alpha} \prod_j \frac{dx_j^{\alpha}}{2\pi} e^{-\mu_j^{\alpha}} \int D[\phi^*, \phi] \int dJ_{ij} \sqrt{\frac{N}{16\pi J^2}} \times \\ &\times \exp \left\{ \sum_{\alpha} \sum_{\omega} \sum_j \Psi_j^{\dagger\alpha}(\omega) [(i\omega + \beta\mu_j^{\alpha}) I + \beta\Gamma\sigma^x] \Psi_j^{\alpha}(\omega) + \right. \\ &\left. + \left( \sum_{\alpha} \sum_{ij} J_{ij} \beta S_{i\alpha}^z S_{j\alpha}^z - \frac{J_{ij}^2 N}{16N^2} \right) \right\}, \quad (1.40) \end{aligned}$$

sendo  $\alpha$  o índice das réplicas, com  $\alpha = 1, \dots, n$ . Na equação (1.40), usou-se a representação (1.38), a matriz de Pauli  $\sigma^z$ , definida na equação (1.37), e as matrizes

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.41)$$

onde  $\sigma^x$  é uma matriz de Pauli e  $I$  a matriz identidade. A média sobre as variáveis aleatórias  $J_{ij}$  é realizada reescrevendo a equação 1.40 na forma de quadrado perfeito (ver equação 1.8). Logo, a função de partição assume a forma

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_{J_{ij}} &= \int_0^{2\pi} \prod_{\alpha} \prod_j \frac{dx_j^{\alpha}}{2\pi} e^{-\mu_j^{\alpha}} \int D[\phi^*, \phi] \int \prod_{\alpha\gamma} dq_{\alpha\gamma} \times \\ &\times \exp \left\{ \sum_{\alpha} \sum_{\omega} \sum_j \Psi_j^{\dagger\alpha}(\omega) [(i\omega + \beta\mu_j^{\alpha}) I + \beta\Gamma\sigma^x] \Psi_j^{\alpha}(\omega) - \right. \\ &\left. - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\gamma} q_{\alpha\gamma}^2 - \sum_{\alpha\gamma} \sum_j \frac{4\beta J}{N} \left( \sum_j S_{j\alpha}^z S_{j\gamma}^z \right) q_{\alpha\gamma} \right\}, \end{aligned} \quad (1.42)$$

onde  $q_{\alpha\gamma}$  são campos auxiliares que surgem após a linearização e estão relacionados aos parâmetros de ordem VS. Assim, têm-se a seguinte expressão para a função de partição

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_{J_{ij}} &= \int_0^{2\pi} \prod_{\alpha} \prod_j \frac{dx_j^{\alpha}}{2\pi} e^{-\mu_j^{\alpha}} \int \prod_{\alpha\gamma} dq_{\alpha\gamma} e^{-\frac{N\beta^2 J^2 \sum_{\alpha\gamma} q_{\alpha\gamma}^2}{2}} \int D[\phi^*, \phi] \times \\ &\times \exp \left\{ \sum_{\alpha} \sum_{\omega} \sum_j \Psi_j^{\dagger\alpha}(\omega) [(i\omega + \beta\mu_j^{\alpha}) I + \beta\Gamma\sigma^x] \Psi_j^{\alpha}(\omega) + \right. \\ &\left. + 4\beta^2 J^2 \sum_{\alpha\gamma} \sum_j q_{\alpha\gamma} S_{j\alpha}^z S_{j\gamma}^z \right\}. \end{aligned} \quad (1.43)$$

Como na seção 1.2.1, admite-se que o problema tem simetria de réplicas, ou seja, pode-se representar os elementos da matriz das réplicas que estão fora da diagonal principal por apenas um único parâmetro de ordem, assim,

$$q_{\alpha\gamma} = \begin{cases} q, & \text{se } \alpha \neq \gamma \\ \bar{q} = q + \bar{\chi}, & \text{se } \alpha = \gamma \end{cases}, \quad (1.44)$$

onde  $\bar{\chi}$  está relacionado à susceptibilidade linear pela relação

$$\bar{\chi} = \beta\chi. \quad (1.45)$$

Dessa forma, a função de partição sem a dependência dos índices de réplicas para os

elementos da matriz das réplicas é

$$\begin{aligned}
\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} &= \int \prod_{\alpha\gamma} dq_{\alpha\gamma} e^{-n \left( \frac{N\beta^2 J^2 q^2}{2} \right)} \prod_{\alpha} dq_{\alpha} e^{-n(n-1) \frac{N\beta^2 J^2 q_{\alpha}^2}{2}} \int_0^{2\pi} \prod_j \frac{dx_j}{2\pi} e^{-\mu_j} \times \\
&\times \int D[\phi^*, \phi] \exp \left\{ \sum_{\omega} \sum_j \Psi_j^{\dagger}(\omega) [(i\omega + \beta\mu_j) I + \beta\Gamma\sigma^x] \Psi_j(\omega) + \right. \\
&\left. + 4\beta^2 J^2 \sum_j q_{\alpha} \left( \sum_{\alpha} S_{j\alpha}^z S_{j\alpha}^z \right) + 4\beta^2 J^2 \sum_{\alpha\gamma} \sum_j q S_{j\alpha}^z S_{j\gamma}^z \right\}. \quad (1.46)
\end{aligned}$$

Então, reescrevendo o último termo da equação (1.46), que contém interações entre réplicas, como

$$\sum_{\alpha,\gamma} S_{j\alpha}^z S_{j\gamma}^z = \left( \sum_{\alpha} S_{j\alpha} \right)^2 - \sum_{\alpha} S_{j\alpha}^2, \quad (1.47)$$

e somando sobre todos os sítios, obtêm-se a seguinte expressão para a função de partição replicada

$$\begin{aligned}
\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} &= \int \prod_{\alpha\gamma} dq_{\alpha\gamma} e^{-n \left( \frac{N\beta^2 J^2 q^2}{2} \right)} \prod_{\alpha} dq_{\alpha} e^{-n(n-1) \frac{N\beta^2 J^2 (q+\bar{\chi})^2}{2}} \times \\
&\times \int_0^{2\pi} \frac{dx}{2\pi} e^{-\mu} \int D[\phi^*, \phi] \exp \left\{ \sum_{\omega} \Psi^{\dagger}(\omega) [(i\omega + \beta\mu) I + \right. \\
&\left. + \beta\Gamma\sigma^x] \Psi(\omega) + 4\beta^2 J^2 q \left( \sum_{\alpha} S_{\alpha}^z \right)^2 + 4\beta^2 J^2 \bar{\chi} \left( \sum_{\alpha} S_{\alpha}^z \right)^2 \right\}. \quad (1.48)
\end{aligned}$$

Linearizando os termos quadráticos na equação (1.48) com o auxílio da equação (1.10), dois novos campos auxiliares são introduzidos,  $z$  e  $\xi_{\alpha}$ , assim,

$$\begin{aligned}
\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} &= \int \prod_{\alpha\gamma} dq_{\alpha\gamma} e^{-n \frac{N\beta^2 J^2}{2} [q^2 + (n-1)(q+\bar{\chi})^2]} \left( \int Dz \left[ \int D\xi \times \right. \right. \\
&\times \int_0^{2\pi} \frac{dx}{2\pi} e^{-\mu} \int D[\phi^*, \phi] \exp \left\{ \sum_{\omega} \Psi^{\dagger}(\omega) [(i\omega + \beta\mu) I + \right. \\
&\left. \left. + \beta\Gamma\sigma^x] \Psi(\omega) + 2\beta J \sqrt{2q} S^z z + 2\beta J \sqrt{2\bar{\chi}} S^z \xi_{\alpha} \right\} \right]^n \Big)^N, \quad (1.49)
\end{aligned}$$

onde  $\int Dy = \int \frac{1}{\sqrt{2\pi}} dy e^{-y^2/2}$ , com  $y$  sendo  $z$  ou  $\xi_{\alpha}$ . Escrevendo os operadores  $\hat{S}^z$  e  $\hat{S}^x$  em função dos campos de Grassmann, de acordo com as equações (1.26) e (1.38), a função

de partição pode ser escrita como segue

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_{J_{ij}} &= \int \prod_{\alpha\gamma} dq_{\alpha\gamma} e^{-n \frac{\beta^2 J^2}{2} [q^2 + (n-1)(q+\bar{\chi})^2]} \left( \int Dz \left[ \int D\xi \times \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx e^{-\mu} \int D[\phi^*, \phi] \exp \left\{ \sum_{\omega} \Psi^\dagger(\omega) g^{-1}(\omega) \Psi(\omega) \right\} \right]^n \right)^N \end{aligned} \quad (1.50)$$

onde

$$g^{-1}(\omega) = \begin{pmatrix} i\omega + \beta\mu + \beta h & \beta\Gamma \\ \beta\Gamma & i\omega + \beta\mu + \beta h \end{pmatrix}, \quad (1.51)$$

e  $h = \beta J \sqrt{2q}z + \beta J \sqrt{2\bar{\chi}}\xi$ . A integral sobre os campos de Grassmann é realizada calculando o determinante da matriz  $g^{-1}$ :  $I = \prod_{\omega} \det g^{-1}(\omega)$ . Realizando este cálculo, somando sobre as frequências de Matsubara e incluindo a restrição, encontra-se

$$I' = \int_0^{2\pi} \frac{dx}{2\pi} e^{-\mu} \left\{ 2 \cosh(\beta\mu) + 2 \cosh(\sqrt{\beta^2 h^2 + \beta^2 \Gamma^2}) \right\}. \quad (1.52)$$

Ainda é preciso resolver a integral da restrição (integral sobre  $x$ ). Para o modelo 4S,  $\mu = 0$ , assim, a equação (1.52) resulta

$$I' = 2 \left[ 1 + \cosh(\sqrt{\beta^2 h^2 + \beta^2 \Gamma^2}) \right]. \quad (1.53)$$

Para o modelo 2S,  $\mu = ix$ , logo

$$I' = \left[ 2 \cosh(\sqrt{\beta^2 h^2 + \beta^2 \Gamma^2}) \right]. \quad (1.54)$$

Os resultados para os dois modelos podem ser expressos por

$$I' = 2 \left[ p + \cosh(\sqrt{\beta^2 h^2 + \beta^2 \Gamma^2}) \right], \quad (1.55)$$

onde  $p$  pode ser 0, para o modelo 2S, ou 1, para o modelo 4S. Assim, substituindo (1.55) em (1.50) e tomando o limite quando as réplicas tendem a zero ( $n \rightarrow 0$ ), a energia livre obtida é

$$\beta f = \frac{\beta^2 J^2}{2} [\bar{\chi}^2 + 2q\bar{\chi}] - \int Dz \ln [2K_p], \quad (1.56)$$

onde  $K_p = p + \int d\xi \cosh(\Delta)$ , e  $\Delta = \beta^2 h^2 + \beta^2 \Gamma^2$ . No limite termodinâmico, as integrais sobre os parâmetros  $\bar{\chi}$  e  $q$  na equação (1.50) são resolvidas pelo método ponto de sela:  $\frac{\partial \beta f}{\partial q} = 0$  e  $\frac{\partial \beta f}{\partial \bar{\chi}} = 0$ , resultando nos parâmetros de ordem

$$q = \int Dz \frac{\left( \int D\xi_{\alpha} \frac{h}{\sqrt{\Delta}} \sinh(\sqrt{\Delta}) \right)^2}{\left( p + \int D\xi_{\alpha} \cosh(\sqrt{\Delta}) \right)^2}, \quad (1.57)$$

que representa o parâmetro de ordem VS, e

$$\bar{\chi} = \int Dz \left\{ \frac{\int D\xi_\alpha \frac{h^2}{\Delta} \cosh(\sqrt{\Delta}) + \frac{\beta^2 \Gamma^2}{\Delta^{3/2}} \sinh(\sqrt{\Delta})}{\left( p + \int D\xi_\alpha \cosh(\sqrt{\Delta}) \right)} \right\} - q, \quad (1.58)$$

que está relacionado à susceptibilidade linear pela equação (1.45).

Diagramas de fase de temperatura por campo transversal são obtidos numericamente através deste modelo e estão apresentados na figura 1.8. Estes diagramas mostram as linhas críticas de transição de segunda ordem entre a fase paramagnética (PM), a altas temperaturas, e a fase VS, a temperaturas abaixo de  $T_f$  (THEUMANN; SCHMIDT; MAGALHAES, 2002). Neste modelo, quando  $\Gamma$  aumenta, a linha crítica decresce e é possível chegar a

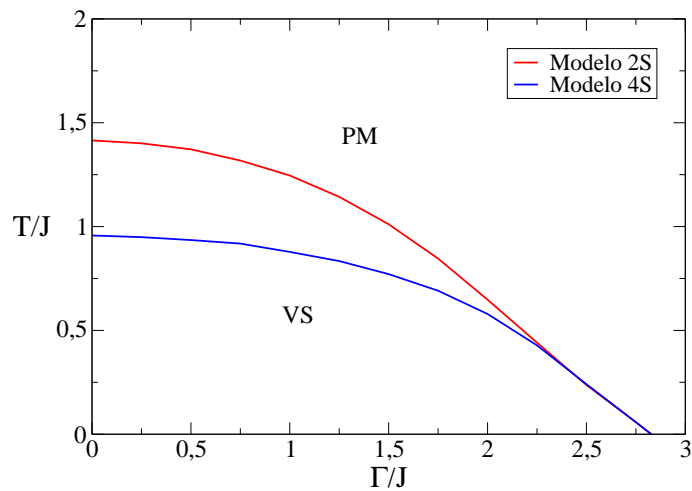


Figura 1.8: Diagramas de fase temperatura versus campo transversal para os modelos 2S e 4S (THEUMANN; SCHMIDT; MAGALHAES, 2002).

## 2 TRANSIÇÕES INVERSAS

Neste capítulo, serão discutidas as características gerais de um fenômeno conhecido como transição inversa, bem como alguns modelos teóricos propostos para a descrição desse fenômeno. Na seção 2.1, é apresentada uma descrição geral sobre as transições inversas. A seção 2.2 discute alguns modelos magnéticos utilizados para estudar esse fenômeno.

### 2.1 DESCRIÇÃO GERAL SOBRE AS TRANSIÇÕES INVERSAS

Um fenômeno que tem atraído bastante a atenção de físicos tanto teóricos quanto experimentais é conhecido como transição inversa. Em uma transição de fase usual, a entropia da fase ordenada é sempre menor que a entropia da fase desordenada. No caso da água, por exemplo, observa-se um aumento na entropia quando o sólido funde-se até tornar-se líquido e suas moléculas ficam mais desordenadas. Similarmente, observa-se um aumento na entropia quando o líquido vaporiza e suas moléculas ocupam um volume maior e seu movimento é altamente caótico (CALLEN, 1985). Portanto, sendo a entropia uma medida da desordem do sistema, espera-se que a fase ordenada apresente uma entropia menor que a fase desordenada. Entretanto, como será discutido nesta seção, em uma transição inversa ocorre justamente o contrário.

Um exemplo de transição inversa é o processo conhecido como derretimento inverso. Derretimento inverso é uma transição observada experimentalmente entre uma fase líquida a baixas temperaturas e uma fase cristalina a altas temperaturas. Esse tipo de transição ocorre se, e somente se, a fase chamada ordenada (cristalina) admite entropia maior do que o estado desordenado (SCHUPPER; SHNERB, 2005). Portanto, transições inversas são transformações reversíveis entre fases com conteúdos entrópicos que estão em ordem inversa em relação a transições usuais (LEUZZI; PAOLUZZI; CRISANTI, 2011). Isto significa que as transições inversas ocorrem de uma fase ordenada a altas temperaturas para uma fase desordenada a baixas temperaturas. Uma transição inversa é caracterizada através da entropia do sistema, pois, neste tipo de transição a entropia da fase ordenada é maior que a entropia da fase usualmente desordenada. As transições inversas podem ser classificadas de duas formas: derretimento inverso e congelamento inverso. Congelamento inverso é uma transição reversível entre as fases líquido-vidro. Neste tipo de transição, a entropia da fase ordenada (fase vidro) é maior que a entropia da fase desordenada (líquida) (LEUZZI; PAOLUZZI; CRISANTI, 2011).

Embora seja um fenômeno contra-intuitivo, existem vários exemplos de sistemas

físicos que apresentam transições inversas, como os isótopos de Hélio  $\text{He}^3$  e  $\text{He}^4$ , que apresentam transição inversa entre as fases líquido-cristalina (WILKS; BETTS, 1987). Ambos os isótopos mostram derretimento inverso a altas pressões e baixas temperaturas ( $T < 1K$ ). Entretanto, há uma diferença entre estes isótopos relacionada ao caráter das fases líquida e sólida. Para  $\text{He}^4$ , o líquido superfluido se torna um cristal hcp (do inglês “hexagonal close packed”) sob aquecimento. Para  $\text{He}^3$ , o líquido normal se torna um cristal bcc (do inglês “body centered cubic”). Nesse caso, os graus de liberdade dos spins estão relativamente livres para se reorientarem no cristal, o que leva a um aumento em sua entropia em relação ao líquido (SCHUPPER; SHNERB, 2005).

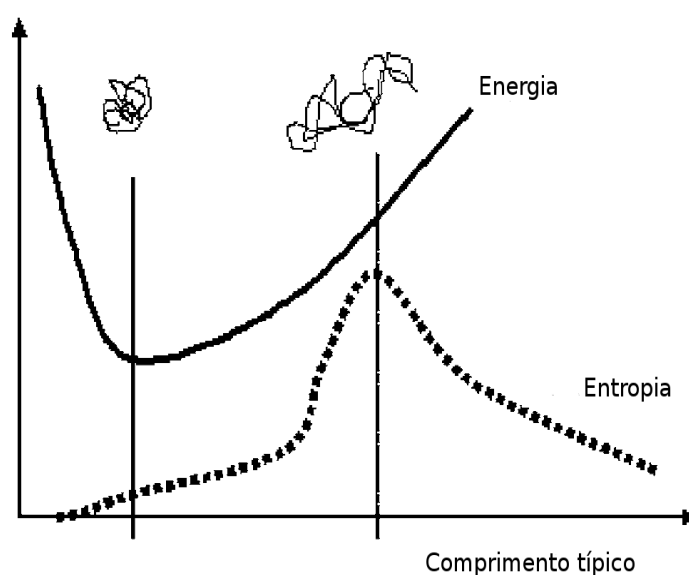


Figura 2.1: Esboço da dependência da energia e da entropia com o tamanho linear de um polímero de metilcelulose em água (SCHUPPER; SHNERB, 2005).

Um exemplo interessante de polímeros que apresenta congelamento inverso é a solução de metilcelulose em água, que sofre um congelamento inverso entre as fases líquido-gel (LEUZZI; PAOLUZZI; CRISANTI, 2011). Ao aquecer uma solução transparente de metilcelulose, esta se transforma em um gel branco. Sob resfriamento, a solução retorna ao estado natural, ou seja, a transição é reversível. Os autores Haque e Morris (HAQUE; MORRIS, 1993) propuseram que no estado líquido, as moléculas de água são mantidas em estruturas semelhantes a “gaiolas” formadas por constituintes hidrofóbicos que se movem na solução. Entretanto, quando o gel é formado e os segmentos hidrofóbicos se agregam para formar elos em forma de cruz, as “gaiolas” são abertas e as moléculas de água são livres para se movimentarem na rede. Assim, a entropia e a quantidade de possíveis configurações, que eram baixas na fase líquida, acabam aumentando quando os agregados hidrofóbicos se reagrupam e formam o gel (LEUZZI; PAOLUZZI; CRISANTI, 2011). Esse sistema está representado através de um esboço da dependên-



cia da energia e da entropia com o tamanho de um polímero de metilcelulose em água na figura 2.1. As conformações dobradas, não interagentes, são energeticamente favorecidas enquanto as conformações desdobradas (interagentes) são entropicamente favorecidas (SCHUPPER; SHNERB, 2005). Portanto, através dos comportamentos observados experimentalmente, pode-se sugerir que a presença de várias configurações possíveis e uma vantagem entrópica dos estados interagentes são os elementos essenciais para o aparecimento de transições inversas.

## 2.2 MODELOS TEÓRICOS PARA DESCRIÇÃO DAS TRANSIÇÕES INVERSAS

### 2.2.1 Descrição para o derretimento inverso

Recentemente, observou-se que modelos magnéticos podem descrever características gerais relacionadas às transições inversas. Por exemplo, o modelo clássico Blume e Capel de spin 1 ( $S = 0, \pm 1$ ) pode ser usado para descrição do derretimento inverso. O modelo Blume-Capel (modelo BC) é descrito pelo Hamiltoniano:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + D \sum_{i=1}^N S_i^2, \quad (2.1)$$

onde  $D$  é um parâmetro anisotrópico e  $J$  uma interação de troca (BLUME, 1966; CAPEL, 1966). É possível fazer uma analogia entre o modelo BC e o polímero de metilcelulose discutido na seção 2.1. O spin zero do modelo BC pode representar o polímero no estado dobrado não-interagente, enquanto os estados  $S = \pm 1$  podem representar o estado desdobrado interagente.

Esse modelo é capaz de descrever o derretimento inverso por apresentar duas interações que competem entre si: a interação de troca  $J$ , relacionada aos estados interagentes  $\pm 1$ , e o parâmetro anisotrópico  $D$  que representa a vantagem energética dos estados não-interagentes  $S = 0$ . Entretanto, para que o modelo BC apresente derretimento inverso é preciso adicionar um parâmetro de degenerescência  $r = l/k \geq 1$ , que relaciona a degenerescência dos estados interagentes ( $l$ ) com a degenerescência dos estados não-interagentes ( $k$ ). O parâmetro  $r$  é o ganho entrópico dos estados interagentes. Desta forma, o modelo BC pode apresentar derretimento inverso, mas não espontaneamente (BLUME, 1966; CAPEL, 1966). É necessário introduzir uma vantagem entrópica ao modelo.

Observa-se que os resultados usando o modelo BC são independentes das degenerescências  $l$  e  $k$ , dependendo somente da razão  $r$ . Os resultados do modelo BC

para  $r = 1$  são mostrados no detalhe da figura 2.2. A linha AB representa uma transição de segunda ordem entre as fases paramagnética (PM) e ferromagnética (FM). Abaixo do ponto tricrítico (B), a transição de fase é de primeira ordem (linha BD), com as linhas BC e BE representando as espinodais, que são linhas que definem o limite de validade das soluções PM e FM, respectivamente. Nessa situação, o modelo BC não apresenta derretimento inverso. Diferentemente, quando  $r = 6$  (figura principal), os estados interagentes têm maior entropia e a fase FM cobre uma região maior do diagrama de fase, fato que reflete sua vantagem entrópica. Nesse caso, as transições de primeira e segunda ordem são alteradas, e o diagrama de fase apresenta derretimento inverso. Diminuindo a temperatura, para uma certa região de  $D$ , a partir de uma fase PM a altas temperaturas, encontra-se uma fase FM e diminuindo ainda mais a temperatura, chega-se novamente a uma fase PM, porém, com entropia menor que a entropia da fase FM a temperaturas mais altas, caracterizando assim o derretimento inverso.

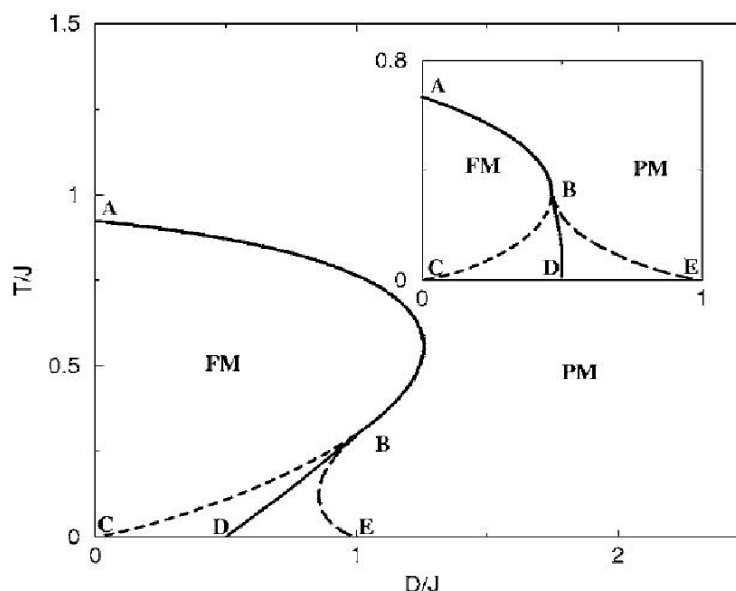


Figura 2.2: Diagrama de fase do modelo BC para  $r = 6$  na figura principal e para  $r = 1$  no detalhe da figura (SCHUPPER; SHNERB, 2005).

Portanto, a presença de estados não-interagentes ( $S = 0$ ) e a introdução de uma vantagem entrópica nos estados interagentes se mostram essenciais para o modelo exibir derretimento inverso.

### 2.2.2 Descrição para o congelamento inverso

Congelamento inverso é uma transição reversível a partir da fase paramagnética (PM) à uma fase com características de vidro sob aquecimento. Neste sentido, um modelo

magnético que pode apresentar tais características é o modelo de vidro de spin (VS) proposto por Ghatak e Sherrington (modelo GS) (GHATAK; SHERRINGTON, 1977), descrito pelo hamiltoniano:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j + D \sum_{i=1}^N S_i^2, \quad (2.2)$$

onde desordem e frustração são introduzidas através das variáveis aleatórias  $J_{ij}$ , que seguem uma distribuição de probabilidades gaussianas,  $D$  é um campo cristalino e  $S$  pode assumir os valores  $1, 0, -1$ . Para tratamento deste modelo é utilizado o método das réplicas, com simetria de réplicas e um passo de quebra de simetria de réplicas (ver seções 3.1.1 e 3.1.2). Similarmente ao modelo BC, os autores Crisanti e Leuzzi (CRISANTI; LEUZZI, 2005) utilizaram a proporção de degenerescência  $r$ .

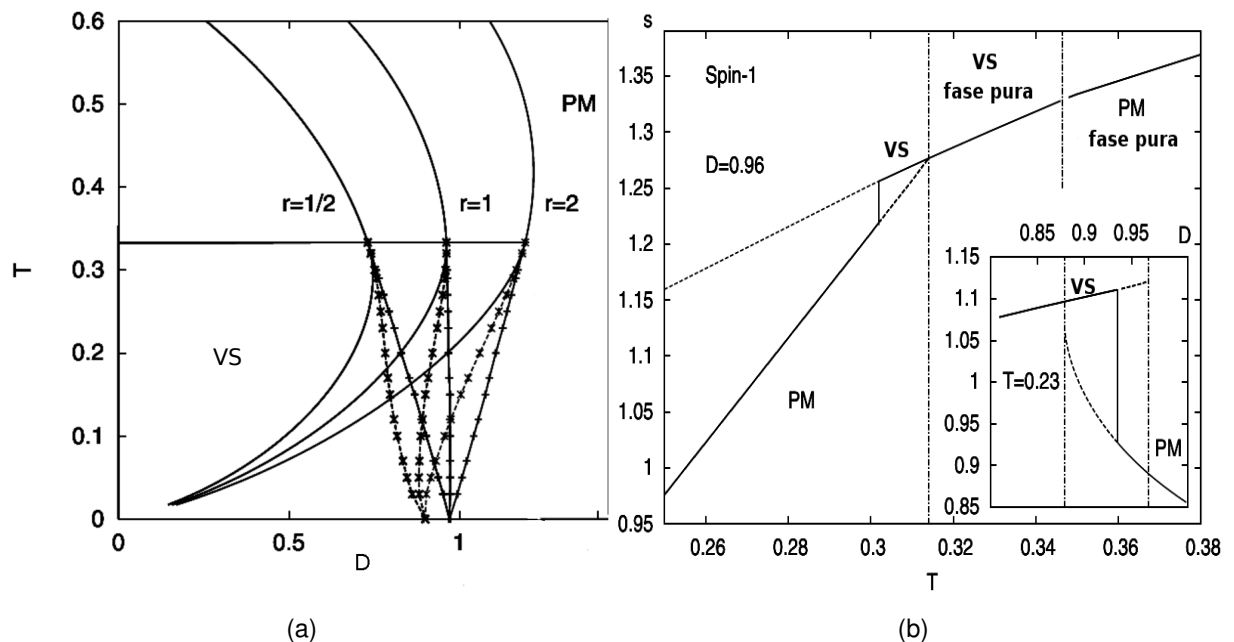


Figura 2.3: (a) Diagrama de fase do modelo GS para  $r = 1/2, 1, 2$  (CRISANTI; LEUZZI, 2005). (b) Entropia versus temperatura para um valor de campo cristalino  $D = 0.96$  para o modelo GS.

Na figura 2.3(a) é apresentado um diagrama de fase da temperatura  $T$  em função do campo cristalino  $D$  para três valores de  $r$ :  $r = 1/2, 1$  e  $2$ . As linhas cheias superiores representam transições de segunda ordem entre as fases PM e VS. Diminuindo a temperatura, encontra-se um ponto tricrítico, delimitado pelas espinodais (linha cheia à esquerda e linha pontilhada à direita), a partir da qual a transição torna-se de primeira ordem (linha central). As linhas pontilhadas e tracejadas-cruzadas representam as soluções com simetria de réplicas e com quebra de simetria de réplicas, respectivamente. Observa-se que o contorno de transição de primeira ordem (linha central) somente é afetado pela solução com um passo de quebra de simetria de réplicas em temperaturas muito baixas.

Um resultado importante para o modelo GS, mostrado na figura 2.3(a), é o surgi-

mento de uma transição reentrante a partir da fase PM para a fase VS sob aquecimento, mesmo para o caso  $r = 1$ . Esta reentrância está relacionada ao surgimento de uma transição inversa, comprovado pela análise da entropia na figura 2.3(b). Logo abaixo da linha espinodal da solução PM ( $T < 0.314$ ) há uma coexistência das soluções VS e PM. Nesse caso, a linha de primeira ordem é obtida através da comparação das energias livres das soluções VS e PM. Percebe-se que abaixo da linha de transição de primeira ordem ( $T_{1ord} = 0.302$ ), a entropia da fase PM é menor que a entropia da fase VS, caracterizando assim o congelamento inverso. Portanto, ao contrário do modelo BC, o modelo GS é capaz de exibir congelamento inverso sem adição de qualquer vantagem entrópica, ou seja, o modelo GS apresenta congelamento inverso espontaneamente (GHATAK; SHERRINGTON, 1977). Através deste estudo, supõe-se que a presença simultânea de estados não-interagentes e frustração, gerada de desordem existente em modelos de VS, são os ingredientes necessários para a existência de congelamento inverso.

### 2.2.3 Modelo Vidro de Spin Fermiônico e mapeamento entre o modelo Ghatak-Sherrington

Recentemente modelos fermiônicos de vidro de spin (VS) de Ising vêm sendo utilizados para estudar as transições inversas, em particular o congelamento inverso. Um desses modelos é o modelo de VS de Ising fermiônico discutido na seção 1.2.3. Neste modelo, o potencial químico  $\mu$  tem o papel de controlar a ocupação média de férmions por sítio e introduzir flutuações no número de ocupação, introduzindo assim flutuações de carga.

O motivo de utilizar modelos fermiônicos de VS de Ising para o estudo do congelamento inverso é que, de acordo com Feldmann e Oppermann (FELDMANN; OPPERMANN, 1999), as propriedades termodinâmicas dos modelos fermiônicos de VS de Ising no ensemble grão-canônico e o modelo Ghatak-Sherrington estão diretamente relacionadas através de um mapeamento entre o parâmetro anisotrópico  $D$  e o potencial químico  $\mu$ , definido pela equação (FELDMANN; OPPERMANN, 1999):

$$e^{\beta D} = e^{\beta \mu} + e^{-\beta \mu}. \quad (2.3)$$

Conseqüentemente, é esperado que o modelo fermiônico de VS de Ising também seja capaz de apresentar transições inversas espontaneamente (FELDMANN; OPPERMANN, 1999).

O estudo do modelo de VS de Ising fermiônico mostra o surgimento de transições de primeira-ordem para valores altos de potencial químico, como visto na figura 2.4, em que é apresentado um diagrama de fases da temperatura  $T/J$  em função de  $\mu/J$  (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2008). Nesta figura, observa-se uma transição de segunda

ordem  $T_{2f}$  entre as fases VS e paramagnética (PM). Com o aumento de  $\mu$ , a linha  $T_{2f}$  decresce até um ponto tricrítico  $T_{tc}$ , a partir do qual a transição torna-se de primeira ordem  $T_{1f}$ . Logo abaixo de  $T_{tc}$ , a região de existência de múltiplas soluções é delimitada pelas linhas espinodais das soluções PM e VS, à esquerda e à direita da linha de transição de primeira ordem  $T_{1f}$ , respectivamente. Esta figura mostra o surgimento de uma reentrância na linha de transição de primeira ordem, o que indica a possibilidade do aparecimento de uma transição inversa. Nesse caso, para a comprovação da existência de transição inversa é necessária uma análise da entropia nessa região.

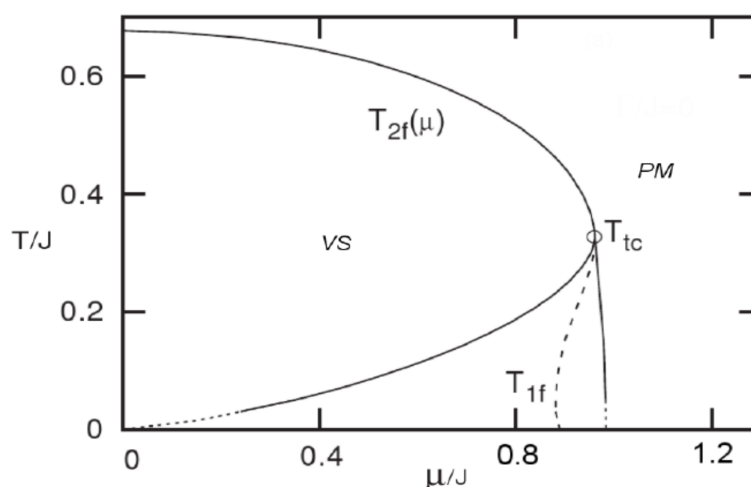


Figura 2.4: Diagrama de fase de  $T/J$  versus  $\mu/J$  para o modelo de VS de Ising fermiônico, onde  $T_{2f}$  e  $T_{1f}$  representam as linhas de transição entre as fases PM/VS de primeira e segunda ordem, respectivamente,  $T_{tc}$  representa o ponto tricrítico. Abaixo do  $T_{tc}$  as linhas à esquerda e à direita da linha  $T_{1f}$  representam as espinodais das soluções paramagnética e VS, respectivamente (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2008).

O comportamento da entropia  $S$  em função de  $T/J$  para  $\mu/J = 0.92$ , valor esse que corresponde a um corte na região de primeira ordem no diagrama de fases da figura 2.4, é mostrado na figura 2.5. Nesta figura, é possível observar três regiões distintas: para  $T/J > 0.43$ , há uma fase PM pura, sem soluções VS. Em  $T/J = 0.43$ , uma linha vertical cheia indica a transição de segunda ordem  $T_{2f}$ . Decrescendo a temperatura, que corresponde ao intervalo  $0.26 < T/J < 0.43$ , a fase PM é substituída por uma fase VS pura, sem soluções PM. Em  $T/J = 0.26$ , a linha pontilhada indica a espinodal da solução paramagnética. Uma transição de primeira ordem da fase VS para a fase PM ocorre em  $T/J = 0.2$ . Nessa transição, observa-se que a entropia da fase VS é maior do que a entropia da fase PM, caracterizando assim o congelamento inverso.

Também é possível introduzir um campo magnético transversal  $\Gamma$  no modelo de VS de Ising fermiônico, introduzindo flutuações quânticas (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2008). Do mesmo modo, observa-se congelamento inverso. Entretanto, o aumento de  $\Gamma$  suprime a reentrância e é capaz de destruir o congelamento inverso (MAGALHAES;

MORAIS; ZIMMER, 2008).

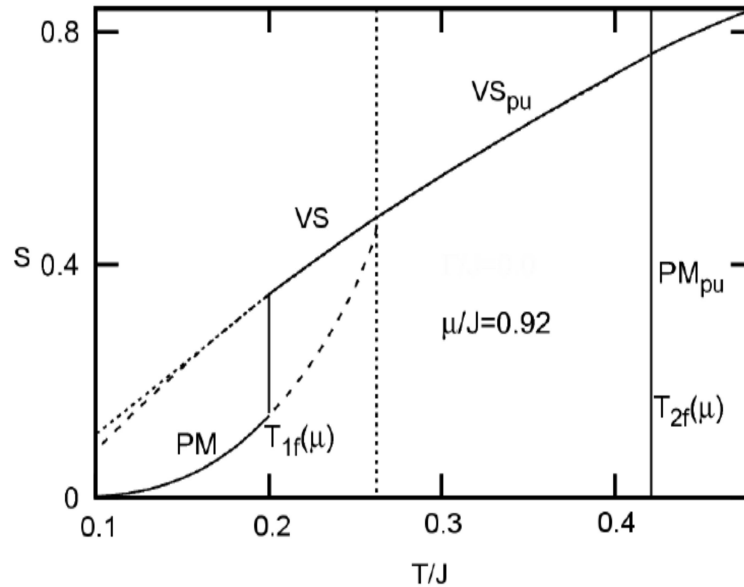


Figura 2.5: Entropia versus  $T/J$  para  $\mu/J = 0.92$ . A linha vertical pontilhada é a espinodal da soluções VS e a linha vertical cheia representa a linha de transição de segunda ordem  $T_{2f}$  (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2008).

Com base nos modelos citados, é possível observar que a presença simultânea de diluição (presença de estados  $S = 0$ ) e frustração (gerada a partir de desordem) é a condição necessária para se obter congelamento inverso espontâneo. Para verificar esta sugestão, Morais et.al. (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2010) analisaram um modelo onde é possível variar também o nível de frustração. Para tanto, utilizaram o modelo Hopfield em uma formulação fermiônica (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2010; MORAIS; ZIMMER; MAGALHAES, 2011). Nesse modelo, é possível investigar melhor o papel da frustração para o aparecimento de congelamento inverso, pois, pode-se modificar o regime de frustração a partir de desordem trivial a altamente frustrado introduzindo um parâmetro que ajusta o nível de frustração.

O modelo Hopfieldb em uma versão fermiônica é definido como:

$$\hat{H} = - \sum_{ij} J_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z. \quad (2.4)$$

Neste modelo, as interações  $J_{ij}$  entre os spins são dadas por:

$$J_{ij} = \frac{J}{2N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu, \quad (2.5)$$

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

distribuídas independentemente que seguem a distribuição

$$P(\xi_i)J_{ij} = \frac{1}{2}\delta_{\xi_i, \mu} + \frac{1}{2}\delta_{\xi_i, -\mu}. \quad (2.6)$$

Assim como no modelo VS de Ising fermiônico, os operadores de spin são escritos em termos dos operadores fermiônicos. Portanto, o modelo possui quatro estados sendo dois deles não-magnéticos. O nível de frustração é controlado através do parâmetro  $a = p/N$ . Na figura 2.6 são apresentados diagramas de fase  $T/J$  versus  $\mu/J$  para dois casos distintos.

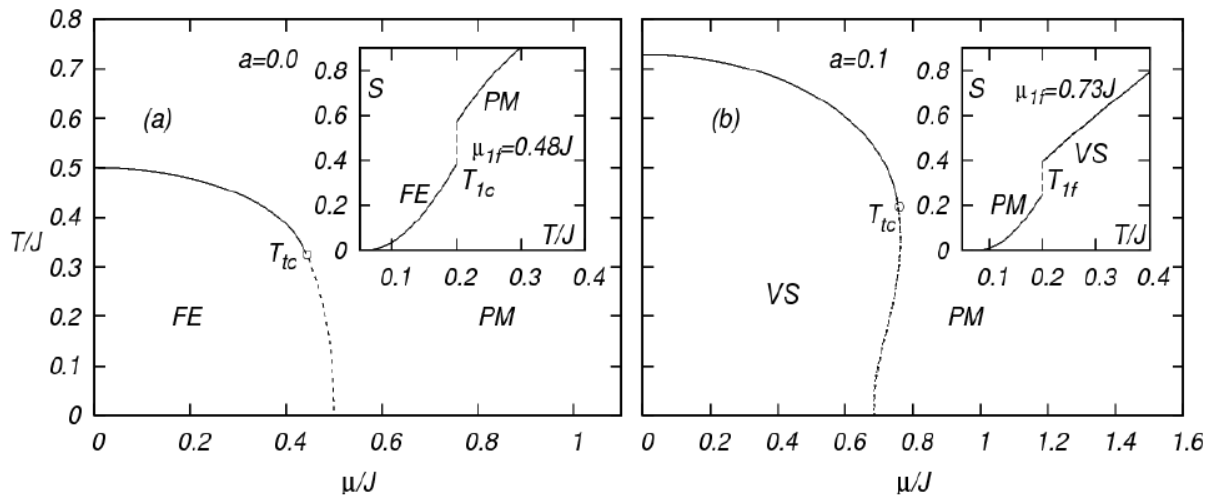


Figura 2.6: Entropia versus  $T/J$  para  $\mu/J = 0.92$ . A linha vertical pontilhada é a espinodal das soluções VS e a linha vertical cheia representa a linha de transição de segunda ordem  $T_{2f}$  (MORAIS; ZIMMER; MAGALHAES, 2011).

Na figura 2.6(a) é exibido o caso  $a = 0$ , em que não há efeitos de frustração. Nesse diagrama, para  $T/J$  e  $\mu/J$  pequenos, a fase FE é obtida. A altas temperaturas, a solução PM é encontrada. Uma transição de segunda ordem entre as fases FE e PM (definidas por  $T_{2c}(\mu)$ ) é observada para  $\mu/J$  pequenos. Contudo, quando  $\mu/J$  aumenta, há o surgimento de um ponto tricrítico a partir do qual a transição torna-se de primeira ordem. Para este valor de  $a$ , o diagrama  $T/J$  versus  $\mu/J$  não exibe reentrância na transição de primeira ordem. Entretanto, aumentando o nível de frustração para  $a = 0.1$  (figura 2.6(b)), os efeitos da frustração tornam-se dominantes. Logo, a solução FE é substituída pela solução VS. Uma transição de segunda ordem  $T_{2f}(\mu)$  VS/PM é encontrada para valores pequenos de  $\mu/J$ . Para valores maiores de  $\mu/J$ , um ponto tricrítico aparece. Porém, a transição de primeira  $T_{1f}(\mu)$  para o caso  $a = 0.1$  apresenta uma reentrância que indica a existência de congelamento inverso, como pode ser visto no detalhe da figura 2.6(b), que mostra o comportamento da entropia  $S$  em função de  $T/J$ . Nessa figura, verifica-se que para  $a = 0.1$  a entropia da fase VS é maior que a entropia da fase PM. Particularmente, o comportamento das linhas de transição para o caso  $a = 0.1$  é muito semelhante aos

resultados obtidos pelo modelo VS de Ising fermiônico para  $\Gamma = 0$ .

Logo, a análise do modelo Hopfield, onde a escolha do acoplamento spin-spin aleatório  $J_{ij}$  permite ajustar o nível de frustração, mostra que a frustração tem um papel muito importante no surgimento de congelamento inverso espontâneo. Sendo assim, através dos modelos descritos, acredita-se que frustração gerada por desordem (existente nos modelos fermiônicos de VS de Ising e Hopfield) e diluição magnética (favorecimento dos estados não-interagentes) são os ingredientes necessários para o aparecimento de congelamento inverso espontâneo, isto é, sem adição de qualquer vantagem entrópica (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2010; MORAIS; ZIMMER; MAGALHAES, 2011).

Com o intuito de investigar os mecanismos fundamentais para produzir congelamento inverso, nesta tese é analisado um modelo de vidro com clusters, onde clusters de spins interagem de modo desordenado entre si.



### 3 MODELO E MÉTODOS

Neste capítulo, o modelo de vidro de spin (VS) com clusters é descrito de dois modos. Primeiramente, em uma versão clássica utilizando spins de Ising. Posteriormente, o modelo é analisado em uma versão quântica introduzindo um campo magnético transversal, com os operadores de spins sendo escritos como uma combinação bilinear de operadores fermiônicos. Em ambos os casos, são considerados dois tipos de interações: uma interação desordenada de longo-alcance intercluster e interações intracluster de curto-alcance, que podem ser ferromagnéticas e/ou antiferromagnéticas. A desordem é tratada através do método das réplicas com aproximação de simetria de réplicas (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978) e de um passo de quebra de simetria de réplicas (PARISI, 1980). Para o modelo quântico, a aproximação estática é assumida (BRAY; MOORE, 1980).

#### 3.1 MODELO DE VIDRO DE SPIN COM CLUSTERS

Nesta seção, é analisado o modelo de VS com clusters. Partindo do modelo clássico de Ising:

$$H = - \sum_{ij}^N J_{ij} S_i S_j, \quad (3.1)$$

e reescrevendo-o de forma equivalente como:

$$H = - \sum_{ij}^{n_s} \sum_{\nu, \lambda}^{N_{cl}} J_{i\nu j\lambda} S_{i\nu} S_{j\lambda}, \quad (3.2)$$

onde assume-se que a rede de spins de Ising é dividida em  $N_{cl}$  clusters contendo  $n_s$  spins em cada cluster e  $N = N_{cl} \cdot n_s$ . Dividindo esta soma em termos onde  $\nu = \lambda$  e  $\nu \neq \lambda$ , obtêm-se:

$$H = - \sum_{\nu\lambda}^{N_{cl}} J_{\nu\lambda} S_\nu S_\lambda - \sum_{\nu}^{N_{cl}} \left( \sum_{ij}^{n_s} J_{ij}^0 S_{i\nu} S_{j\nu} \right), \quad (3.3)$$

onde a soma  $\sum_{\nu\lambda}$  é realizada sobre todos os pares distintos de clusters, a soma  $\sum_{\nu}$  é feita sobre todos os clusters,  $J_{\nu\lambda}$  são variáveis aleatórias de interação de troca intercluster, que seguem uma distribuição de probabilidade gaussiana com média 0 e variância  $J^2/N_{cl}$ , onde  $N_{cl}$  é o número de clusters do sistema. A soma  $\sum_{ij}$  é feita sobre todos os pares distintos de sítios dentro do mesmo cluster  $\nu$ ,  $J_{ij}^0$  são variáveis de interação de troca intracluster entre spins de Ising pertencentes ao mesmo cluster.  $S_\nu$  corresponde ao momento magnético total do cluster  $\nu$ , ou seja,  $S_\nu = \sum_{i=1}^{n_s} S_{i\nu}$ , onde  $n_s$  é o número de sítios dentro do cluster  $\nu$ , enquanto  $S_{i\nu}$  é o spin de Ising do sítio  $i$  no cluster  $\nu$ . Logo, este

modelo considera uma interação aleatória desordenada entre momentos magnéticos de clusters distintos (interação intercluster), além de interações intracluster (interações entre spins de Ising pertencentes ao mesmo cluster), que podem ser ferromagnéticas e/ou antiferromagnéticas.

Para analisar as quantidades termodinâmicas do sistema deve-se realizar uma média termodinâmica usual e uma média sobre as variáveis aleatórias  $J_{\nu\lambda}$ , que é dada pela energia livre, assim

$$\beta f = -\frac{1}{N_{cl}} \langle \ln Z(J_{\nu\lambda}) \rangle_{J_{\nu\lambda}}, \quad (3.4)$$

onde  $f = F/N_{cl}$ . O método das réplicas é utilizado para realizar esta média e consiste basicamente na identidade matemática (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978):

$$\ln Z = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n}, \quad (3.5)$$

onde  $Z^n$  é a função de partição replicada  $n$  vezes, ou seja,  $Z^n = \prod_{\alpha=1}^n Z^\alpha$ , com  $n$  sendo um número inteiro e positivo. Desse modo, o sistema original é replicado  $n$  vezes com  $n$  réplicas idênticas e não-interagentes do mesmo sistema. Sendo assim, a energia livre por cluster é expressa como

$$\beta f = -\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{N_{cl}n} \left[ \int dJ_{\nu\lambda} P(J_{\nu\lambda}) Z^n - 1 \right], \quad (3.6)$$

e a média sobre a desordem da função de partição replicada, com a notação  $Z_n$  sendo  $Z_n = Tr \int dJ_{ij} P(J_{ij}) e^{-\beta H^\alpha}$ , é dada por

$$Z_n = Tr \int dJ_{\nu\lambda} \sqrt{\frac{N_{cl}}{2\pi J^2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[ \sum_{\nu\lambda} -\frac{J_{\nu\lambda}^2}{J^2} N_{cl} - 2 \sum_{\alpha} \left( \sum_{\nu\lambda} \beta J_{\nu\lambda} S_{\nu}^{\alpha} S_{\lambda}^{\alpha} \right) \right] + \beta \sum_{\nu} \sum_{ij} J_{ij}^0 S_{i\nu}^{\alpha} S_{j\nu}^{\alpha} \right\}, \quad (3.7)$$

onde  $Tr$  é o traço e  $\alpha$  representa o índice de réplica, com  $\alpha = 1, \dots, n$ . Reescrevendo a equação (3.7) na forma de quadrado perfeito, têm-se

$$Z_n = Tr \int dJ_{\nu\lambda} \sqrt{\frac{N_{cl}}{2\pi J^2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[ \sum_{\nu\lambda} \left( \frac{J_{\nu\lambda}}{J} \sqrt{N_{cl}} + \sum_{\alpha} \frac{\beta J S_{\nu}^{\alpha} S_{\lambda}^{\alpha}}{\sqrt{N_{cl}}} \right)^2 - \frac{\beta^2 J^2}{N_{cl}} \sum_{\nu\lambda} \left( \sum_{\alpha} S_{\nu}^{\alpha} S_{\lambda}^{\alpha} \right)^2 \right] + \beta \sum_{\alpha} \sum_{\nu} \sum_{ij} J_{ij}^0 S_{i\nu}^{\alpha} S_{j\nu}^{\alpha} \right\}, \quad (3.8)$$

sendo que o termo  $(\sum_{\alpha} S_{\nu}^{\alpha} S_{\lambda}^{\alpha})^2$ , que contém interações entre os clusters  $\nu$  e  $\lambda$ , pode ser

escrito como

$$\left( \sum_{\alpha} S_{\nu}^{\alpha} S_{\lambda}^{\alpha} \right)^2 = \left( \sum_{\alpha=1}^n S_{\nu}^{\alpha} S_{\lambda}^{\alpha} \right) \left( \sum_{\gamma=1}^n S_{\nu}^{\gamma} S_{\lambda}^{\gamma} \right). \quad (3.9)$$

Substituindo a equação (3.9) em (3.8) e calculando a média sobre a desordem encontra-se, para a função de partição replicada, a expressão

$$Z_n = Tr \exp \left[ \frac{\beta^2 J^2}{2N_{cl}} \sum_{\nu\lambda} \sum_{\alpha,\gamma} S_{\nu}^{\alpha} S_{\lambda}^{\alpha} S_{\nu}^{\gamma} S_{\lambda}^{\gamma} + \beta \sum_{\alpha} \sum_{\nu} \sum_{ij} J_{ij}^0 S_{i\nu}^{\alpha} S_{j\nu}^{\alpha} \right]. \quad (3.10)$$

No problema acima existem interações entre réplicas e entre clusters distintos. Deseja-se encontrar um problema efetivo de uma única réplica e de um único cluster. Um primeiro passo para isso é reescrever o termo que contém essas interações da forma

$$\begin{aligned} \sum_{\nu\lambda} \sum_{\alpha,\gamma} S_{\nu}^{\alpha} S_{\lambda}^{\alpha} S_{\nu}^{\gamma} S_{\lambda}^{\gamma} &= \sum_{\nu\lambda} \sum_{\alpha,\gamma} S_{\nu}^{\alpha} S_{\nu}^{\gamma} S_{\lambda}^{\alpha} S_{\lambda}^{\gamma} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\gamma} \left( \sum_{\nu} S_{\nu}^{\alpha} S_{\nu}^{\gamma} \right)^2 - \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\gamma} \sum_{\nu} (S_{\nu}^{\alpha} S_{\nu}^{\gamma})^2. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Levando em conta que no limite termodinâmico ( $N_{cl} \rightarrow \infty$ ) o último termo da equação (3.11), que é da ordem de  $N_{cl}$ , pode ser desprezado quando comparado ao termo  $\sum_{\alpha,\gamma} (\sum_{\nu} S_{\nu}^{\alpha} S_{\nu}^{\gamma})^2$ , pois este é da ordem de  $N_{cl}^2$ , obtêm-se a seguinte expressão para a energia livre por cluster

$$\beta f = - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{N_{cl}n} \left\{ Tr \exp \left[ \frac{\beta^2 J^2}{4} \sum_{\alpha,\gamma} \left( \sum_{\nu} S_{\nu}^{\alpha} S_{\nu}^{\gamma} \right)^2 + \sum_{\nu} \sum_{\alpha} \sum_{ij} J_{ij}^0 S_{i\nu}^{\alpha} S_{j\nu}^{\alpha} \right] \right\}. \quad (3.12)$$

O termo quadrático da equação (3.12) é linearizado com o auxílio da identidade matemática 1.10 (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978). Essa transformação introduz campos auxiliares  $Q_{\alpha\gamma}$  que estão relacionados aos parâmetros de ordem VS do sistema. Com essa transformação, a energia livre por cluster assume a forma

$$\begin{aligned} \beta f &= - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{N_{cl}n} \left\{ \int \prod_{\alpha\gamma} \frac{dQ_{\alpha\gamma}}{\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -N_{cl} \left[ \left( \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha\gamma} Q_{\alpha\gamma}^2 \right) - \right. \right. \\ &\left. \left. - \frac{1}{N_{cl}} \ln Tr \exp \left[ \sum_{\nu} \left( \sum_{\alpha} \sum_{ij} \beta J_{ij}^0 S_{i\nu}^{\alpha} S_{j\nu}^{\alpha} + \beta^2 J^2 \sum_{\alpha\gamma} Q_{\alpha\gamma} S_{\nu}^{\alpha} S_{\nu}^{\gamma} \right) \right] \right] \right\} \right\}, \end{aligned} \quad (3.13)$$

na qual o problema original reduziu-se a um problema efetivo de um único cluster com interações entre réplicas.

No limite termodinâmico, as integrais sobre os campos auxiliares  $Q_{\alpha\gamma}$  podem ser calculadas através do método ponto de sela (FISCHER; HERTZ, 1991):  $\frac{\partial f}{\partial Q_{\alpha\gamma}} = 0$ , assim,

$$Q_{\alpha\gamma} = \frac{1}{N_{cl}} \left\langle \sum_{\nu} S_{\nu}^{\alpha} S_{\nu}^{\gamma} \right\rangle, \quad (3.14)$$

para  $\alpha \neq \gamma$ , e

$$Q_{\alpha\alpha} = \frac{1}{N_{cl}} \left\langle \sum_{\nu} S_{\nu}^{\alpha} S_{\nu}^{\alpha} \right\rangle, \quad (3.15)$$

para  $\alpha = \gamma$ , onde os campos  $Q_{\alpha\gamma}$  estão associados aos parâmetros de ordem VS, análogo ao parâmetro de ordem VS (modelo SK) (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978; EDWARDS; ANDERSON, 1975), e a correlação  $Q_{\alpha\alpha}$  está associada ao momento magnético total do cluster.

### 3.1.1 Aproximação de Simetria de Réplicas

Uma primeira aproximação para os elementos da matriz das réplicas  $Q_{\alpha\gamma}$  é considerar a aproximação com simetria de réplicas (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978; SOUKOULIS; LEVIN, 1978), ou seja,

$$Q_{\alpha\gamma} = \begin{cases} P, & \text{se } \alpha = \gamma \\ Q, & \text{se } \alpha \neq \gamma \end{cases}. \quad (3.16)$$

Isso significa que a fase vidro de spin é caracterizada por um único parâmetro de ordem  $Q$ . Assim, somando sobre os índices de réplicas, obtêm-se, para a energia livre por cluster, a expressão

$$\begin{aligned} \beta f = & - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{N_{cl} n} \exp \left[ n N_{cl} \frac{\beta^2 J^2}{2} (P^2 + (n-1)Q^2) - \right. \\ & - \ln Tr \exp \left[ \sum_{\nu} \left( \beta^2 J^2 Q \sum_{\alpha\gamma} S_{\nu}^{\alpha} S_{\nu}^{\gamma} + \beta^2 J^2 P \sum_{\alpha} (S_{\nu}^{\alpha})^2 - \right. \right. \\ & \left. \left. - \sum_{\alpha} \sum_{ij} \beta J_{ij}^0 S_{i\nu}^{\alpha} S_{j\nu}^{\alpha} \right) \right] \left. \right], \quad (3.17) \end{aligned}$$

onde  $Q$  e  $P$  são tais que extremizam a equação (3.17). Nesta equação, ainda existem interações entre réplicas distintas. Para contornar isso, utiliza-se a igualdade

$$\begin{aligned} \left( \sum_{\alpha} S_{\nu}^{\alpha} \right)^2 &= \sum_{\nu} (S_{\nu}^{\alpha})^2 + \sum_{\alpha \neq \gamma} S_{\nu}^{\alpha} S_{\nu}^{\gamma}, \quad \text{portanto,} \\ \sum_{\alpha \neq \gamma} S_{\nu}^{\alpha} S_{\nu}^{\gamma} &= \left( \sum_{\alpha} S_{\nu}^{\alpha} \right)^2 - \sum_{\nu} (S_{\nu}^{\alpha})^2. \quad (3.18) \end{aligned}$$

Substituindo a equação (3.18) em (3.17), e linearizando os termos quadráticos com ajuda da equação (1.10), obtêm-se

$$\begin{aligned} \beta f = & \frac{\beta^2 J^2}{2} (P^2 - Q^2) - \int Dz \ln \int \prod_{\alpha} D\xi_{\alpha} Tr \exp \left[ \beta J \sqrt{Q} z \sum_{\alpha} S_{\nu}^{\alpha} + \right. \\ & \left. + \beta J \sqrt{P - Q} \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} S_{\nu}^{\alpha} + \sum_{ij} \beta J_{ij}^0 S_{i\nu} S_{j\nu} \right], \quad (3.19) \end{aligned}$$

onde os campos  $z$  e  $\xi_\alpha$  são introduzidos através da linearização. Tomando o limite termodinâmico ( $N_{cl} \rightarrow \infty$ ) e o limite do número de réplicas tendendo a 0 ( $n \rightarrow 0$ ), encontra-se

$$\beta f = \frac{\beta^2 J^2}{2} (P^2 - Q^2) - \int Dz \ln \int D\xi Tr \exp(-\beta H_{ef}), \quad (3.20)$$

onde

$$H_{ef} = \sum_{ij} J_{ij}^0 S_{i\nu} S_{j\nu} - h S_\nu, \quad (3.21)$$

sendo  $h = J(\sqrt{Q}z + \sqrt{P-Q}\xi)$  é o Hamiltoniano efetivo. Deste modo, o problema original reduziu-se a um problema efetivo de um único cluster. Através do método ponto de sela, encontram-se os parâmetros

$$P = \int Dz \frac{\int D\xi \langle S_\nu S_\nu \rangle_{H_{ef}}}{\int D\xi Tr e^{-\beta H_{ef}}}, \quad (3.22)$$

que está relacionado ao momento magnético total do cluster, e

$$Q = \int Dz \left( \frac{\int D\xi \langle S_\nu \rangle_{H_{ef}}}{\int D\xi Tr e^{-\beta H_{ef}}} \right)^2, \quad (3.23)$$

é o parâmetro de ordem VS usual, onde  $\langle \dots \rangle = Tr \dots \exp(-\beta H_{ef})$ .

### 3.1.2 Aproximação de um Passo de Quebra de Simetria de Réplicas

Apesar do método de simetria de réplicas ser bastante utilizado e fornecer resultados confiáveis em relação às linhas de transição de segunda-ordem, esta aproximação apresenta problemas quanto aos resultados termodinâmicos. Por exemplo, a entropia encontrada através do método de simetria de réplicas é negativa na fase VS. Os autores de Almeida e Thouless (ALMEIDA; THOULESS, 1978) mostraram que isso ocorre pois, a solução com simetria de réplicas é instável em toda a fase VS. Entretanto, Parisi propôs um método de quebra de simetria de réplicas no qual a estabilidade da solução do VS é restabelecida com infinitos passos de quebra de simetria, onde a entropia deixa de ser negativa (PARISI, 1980). Para melhorar os resultados termodinâmicos, neste trabalho assume-se o esquema de um passo de quebra de simetria de réplicas (1P-QSR) (PARISI, 1980). Usando esta aproximação no modelo SK, por exemplo, a entropia em  $T = 0$  reduz seu valor de  $-0.16$  na solução com simetria de réplicas para  $-0.01$  para 1P-QSR, o que indica uma melhora nos resultados quando obtidos por 1P-QSR.

Nesta solução, a matriz das réplicas é parametrizada dividindo as  $n$  réplicas em  $n/a$  grupos, com  $a$  réplicas em cada grupo. Os elementos da matriz das réplicas  $Q_{\alpha\gamma}$  são parametrizados da seguinte forma:  $Q_{\alpha\gamma} = Q_1$ , se as réplicas  $\alpha$  e  $\gamma$  pertencem ao mesmo bloco,  $Q_{\alpha\gamma} = Q_0$ , se as réplicas  $\alpha$  e  $\gamma$  pertencem a blocos diferentes e os elementos da diagonal principal  $Q_{\alpha\alpha} = R$ . Abaixo é apresentado um exemplo que corresponde ao caso  $n = 6$  e  $a = 3$ .

$$Q_{\alpha\gamma} = \begin{pmatrix} R & Q_1 & Q_1 & & & \\ Q_1 & R & Q_1 & & & Q_0 \\ Q_1 & Q_1 & R & & & \\ & & & R & Q_1 & Q_1 \\ & & & Q_1 & R & Q_1 \\ & & & Q_1 & Q_1 & R \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

Assim sendo, a expressão para a energia livre por cluster é obtida

$$\beta f = \frac{\beta^2 J^2}{4} [R^2 + a(Q_1^2 - Q_0^2) - Q_1^2] - \frac{1}{a} \int Dz \ln \int Dv [K(z, v)]^a, \quad (3.25)$$

com  $K(z, v) = \int D\xi \text{Tr} e^{-\beta H_{ef}}, \int Dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{(-x^2/2)}$  ( $x = z, v$  ou  $\xi$ ), e  $H_{ef} = -\sum_{ij} J_{ij}^0 S_{i\nu}^z S_{j\nu}^z - h S_{\nu}^z$  representa o modelo efetivo de um cluster, com

$$h = J\sqrt{(Q_1 - Q_0)}v + J\sqrt{Q_0}z + J\sqrt{(R - Q_1)}\xi. \quad (3.26)$$

No limite termodinâmico, os parâmetros  $Q_1$ ,  $Q_0$  e  $R$  podem ser calculados através das condições de extremo da equação (3.25). Logo, têm-se:

$$Q_0 = \int DZ \left[ \frac{\int Dv [K(z, v)]^{a-1} \int D\xi \langle S_{\nu}^z \rangle_{H_{ef}}}{\int Dv [K(z, v)]^a} \right]^2, \quad (3.27)$$

$$Q_1 = \int DZ \frac{\int Dv [K(z, v)]^{a-2} (\int D\xi \langle S_{\nu}^z \rangle_{H_{ef}})^2}{\int Dv [K(z, v)]^a}, \quad (3.28)$$

e

$$R = \int DZ \frac{\int Dv [K(z, v)]^{a-1} \int D\xi \langle S_{\nu}^z S_{\nu}^z \rangle_{H_{ef}}}{\int Dv [K(z, v)]^a}, \quad (3.29)$$

onde  $\langle \dots \rangle_{H_{ef}} = \text{Tr} \dots \exp(-\beta H_{ef})$ .

As equações (3.27), (3.28) e (3.29) formam um conjunto de equações não-lineares acopladas, onde suas resoluções são possíveis somente através de métodos numéricos. O tratamento desse problema efetivo de um único cluster é feito numericamente, isto é, as interações intracluster são calculadas numericamente usando técnicas de diagonalização exata. O procedimento numérico usado para resolver as interações intracluster consiste basicamente em propor uma base para o Hamiltoniano do sistema, que no caso é a base dos spins de Ising, calcular o traço da matriz Hamiltoniana e então resolver as equações dos parâmetros de ordem auto-consistentemente.

### 3.2 MODELO VIDRO DE SPIN COM CLUSTERS EM UMA FORMULAÇÃO FERMIÔNICA

O modelo vidro de spin (VS) com clusters também é analisado em uma formulação fermiônica, onde os operadores de spin são escritos através dos operadores quânticos de criação e destruição (NEGELE; ORLAND, 1988). Além disso, um campo magnético transversal não-comutativo é adicionado. Esse campo transversal tem como função inverter os momentos magnéticos do sistema, fazendo com que os estados magnéticos puros se misturem, introduzindo assim flutuações quânticas (WIETHEGE; SHERRINGTON, 1986). A vantagem em utilizar a formulação fermiônica é que ela tem uma aplicação natural nos problemas de matéria condensada, onde os operadores fermiônicos podem representar elétrons que participam de outros fenômenos, como efeito Kondo (THEUMANN; COQBLIN; MAGALHAES; SCHMIDT, 2001) ou supercondutividade (MAGALHAES; SCHMIDT, 2000). Além disso, recentemente modelos fermiônicos de VS têm se mostrado úteis para a descrição de transições inversas, em particular, o congelamento inverso (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2008).

Para o tratamento deste problema de vidro de spin fermiônico com clusters, o método das réplicas com o esquema de um passo de quebra de simetria de réplicas de Parisi (1P-QSR) (PARISI, 1980) e a aproximação estática (THEUMANN; SCHMIDT; MAGALHAES, 2002) são em-

pregados. Usando o formalismo das integrais de caminho fermiônicas e introduzindo um ordenamento temporal por meio de um tempo imaginário  $\tau$ , com  $0 \leq \tau \leq \beta$  (NEGELE; ORLAND, 1988), é possível tratar o problema da não-comutatividade dos operadores de spin. Neste formalismo, os operadores fermiônicos são escritos em termos de campos de Grassmann (NEGELE; ORLAND, 1988).

O modelo fermiônico de vidro de spin com clusters em um campo transversal é representado pelo Hamiltoniano

$$\hat{H} = - \sum_{\nu\lambda}^{N_{cl}} J_{\nu\lambda} \hat{S}_{\nu}^z \hat{S}_{\lambda}^z - \sum_{\nu}^{N_{cl}} \left( \sum_{ij}^{n_s} J_{ij}^0 \hat{S}_{\nu i}^z \hat{S}_{\nu j}^z + 2\Gamma \hat{S}_{\nu}^x \right), \quad (3.30)$$

onde a soma  $\sum_{\nu\lambda}$  é realizada sobre todos os pares distintos de clusters, a soma  $\sum_{\nu}$  é feita sobre todos os clusters,  $J_{\nu\lambda}$  são variáveis aleatórias de interação de troca intercluster, que seguem uma distribuição de probabilidade gaussiana com média zero e variância  $16J^2/N_{cl}$  e  $N_{cl}$  é o número de clusters do sistema. A soma  $\sum_{ij}$  é feita sobre todos os pares distintos de sítios dentro do mesmo cluster  $\nu$ ,  $J_{ij}^0$  são variáveis de interação de troca intracluster, e  $\Gamma$  é o campo magnético aplicado transversalmente ao acoplamento de Ising. O operador  $\hat{S}_{\nu}^z$  do modelo (3.30) é dado por:  $\hat{S}_{\nu}^z = \sum_{i=1}^{n_s} \hat{S}_{i\nu}^z$ , onde  $n_s$  é o número de sítios dentro do cluster  $\nu$ . Os operadores de spin do modelo (3.30) são representados, em segunda quantização, por operadores fermiônicos (ver equação 1.26). Assim sendo, o Hamiltoniano está definido no espaço de Fock com quatro estados por sítio, como discutido na seção 1.2.3. O método adotado será o mesmo apresentado nessa seção, ou seja, ele admite dois modelos: um que permite os quatro estados por sítio (modelo 4S), mas exige uma ocupação média de  $n_s$  férmions por cluster, e outro que admite somente os estados magnéticos, isto é, restringe o operador  $\hat{S}_{i\nu}^z$  a um subespaço equivalente ao espaço dos spins (modelo 2S) (THEUMANN; SCHMIDT; MAGALHAES, 2002; ROSENOW; OPPERMANN, 1996).

Para encontrar o potencial termodinâmico e as demais quantidades termodinâmicas, as funções de partição dos modelos 2S e 4S são analisadas. A função de partição para o modelo 4S é dada por:  $Z_{4S} = Tr e^{-\beta\hat{H}}$ , enquanto que para o modelo 2S, uma restrição deve ser imposta para eliminar os estados não-magnéticos (sítios vazios ou duplamente ocupados, ver seção 1.2.3). Esta restrição é imposta pela função delta de Kronecker de tal modo que somente são contados os estados com um férmion por sítio. Assim, a função de partição para o modelo 2S pode ser escrita

$$Z_{2S} = Tr \left[ e^{-\beta\hat{H}} \prod_{\nu=1}^{N_{cl}} \prod_{j=1}^{n_s} \delta(\hat{n}_{\nu j\uparrow} + \hat{n}_{\nu j\downarrow} - 1) \right], \quad (3.31)$$

onde  $Tr$  é o traço e  $\beta = 1/T$  o inverso da temperatura. Os dois modelos podem ser representados por uma mesma expressão usando a representação integral para a função delta de Kronecker. Neste modelo, os operadores fermiônicos são escritos em termos de campos de Grassmann (NEGELE; ORLAND, 1988). Sendo assim, a função de partição que representa os dois modelos, usando o formalismo das integrais de caminho fermiônico (NEGELE; ORLAND, 1988), é dada por

$$Z\{\mu\} = \int D[\phi_j^*, \phi_j] \int_0^{2\pi} \prod_{\nu=1}^{N_{cl}} \prod_{j=1}^{n_s} \frac{dx_{\nu j}}{2\pi} e^{-\mu_{\nu j}} e^{A\{\mu\}}, \quad (3.32)$$

com o funcional  $\int D[\phi^*, \phi] = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_j \prod_{\sigma=\uparrow, \downarrow} d\phi_{j\sigma}^* d\phi_{j\sigma}$ , onde a ação é

$$A\{\mu\} = \int_0^{\beta} d\tau \left\{ \sum_{\nu}^{N_{cl}} \sum_{i=1}^{n_s} \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \phi_{j\nu\sigma}^*(\tau) \left[ \frac{\partial}{\partial \tau} + \mu_{\nu} \right] \phi_{j\nu\sigma}(\tau) - H(\phi^*(\tau), \phi(\tau)) \right\}, \quad (3.33)$$

e o Hamiltoniano, em termos dos campos de Grassmann, é dado por

$$H(\phi^*(\tau), \phi(\tau)) = - \sum_{\nu\lambda} J_{\nu\lambda} S_{\nu}^z(\tau) S_{\lambda}^z(\tau) - \sum_{\nu} \left( \sum_{ij} J_{ij}^o S_{i\nu}^z(\tau) S_{j\nu}^z(\tau) + 2\Gamma \sum_i S_{i\nu}^x(\tau) \right), \quad (3.34)$$

$\phi_{i\nu}^*(\tau)$  e  $\phi_{i\nu}(\tau)$  são campos de Grassmann associados aos operadores de criação e destruição (NEGELE; ORLAND, 1988),  $\mu_{\nu}$  é o potencial químico, que tem a função de controlar a ocupação média por cluster para o modelo 4S, no qual  $\mu_{\nu} = 0$ . Isso corresponde à uma ocupação média de  $n_s$  férmions por cluster. Para o modelo 2S,  $\mu_{\nu} = ix_{\nu}$ , onde os estados não-magnéticos não são permitidos (POPOV; FEDOTOV, 1988).

Os operadores  $\hat{S}_{\nu}^z$  e  $\hat{S}_{\nu}^x$  escritos em termos de campos de Grassmann ficam

$$S_{\nu}^z(\tau) = \frac{1}{2} \sum_{\nu} \sum_{j=1}^{n_s} [\phi_{j\nu\uparrow}(\tau)^* \phi_{j\nu\uparrow}(\tau) - \phi_{j\nu\downarrow}(\tau)^* \phi_{j\nu\downarrow}(\tau)], \quad (3.35)$$

e

$$S_{\nu}^x(\tau) = \frac{1}{2} \sum_{\nu} \sum_{j=1}^{n_s} [\phi_{j\nu\uparrow}(\tau)^* \phi_{j\nu\downarrow}(\tau) + \phi_{j\nu\downarrow}(\tau)^* \phi_{j\nu\uparrow}(\tau)]. \quad (3.36)$$

Para o cálculo do potencial termodinâmico, o método das réplicas ( $\ln Z = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n}$ ) é adotado (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978). Deste modo, a média configuracional da função de partição replicada, com a notação  $Z_n = Tr \int dJ_{ij} P(J_{ij}) e^{-\beta H^{\alpha}}$ , toma a forma

$$Z_n = \int \prod_{\nu\lambda} \sqrt{\frac{N_{cl}}{32\pi J^2}} dJ_{\nu\lambda} P(J_{\nu\lambda}) \int_0^{2\pi} \prod_{\nu} \prod_j \frac{1}{2\pi} dx_{\nu j} e^{-i\mu_{\nu j}} \int D[\phi_{\nu}^*, \phi_{\nu}] \times \exp \left\{ \sum_{\alpha} B_{\alpha} - \sum_{\nu\lambda} \frac{J_{\nu\lambda}^2 N_{cl}}{32J^2} + \sum_{\alpha} \sum_{\nu\lambda} J_{\nu\lambda} \int_0^{\beta} d\tau S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) S_{\lambda}^{z\alpha}(\tau) \right\}, \quad (3.37)$$

com

$$B_{\alpha} = - \int_0^{\beta} d\tau \left[ \sum_{\nu} \phi_{\nu}^*(\tau) \left( \frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) \phi_{\nu}(\tau) + \sum_{\nu} \sum_{ij} J_{ij}^o S_{i\nu}^{z\alpha}(\tau) S_{j\nu}^{z\alpha}(\tau) + 2\Gamma \sum_{\nu} \sum_i S_{i\nu}^{x\alpha}(\tau) \right], \quad (3.38)$$

e  $\alpha$  denota o índice de réplica, com  $\alpha = 1, \dots, n$ .

Reescrevendo a equação (3.37) na forma de quadrado perfeito e calculando a média sobre as variáveis  $J_{\nu\lambda}$ , encontra-se

$$Z_n = \int_0^{2\pi} \prod_{\nu} \prod_j \frac{1}{2\pi} dx_{\nu j} e^{-i\mu_{\nu j}} \int D[\phi_{\nu}^*, \phi_{\nu}] \exp \left\{ \sum_{\alpha} B_{\alpha} + \frac{8J^2}{N_{cl}} \sum_{\nu\lambda} \left( \sum_{\alpha} \int_0^{\beta} d\tau S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) S_{\lambda}^{z\alpha}(\tau) \right)^2 \right\}. \quad (3.39)$$

Na equação (3.39), há interações entre os clusters  $\nu$  e  $\lambda$ . Pode-se obter uma expressão que



contenha apenas termos de um único cluster reescrevendo o último termo da equação (3.39) da forma

$$\begin{aligned} \sum_{\nu\lambda} \left( \sum_{\alpha} \int_0^{\beta} d\tau S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) S_{\lambda}^{z\alpha}(\tau) \right)^2 &= \sum_{\nu\lambda} \left[ \left( \sum_{\alpha} \int_0^{\beta} d\tau S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) S_{\lambda}^{z\alpha}(\tau) \right) \times \right. \\ &\quad \left. \times \left( \sum_{\beta} \int_0^{\beta} d\tau' S_{\nu}^{z\beta}(\tau') S_{\lambda}^{z\beta}(\tau') \right) \right] \\ &= \sum_{\nu} \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \left( \sum_{\alpha,\beta} S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) S_{\nu}^{z\beta}(\tau') \right)^2. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Introduzindo a equação (3.40) em (3.39) para então linearizar o termo quadrático, usando a transformação (1.10), obtêm-se

$$\begin{aligned} Z_n &= \int \prod_{\alpha,\gamma} DQ_{\alpha\gamma}(\tau, \tau') e^{-N_{cl} \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \sum_{\alpha,\gamma} \frac{Q_{\alpha\gamma}^2(\tau, \tau')}{2}} \times \\ &\quad \times \int_0^{2\pi} \prod_{\nu} \prod_j \frac{1}{2\pi} dx_{\nu j} e^{-i\mu_{\nu j}} \int D[\phi_{\nu}^*, \phi_{\nu}] \exp \left[ \sum_{\alpha} B_{\alpha} + \right. \\ &\quad \left. + 4J^2 \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \sum_{\nu} \sum_{\alpha\gamma} S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) S_{\nu}^{z\gamma}(\tau') Q_{\alpha\gamma}(\tau, \tau') \right], \end{aligned} \quad (3.41)$$

onde  $Q_{\alpha\gamma}(\tau, \tau')$  são campos auxiliares que surgem através da linearização e estão relacionados aos elementos da matriz das réplicas. Têm-se assim, um problema efetivo de  $n$  réplicas e de um único cluster, porém com interações entre réplicas. Dentro dessa teoria das réplicas, os campos  $Q_{\alpha\gamma}(\tau, \tau')$  possuem uma interpretação relacionada ao parâmetro de ordem VS. Para mostrar isso, a equação (3.41) é reescrita da seguinte forma

$$\begin{aligned} Z_n &= \int \prod_{\alpha,\gamma} DQ_{\alpha\gamma}(\tau, \tau') \exp \left\{ -N_{cl} \left[ \frac{J^2}{2} \sum_{\alpha,\gamma} \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' Q_{\alpha\gamma}^2(\tau, \tau') - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{N_{cl}} \ln \left[ \int_0^{2\pi} \prod_{\nu} \prod_j \frac{1}{2\pi} dx_{\nu j} e^{-i\mu_{\nu j}} \int D[\phi_{\nu}^*, \phi_{\nu}] \times \exp \left[ \sum_{\alpha} B_{\alpha} + \right. \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. + 4J^2 \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \sum_{\nu} \sum_{\alpha\gamma} S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) S_{\nu}^{z\gamma}(\tau') Q_{\alpha\gamma}(\tau, \tau') \right] \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.42)$$

No limite termodinâmico ( $N_{cl} \rightarrow \infty$ ), as integrais sobre o funcional  $Q_{\alpha\gamma}(\tau, \tau')$  podem ser calculadas pela equação ponto de sela (FISCHER; HERTZ, 1991). Então, a diferenciação funcional para  $Q_{\alpha\gamma}(\tau, \tau')$  resulta em

$$Q_{\alpha\gamma}(\tau, \tau') = 4 \langle T S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) S_{\nu}^{z\gamma}(\tau') \rangle, \quad (3.43)$$

para  $\alpha \neq \gamma$ , e

$$Q_{\alpha\alpha}(\tau, \tau') = 4 \langle T S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) S_{\nu}^{z\alpha}(\tau') \rangle, \quad (3.44)$$

para  $\alpha = \gamma$ , onde  $T$  é o ordenamento temporal e  $\langle \dots \rangle$  significa a média termodinâmica e a média configuracional. O parâmetro  $Q_{\alpha\gamma}(\tau, \tau')$  está relacionado ao parâmetro de ordem VS e a correlação  $Q_{\alpha\alpha}(\tau, \tau')$  ao momento magnético total do cluster.

Neste problema, assume-se duas aproximações: a primeira considera que não há dependência temporal nos elementos de matriz  $Q_{\alpha\gamma}$ , ou seja, a aproximação estática é assumida:

$Q_{\alpha\gamma}(\tau, \tau') = Q_{\alpha\gamma}$ . Além disso, o esquema de quebra de simetria de réplicas de Parisi (PARISI, 1980) com um passo de quebra de simetria de réplicas é usado. Neste caso, a matriz das réplicas é parametrizada dividindo as  $n$  réplicas em  $n/a$  grupos, com  $a$  réplicas em cada grupo. Assim,  $Q_{\alpha\alpha} = P$ ,

$$Q_{\alpha\gamma} = Q_1, \text{ se } I(\alpha/a) = I(\gamma/a), \quad (3.45)$$

$$Q_{\alpha\gamma} = Q_0, \text{ se } I(\alpha/a) \neq I(\gamma/a), \quad (3.46)$$

onde  $I(x)$  dá o menor inteiro que é maior ou igual a  $x$ . Portanto, a expressão para o potencial termodinâmico por cluster ( $\Omega = \frac{\Omega}{N_{cl}}$ ) em termos dos operadores de spin fica

$$\beta\Omega = \left[ \frac{\beta^2 J^2}{2} (P^2 + a(Q_1^2 - Q_0^2) - Q_1^2) - \frac{1}{a} \int DZ \ln \int Dv \theta(Z, v)^a \right], \quad (3.47)$$

com  $\theta(Z, v) = \int D\xi \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}_{ef}}$ ,  $\int Dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-(x^2/2)}$  ( $x = Z, v$  ou  $\xi$ ), e  $\hat{H}_{ef} = -\sum_{ij} J_{ij}^0 \hat{S}_{i\nu}^z \hat{S}_{j\nu}^z - 2h \hat{S}_\nu^z - 2\Gamma \hat{S}_\nu^x - \mu \sum_i \hat{N}_{i\nu}$ , onde

$$h = J\sqrt{2(Q_1 - Q_0)}v + J\sqrt{2Q_0}z + J\sqrt{2(P - Q_1)}\xi. \quad (3.48)$$

Sendo assim, obtêm-se um problema efetivo de um único cluster. No limite termodinâmico, os parâmetros  $Q_1$ ,  $Q_0$  e  $P$  podem ser calculados através das condições de extremo da equação (3.47). Assim:

$$Q_0 = \int DZ \left[ \frac{\int Dv \theta(Z, v)^{a-1} \int D\xi 2 \langle \hat{S}_\nu^z \rangle_{H_{ef}}}{\int Dv \theta(Z, v)^a} \right]^2, \quad (3.49)$$

$$Q_1 = \int DZ \frac{\int Dv \theta(Z, v)^{a-2} \left( \int D\xi 2 \langle \hat{S}_\nu^z \rangle_{H_{ef}} \right)^2}{\int Dv \theta(Z, v)^a}, \quad (3.50)$$

e

$$P = \int DZ \frac{\int Dv \theta(Z, v)^{a-1} \int D\xi \int_0^\beta d\tau 4 \langle \hat{S}_\nu^z \hat{S}_\nu^z(\tau) \rangle_{H_{ef}}}{\beta \int Dv \theta(Z, v)^a}, \quad (3.51)$$

onde  $\langle \dots \rangle_{H_{ef}} = \text{Tr} T \dots \exp(-\beta \hat{H}_{ef})$ .

As demais quantidades termodinâmicas são derivadas a partir do potencial termodinâmico e de acordo com as relações termodinâmicas. O calor específico, por exemplo, é derivado através da relação:  $C_v = (\frac{\partial U}{\partial T})$ , onde  $U = -\frac{\partial}{\partial \beta}(\beta\Omega)$  é a energia interna. Logo,

$$C_v = \frac{d}{dT} \left\{ \frac{-\beta J^2}{2} [P^2 + a(Q_1^2 - Q_0^2) - Q_1^2] - \int DZ \frac{\int Dv \theta(Z, v)^{a-1} \int D\xi \langle \sum_{i,j}^{n_s} J_{ij}^0 \hat{S}_{\nu i}^z \hat{S}_{\nu j}^z \rangle_{\hat{H}_{ef}}}{\int Dv \theta(Z, v)^a} - 2\Gamma \int DZ \frac{\int Dv \theta(Z, v)^{a-1} \int D\xi \langle \hat{S}_\nu^x \rangle_{\hat{H}_{ef}}}{\int Dv \theta(Z, v)^a} - \mu \eta \right\}, \quad (3.52)$$

onde  $\eta$  é a ocupação média por cluster, sendo encontrada através da relação:  $\eta = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}$ . Assim,

$\eta = \int DZ \frac{\int Dv(\theta(Z,v))^{a-1}}{\int Dv(\theta(Z,v))^a} \int D\xi Tr T \sum_i \eta_i e^{-\beta \hat{H}_{ef}}$ . A entropia  $S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T}$  é dada por

$$\begin{aligned}
S &= -\frac{3}{2}\beta^2 J^2 [p^2 + a(Q_1^2 - Q_0^2) - Q_1^2] - \\
&- J_{ij}^0 \beta \int DZ \frac{\int Dv(\theta(Z,v))^{a-1}}{\int Dv(\theta(Z,v))^a} \int D\xi Tr \hat{S}_{\nu i} \hat{S}_{\nu j} e^{-\beta \hat{H}_{ef}} + \\
&+ \frac{1}{a} \int DZ \ln \int Dv(\theta(Z,v))^a - \\
&- \beta \mu \int DZ \frac{\int Dv(\theta(Z,v))^{a-1}}{\int Dv(\theta(Z,v))^a} \int D\xi Tr \sum_i \eta_i e^{-\beta \hat{H}_{ef}} , \tag{3.53}
\end{aligned}$$

e a susceptibilidade linear encontra-se através da relação:  $\chi = -\frac{\partial^2 \Omega}{\partial H^2}$ . Logo,

$$\chi = \beta [P - Q_1 + a(Q_1 - Q_0)] . \tag{3.54}$$

## 4 RESULTADOS

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos a partir do modelo de vidro de spin (VS) com clusters. Na seção 4.1, são exibidos os resultados para o modelo de VS com clusters na presença de um campo magnético transverso. Na seção 4.2, é investigado o surgimento de congelamento inverso utilizando uma versão fermiônica do modelo de VS com clusters. A origem do congelamento inverso também é analisada em um modelo de VS com clusters utilizando spins de Ising (seção 4.3). O papel da frustração geométrica sobre o congelamento inverso é estudado na seção 4.4.

### 4.1 MODELO VIDRO DE SPIN COM CLUSTERS EM UM CAMPO TRANSVERSO

Nesta seção, o modelo VS com clusters na presença de um campo magnético transverso  $\Gamma$  é analisado. Esta análise é realizada para uma interação intracluster ferromagnética ( $J_0 > 0$ ) (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010). Os resultados são obtidos a partir das equações encontradas na seção 3.2.

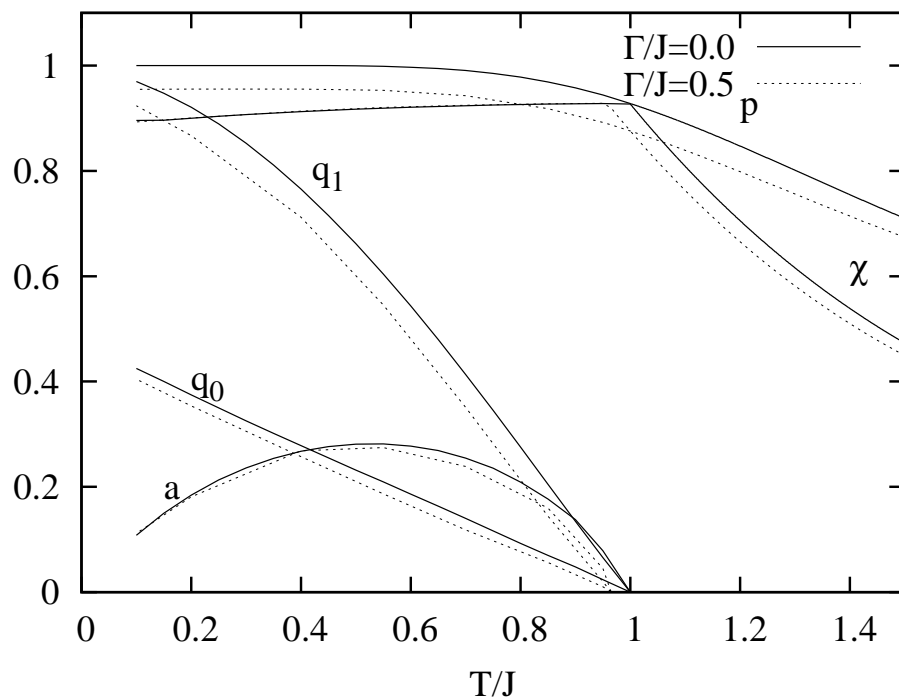


Figura 4.1: Parâmetros de ordem com 1P-QSR normalizados e susceptibilidade linear em função de  $T/J$  para  $J_0/J = 3.80$ ,  $\Gamma = 0$  (linhas sólidas) e  $\Gamma/J = 0.5$  (linhas pontilhadas) (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010).

Primeiramente, na figura 4.1, são apresentados os parâmetros de ordem normalizados:  $q_0 = Q_0/n_s^2$ ,  $q_1 = Q_1/n_s^2$ ,  $p = P/n_s^2$ ,  $a$  e a susceptibilidade linear  $\chi$  em função da temperatura  $T/J$  para  $\Gamma = 0$  e  $\Gamma > 0$  ( $\Gamma/J = 0.5$ ), com uma interação intracluster constante  $J_0/J = 3.80$  e um cluster de tamanho  $n_s = 6$ <sup>1</sup>. Para propósitos numéricos,  $J$  é escolhido tal que a temperatura

<sup>1</sup> $n_s = 6$  significa que cada cluster possui 6 spins.

de transição  $T_f/J = 1$  quando  $\Gamma = 0$  em todos os resultados, e as grandezas  $J_0$ ,  $T$  e  $\Gamma$  são dadas em unidades de  $J$ . Analisando os parâmetros de ordem, a altas temperaturas têm-se a fase paramagnética (PM), onde  $p \neq 0$  e  $q_0 = q_1 = 0$ . Diminuindo a temperatura, a solução com quebra de simetria de réplicas aparece ( $q_0 \neq q_1$ ), localizando assim a temperatura de transição à fase VS. O momento magnético total do cluster  $p$  depende da temperatura e também de  $J_0$ . A susceptibilidade linear apresenta um pico agudo em  $T_f$ , esperado para um sistema físico VS, como discutido na seção 1.1. Para  $\Gamma/J = 0.5$  (linhas pontilhadas),  $p$  diminui em relação ao resultado para  $\Gamma = 0$  (linhas cheias), assim como  $T_f$  (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010).

Na figura 4.2(a), é apresentada a curva do calor específico  $C_v$  em função de  $T/J$  para o mesmo tamanho de cluster  $n_s = 6$ , vários valores de interação intracluster  $J_0$  para (a)  $\Gamma = 0$  e (b)  $\Gamma = 1$ . Nesta figura,  $C_v$  apresenta uma pequena descontinuidade em  $T_f/J = 1$  com um máximo em  $T^*$ , que é deslocado a temperaturas mais altas quando  $J_0$  aumenta para  $\Gamma = 0$ . Estes resultados sugerem que  $T^*$  tem uma forte dependência com as interações ferromagnéticas de curto-alcance, enquanto a descontinuidade em  $T_f$  está relacionada ao congelamento dos momentos magnéticos dos clusters (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010). Este comportamento de  $C_v$  para  $\Gamma = 0$  reproduz qualitativamente os resultados obtidos por Soukoulis para o modelo clássico de VS com clusters (SOUKOULIS, 1978). Quando  $\Gamma$  aumenta (figura 4.2(b)), o máximo em  $T^*$  pode ser localizado em temperaturas mais altas enquanto  $T_f$  diminui.

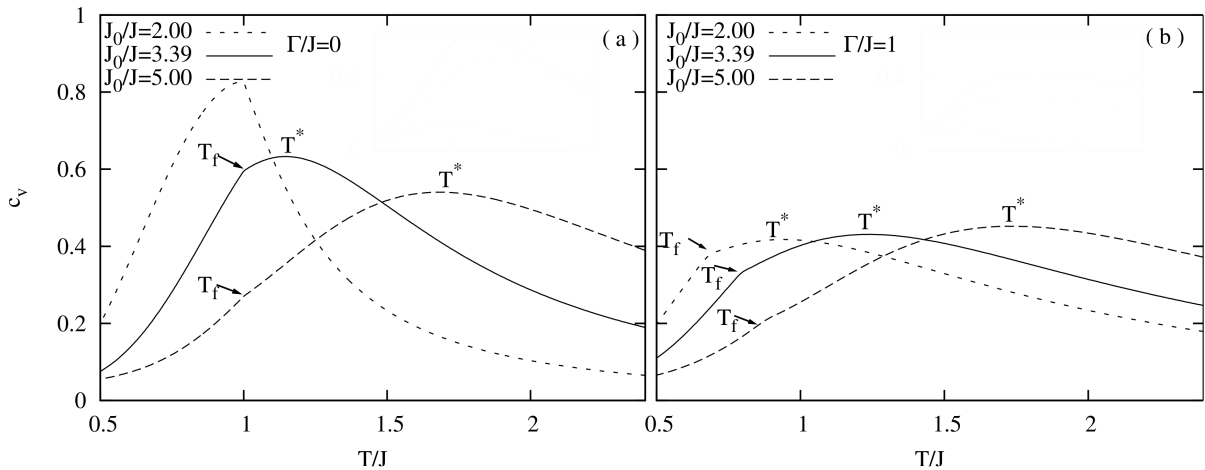


Figura 4.2: Calor específico versus  $T/J$  para  $n_s = 6$  e  $J_0/J = 2.0, 3.39$  e  $5.0$  para (a)  $\Gamma/J = 0.0$  e (b)  $\Gamma/J = 1.0$  (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010).

Na figura 4.3 é apresentado o comportamento do  $C_v$  e da susceptibilidade linear  $\chi$  em função de  $T$  para os mesmos valores de  $J_0$  da figura 4.2, porém, para um cluster maior ( $n_s = 9$ ) com (a)  $\Gamma = 0$  e (b)  $\Gamma/J = 1$ . A curva do  $C_v$  mostra que  $T^*$  aparece a temperaturas mais altas quando  $n_s$  aumenta de 6 (figura 4.2) para 9 (figura 4.3) com o mesmo valor de  $J_0/J$ . Além disso, o aumento de  $J_0$  também desloca  $T^*$  a temperaturas mais altas. Portanto, a presença de  $\Gamma$  aumenta a distância entre  $T^*$  e  $T_f$ , no qual  $T_f$  é diminuído por  $\Gamma$ , enquanto  $T^*$  pode aumentar. No detalhe da figura 4.3, está representado o comportamento de  $\chi$ , o qual exibe um pico agudo em  $T_f$  para todas as intensidades de interação intracluster ferromagnética  $J_0$  e mesmo para  $\Gamma > 0$  (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010).

Na figura 4.4(a), a interação  $J_0/J$  é escolhida de modo que a razão  $T^*/T_f \approx 1.28$  é mantida para vários valores de  $n_s$  com  $\Gamma = 0$ . Quando  $n_s$  aumenta, o valor de  $J_0$  deve ser reduzido para manter a mesma razão  $T^*/T_f$ . Isto significa que  $T^*$  também é deslocado para temperaturas mais altas quando  $n_s$  aumenta para o mesmo valor de  $J_0$ , e a descontinuidade em  $T_f$  gradualmente desaparece. Este comportamento sugere que a curva do  $C_v$  pode apresentar um máximo acima de  $T_f$  sem nenhuma descontinuidade em  $T_f$  para um cluster suficientemente grande e uma interação intracluster ferromagnética (ver figura 4.4(a) para  $n_s = 12$ ) (ZIMMER;

SILVA; MAGALHAES, 2010). Estas características podem indicar que uma ordem ferromagnética de curto-alcance é desenvolvida antes da temperatura de transição à fase VS, no qual uma considerável quantidade de graus de liberdade dos spins congelam acima de  $T_f$  (SOUKOULIS; LEVIN, 1978). Na figura 4.4(b), são analisados os resultados para  $\Gamma > 0$ . Como discutido anteriormente,  $\Gamma$  aumenta a separação entre  $T_f$  e  $T^*$ . Assim, a razão  $T^*/T_f$  aumenta com  $\Gamma$ . Portanto, os efeitos quânticos podem produzir uma situação na qual  $C_v$  apresenta um máximo característico de sistemas físicos VS, mas que está muito acima de  $T_f$ . Este comportamento é o mesmo encontrado pelos autores Quilliam et. al. para o composto de  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$  a baixas concentrações (QUILLIAM; MENG; MUGFORD; KYCIA, 2008; QUILLIAM; MUGFORD; GOMEZ; KYCIA; KYCIA, 2007).

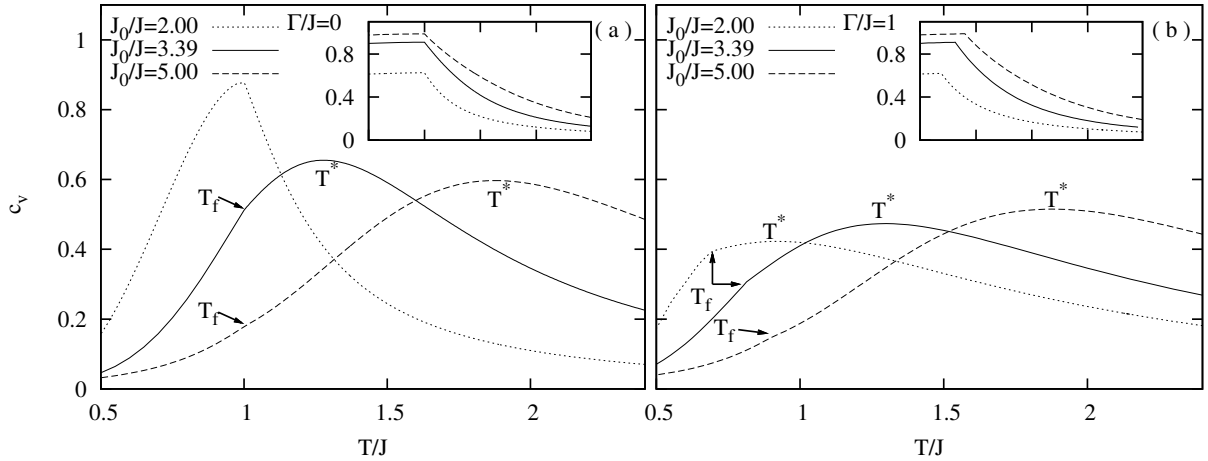


Figura 4.3: Calor específico versus  $T/J$  para  $n_s = 9$  e  $J_0/J = 2.0, 3.39$  e  $5.0$  para (a)  $\Gamma/J = 0$  e (b)  $\Gamma/J = 1.0$ . No detalhe, o comportamento de  $\chi$  correspondente a cada  $J_0$  (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010).

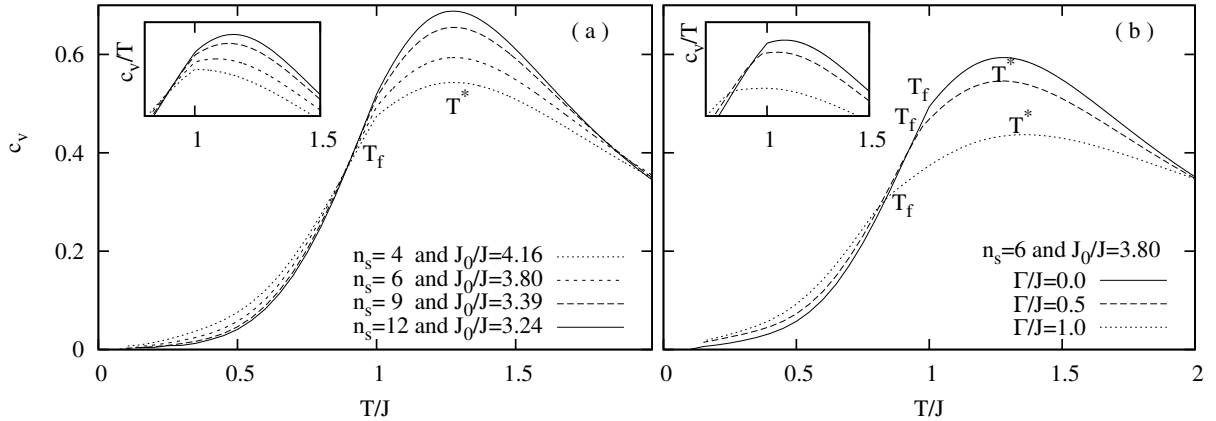


Figura 4.4: Calor específico versus  $T/J$  para: (a)  $n_s = 4, 6, 9$  e  $12$  com  $J_0/J$  escolhido para manter o mesmo  $T^*/T_f$  com  $\Gamma = 0$ ; (b)  $n_s = 6$  e  $J_0/J = 3.8$  para  $\Gamma/J = 0, 0.5$  e  $1.0$  (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010).

A figura 4.5 mostra diagramas de fase  $T/J$  versus  $\Gamma/J$  para diversos  $n_s$  e  $J_0$ . A fase VS ocorre abaixo de  $T_f$ . Aumentando  $\Gamma$ ,  $T_f$  diminui até um ponto crítico quântico (PCQ) em  $\Gamma = \Gamma_c$ . A fase PM é encontrada a altas temperaturas ou para  $\Gamma > \Gamma_c$ . Na figura 4.5(a), a interação intracluster ferromagnética é aumentada para  $n_s$  fixo:  $n_s = 6$ . Neste caso, o PCQ é deslocado para valores maiores de  $\Gamma$  quando  $J_0$  aumenta. Isto é uma consequência da competição entre o processo quântico de flipagem e as interações ferromagnéticas de curto-alcance. Entretanto,

o mecanismo quântico de flipagem é capaz de destruir a fase ordenada (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010). Na figura 4.5(b), o tamanho do cluster é aumentado para o mesmo valor de  $J_0/J = 3.39$ . Neste caso,  $\Gamma_c$  apresenta um pequeno deslocamento para valores maiores com aumento de  $n_s$ . Portanto,  $\Gamma_c$  também depende de  $n_s$ .

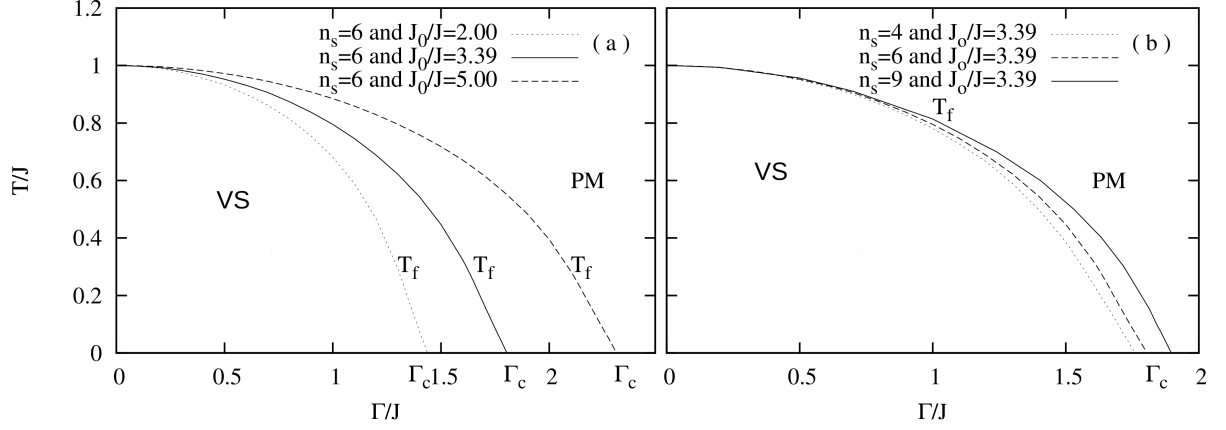


Figura 4.5: (a) Diagramas de fase  $T \times \Gamma$  para  $n_s = 6$  e três valores de  $J_0/J$ :  $J_0 = 2.0, 3.39$  e  $5.0$ . (b) Diagramas de fase  $T \times \Gamma$  para  $J_0/J = 3.39$  e três valores de  $n_s$ :  $n_s = 4, 6$  e  $9$  (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010).

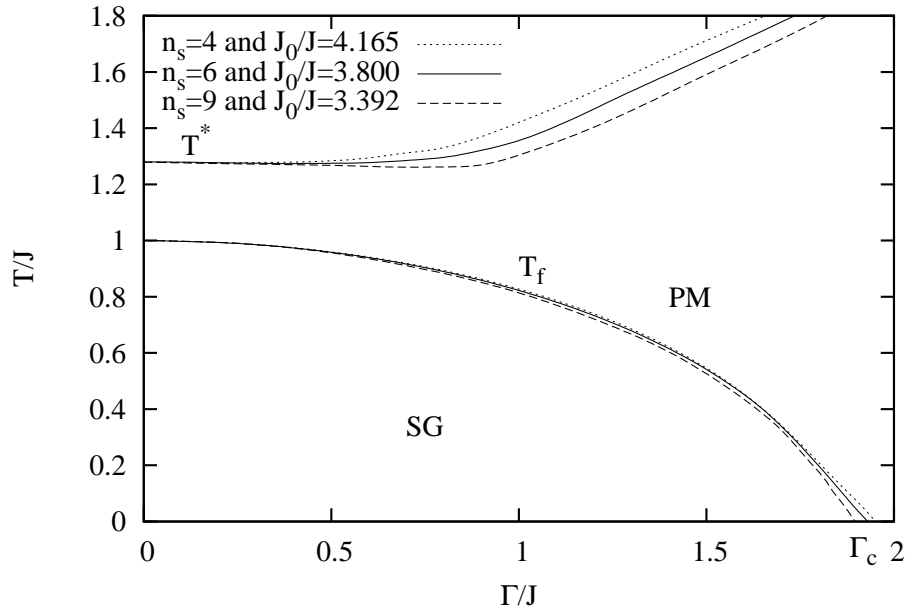


Figura 4.6: Comportamento de  $T_f$  e  $T^*$  em função de  $\Gamma$ , onde  $n_s$  e  $J_0/J$  são escolhidos para manter  $T^*/T_f = 1.28$  (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010).

A figura 4.6 mostra a dependência de  $T^*$  e  $T_f$  em função de  $\Gamma$  com mais detalhes.  $T^*$  pode aumentar com o aumento de  $\Gamma$ , enquanto  $T_f$  diminui. Assim,  $T^*$  e  $T_f$  têm diferentes comportamentos em relação a  $\Gamma$ . Logo, o aumento de  $\Gamma$  faz com que a separação entre  $T^*$  e a temperatura de transição aumente.

Desse modo, conclui-se a partir destes resultados que o modelo VS com clusters melhora a descrição de  $C_v$  quando comparado aos modelos com spins canônicos. A partir deste modelo, a curva de  $C_v$  em função de  $T$  pode apresentar um máximo arredondado em  $T^*$  acima de  $T_f$ , sendo  $T^*$  dependente de  $J_0$  e de  $n_s$ . Além disso, o aumento de  $\Gamma$  desloca  $T^*$  a temperaturas mais altas enquanto  $T_f$  diminui. Conseqüentemente, o aumento de  $\Gamma$  aumenta a distância entre  $T^*$  e  $T_f$ .

(ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010). Logo, a curva do  $C_v$  pode apresentar  $T^*$  muito acima de  $T_f$ , comportamento que é encontrado nas referências (QUILLIAM; MUGFORD; GOMEZ; KYCIA; KYCIA, 2007; QUILLIAM; MENG; MUGFORD; KYCIA, 2008) para a liga  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$  em baixas concentrações de Ho. Esses resultados estão publicados em Phys. A, vol. 389, p. 5594-5601 (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010).

## 4.2 CONGELAMENTO INVERSO EM UM MODELO FERMIÔNICO DE VIDRO DE SPIN COM CLUSTERS

Nesta seção, são apresentados os resultados para o modelo fermiônico vidro de spin com clusters em um campo transverso  $\Gamma$  no ensemble grão-canônico para uma interação intracluster ferromagnética ( $J_0 > 0$ ). Nesta análise, considera-se os quatro estados do espaço de Fock (modelo 4S) para investigar o aparecimento de congelamento inverso, onde o potencial químico  $\mu$  controla a ocupação média dos sítios.

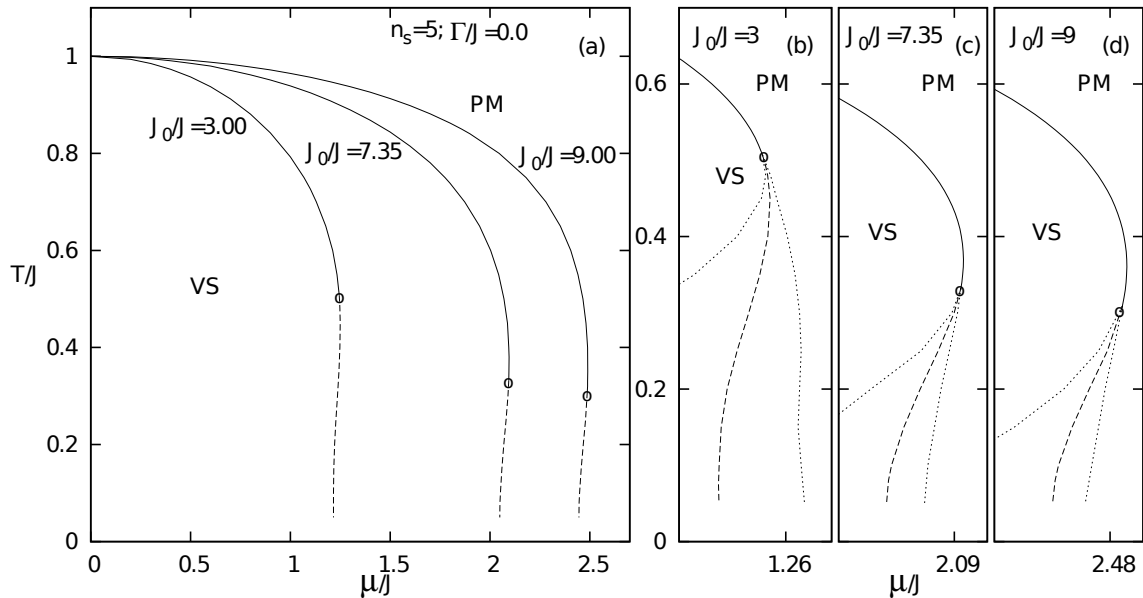


Figura 4.7: Diagramas de fase  $T/J$  versus  $\mu/J$  para  $\Gamma/J = 0$  e  $n_s = 5$  quando  $J_0/J = 3.00$ ,  $7.35$  e  $9.00$ . As linhas sólidas representam transições de segunda ordem entre as fases PM e VS, enquanto as linhas tracejadas representam transições de primeira ordem. Figuras (b), (c) e (d) mostram as linhas de primeira ordem em detalhes, onde as linhas pontilhadas são as linhas espinodais (ZIMMER; SILVA; MORAIS; MAGALHAES, 2011).

A figura 4.7(a) mostra diagramas de fase  $T/J$  versus potencial químico  $\mu/J$  para vários valores de  $J_0$  com  $\Gamma/J = 0$  e  $n_s = 5$ . As figuras 4.7(b), (c) e (d) mostram a vizinhança do ponto tricrítico em detalhes para cada um dos diagramas da figura 4.7(a), onde as linhas pontilhadas representam as espinodais das soluções paramagnética (PM) e VS. As linhas espinodais delimitam a região de validade das soluções PM e VS. Os diagramas  $T/J \times \mu/J$  mostram uma transição de segunda ordem a partir da fase PM, a altas temperaturas, para a fase VS quando a temperatura diminui, para  $\mu$  pequeno. O aumento de  $\mu$ , diminui a temperatura de transição  $T_f$  até um ponto tricrítico, após o qual a transição torna-se de primeira ordem ( $T_{1f}$ ). Um ponto importante destes diagramas de fase é a presença de uma transição reentrante a partir da fase PM a fase VS sob aquecimento para uma certa região de  $\mu$ . Esta reentrância está relacionada ao congelamento inverso, como pode ser confirmado através da análise da curva da entropia em função de



$T$  exibida na figura 4.9. Esta descrição das linhas de transição está de acordo com os resultados encontrados para o modelo VS fermiônico sem clusters, discutido na seção 2.2.3 (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2008). Entretanto, a interação  $J_0$  introduz importantes mudanças nas linhas de transição. Por exemplo, o aumento de  $J_0$  aumenta a região VS no plano  $T/J \times \mu/J$ . Além disso, a posição do ponto tricrítico é afetada por  $J_0$ , tal que a transição reentrante pode começar em uma região de transição de segunda ordem quando  $J_0$  é suficientemente grande (ver figuras 4.7(c) e 4.7(d)). O ponto tricrítico é localizado quando as linhas espinodais das soluções VS e PM convergem ao mesmo ponto. A região delimitada pelas espinodais podem apresentar múltiplas soluções VS e PM. Neste caso, a linha de primeira ordem é localizada quando o menor potencial grão-canônico da solução VS é igual ao da solução PM (COSTA; YOKOI; SALINAS, 1994).

Na figura 4.8 são apresentados diagramas  $T/J \times \mu/J$  para  $n_s = 5$  e os mesmos  $J_0$  utilizados na figura (4.7), porém para  $\Gamma = 2.2$ . Neste caso, as linhas de transição como um todo são afetadas. A linha crítica  $T_f$  é diminuída, assim como a localização do ponto tricrítico, que é deslocado para temperaturas mais baixas e potencial químico mais altos quando comparados aos resultados para  $\Gamma = 0$ . A mudança mais significativa ocorre com a transição reentrante, que é reduzida até ser completamente destruída pelas flutuações quânticas. Este comportamento pode ser ilustrado pelos diagramas de fase para  $J_0/J = 7.35$  e  $\Gamma/J = 2.2$  da figura 4.8(b), que exhibe transições de segunda e primeira ordem PM/VS sem reentrância.

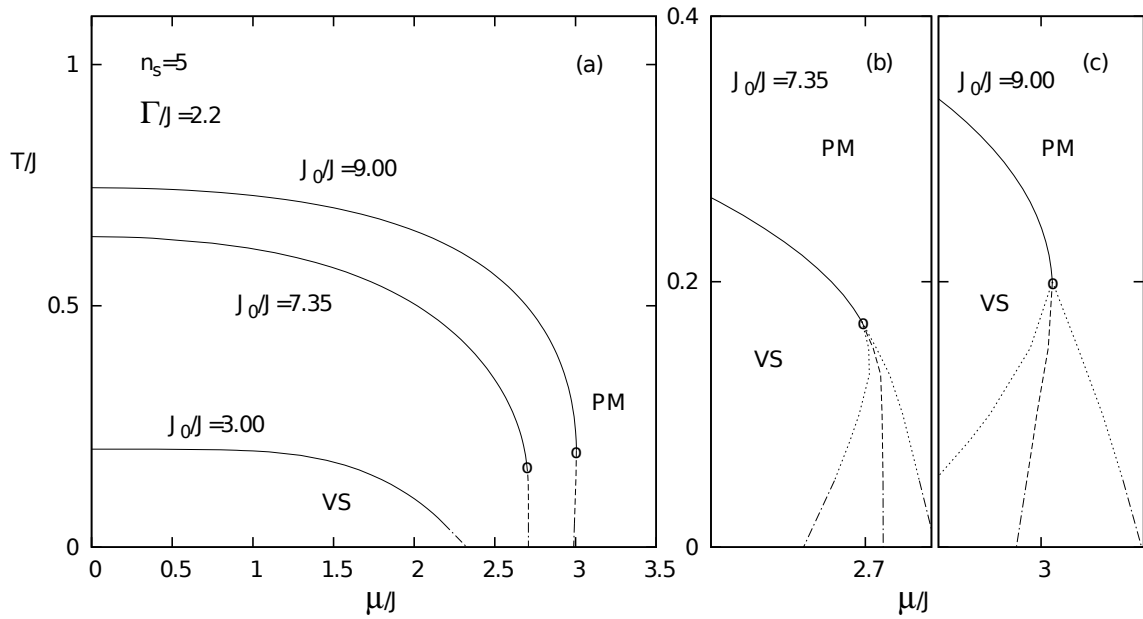


Figura 4.8: Diagramas de fase  $T/J$  versus  $\mu/J$  são exibidos para  $\Gamma/J = 2.2$  e  $n_s = 5$  com  $J_0/J = 3.00$ , 7.35 e 9.00. Figuras (b) e (c) mostram a linha de primeira ordem em detalhes. As linhas pontilhadas são as espinodais das soluções PM e VS e a linha tracejada a transição de primeira ordem (ZIMMER; SILVA; MORAIS; MAGALHAES, 2011).

A entropia  $S$  em função da temperatura  $T$  exibida na figura 4.9, é obtida a partir dos diagramas de fase das figura 4.7 e 4.8, onde escolheu-se o diagrama para  $J_0/J = 7.35$ . O valor de  $\mu/J$  é escolhido para a região PM logo após a transição. Deste modo, para  $\Gamma = 0$ , têm-se os resultados para  $\mu/J = 2.07$  (linha sólida), onde a reentrância é de primeira ordem, e  $\mu/J = 2.094$  (linha tracejada no detalhe da figura 4.9), onde a reentrância ocorre para transição de segunda ordem. Nestes casos, a fase PM a baixas temperaturas apresenta uma entropia menor do que a entropia da fase VS. Isto significa que uma inversão da relação da ordem usual entre as entropias da fase VS e PM aparece, o que caracteriza a existência de um congelamento inverso. Para  $\Gamma = 2.2$ , linha pontilhada da figura 4.9, a entropia da fase VS torna-se menor do que a entropia da fase PM para toda região de temperatura. Esta curva da entropia é obtida com  $\mu/J = 2.68$ , no

qual a transição de primeira ordem PM/VS aparece a mesma temperatura que foi analisado para  $\Gamma = 0$  e  $J_0/J = 7.35$ . Portanto, esses resultados indicam que  $\Gamma$  suprime o congelamento inverso. Além disso, o deslocamento das linhas de transição por  $\Gamma$  também depende de  $J_0$ . Em outras palavras, para o mesmo valor de  $\Gamma$ , os efeitos quânticos de flipagem são mais pronunciados para pequenas intensidades de  $J_0$ . Isto sugere que o aumento de  $J_0$  aumenta o acoplamento FE dos spins dentro dos clusters, o qual requer valores maiores de  $\Gamma$  para produzir efeitos quânticos de flipagem capazes de destruir a ordem intercluster VS e a transição inversa (ver figura 4.8(c) para  $J_0/J = 9.00$ ).

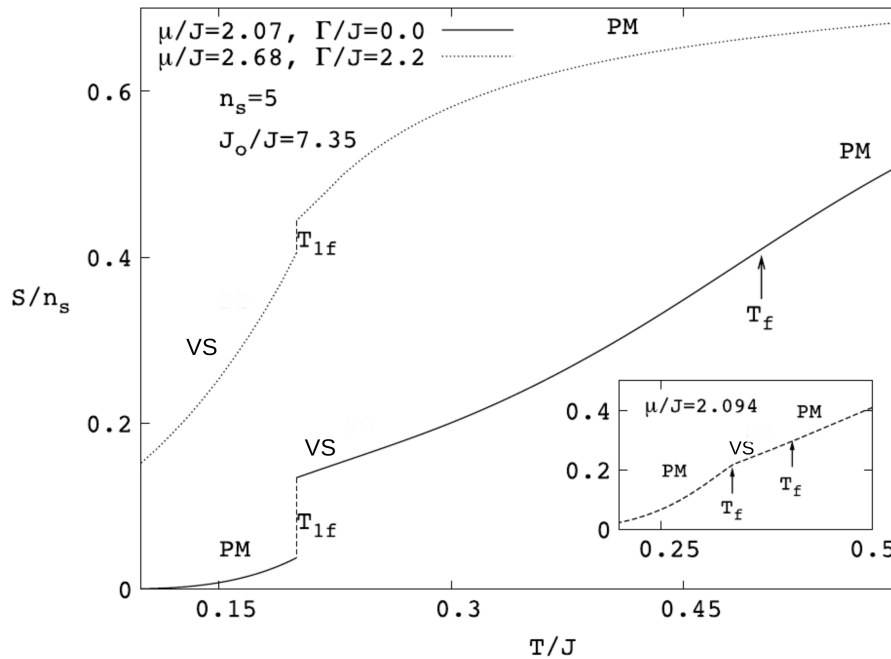


Figura 4.9: Entropia em função da temperatura para  $n_s = 5$ ,  $J_0/J = 7.35$ , diferentes valores de  $\mu$  com  $\Gamma/J = 0.0$  e  $2.2$ . O fundo mostra a entropia para uma transição reentrante de segunda ordem (ZIMMER; SILVA; MORAIS; MAGALHAES, 2011).

O calor específico  $C_v$  em função de  $T$  é analisado na figura 4.10 para diferentes tamanhos de cluster  $n_s$  e intensidades de interação intracluster  $J_0$ . Na figura 4.10(a) ( $\mu = 0$  e  $\Gamma = 0$ ),  $C_v$  exibe um máximo arredondado a uma temperatura  $T^*$  acima de  $T_f$  e uma pequena descontinuidade em  $T_f$ . Quando  $J_0$  aumenta de  $J_0/J = 7.35$  a  $J_0/J = 9.00$ ,  $T^*$  desloca-se para temperaturas mais altas. Além disso, o tamanho do cluster  $n_s$  também afeta as interações intracluster. Portanto, o mesmo resultado para a relação entre  $T^*$  e  $T_f$  pode ser obtido com diferentes valores de  $n_s$ . Por exemplo, as linhas cheia e pontilhada no fundo da figura 4.10(a) mostram o  $C_v$  para  $n_s = 5$  e  $n_s = 9$ , respectivamente. Particularmente,  $J_0/J$  é diminuído para manter a razão  $T^*/T_f = 1.21$  quando  $n_s$  aumenta. Isto significa que  $T^*$  tem uma forte dependência com as interações de curto-alcance, enquanto que  $T_f$  está relacionada ao congelamento dos momentos magnéticos do cluster. Estes resultados para  $\mu = 0$  estão de acordo com aqueles apresentados na seção 4.1 (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010). Entretanto, para  $\mu > 0$ , a relação entre  $T^*$  e  $T_f$  é afetada, como mostrado na figura 4.10(b). A temperatura  $T^*$  é gradualmente suprimida por  $\mu$  enquanto  $T_f$  diminui (ver resultados para  $\mu/J = 0, 1.00, 1.50$  e  $2.08$  na figura 4.10(b)). Este comportamento é uma consequência das flutuações de carga, que alteram o número de ocupação médio por cluster  $\nu$ . Em outras palavras, o momento magnético médio dos sítios é diminuído

pela diluição do cluster magnético com sítios não-magnéticos (sítios vazio ou duplamente ocupado) quando  $\mu$  aumenta, o que reflete nas interações magnéticas. Em adição, a intensidade das flutuações estatísticas de carga é controlada por  $\mu$  e por  $T$ . Esta dependência de  $\nu$  com a temperatura também se reflete no comportamento de  $C_v$ . Particularmente, a curva do  $C_v$  para  $\mu/J = 2.08$  apresenta uma descontinuidade a baixas temperaturas, onde a transição de primeira ordem VS/PM ocorre. Para valores maiores de  $\mu/J$ , há somente a fase PM e  $C_v$  exibe um máximo devido às fortes flutuações de carga (ver  $C_v$  para  $\mu = 2.2$  na figura 4.10(b)). Portanto, a dependência de  $\nu$  com  $\mu$ ,  $T$  e  $J_0$  tem um importante papel nas propriedades magnéticas.

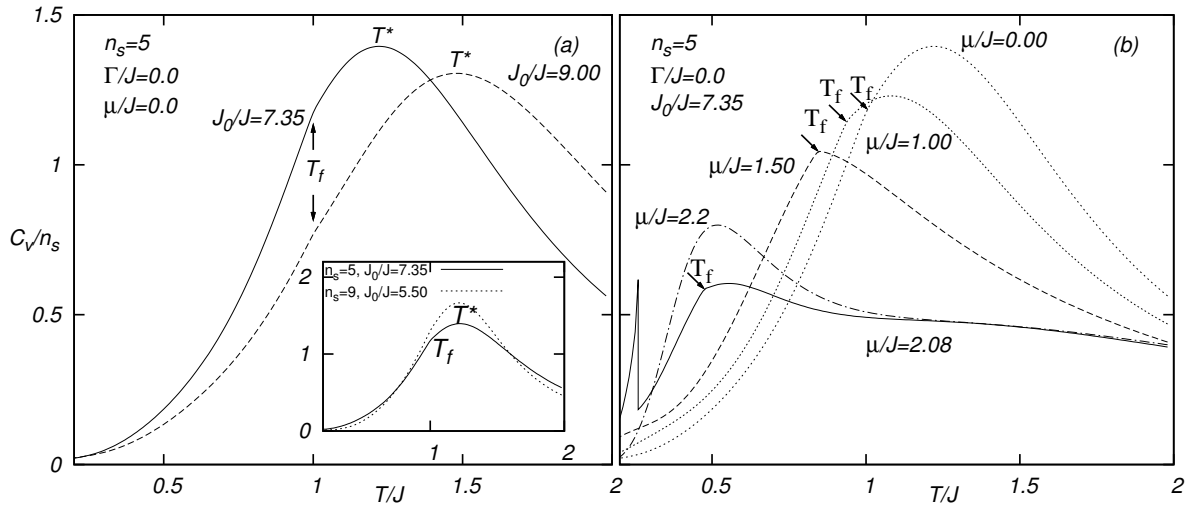


Figura 4.10: Calor específico versus  $T/J$  para: (a)  $\Gamma/J = 0$ ,  $\mu/J = 0$  e  $n_s = 5$  com  $J_0/J = 7.35$  e  $9.00$ ; (b)  $\Gamma/J = 0$ ,  $n_s = 5$  com  $J_0/J = 7.35$  e vários valores de  $\mu$ . No fundo da figura (a) são comparados os resultados para  $n_s = 5$  e  $n_s = 9$  (ZIMMER; SILVA; MORAIS; MAGALHAES, 2011).

A figura 4.11(a) mostra  $\nu$  em função de  $T$  para  $J_0/J = 7.35$  e valores distintos de  $\mu$ . Para  $\mu = 1.00$  e  $1.50$ ,  $\nu$  pode diminuir quando a temperatura diminui até a transição PM/VS para um valor de  $J_0$  grande. Por outro lado, quando  $J_0$  é baixo,  $\nu$  pode aumentar quando a temperatura diminui até  $T_f$  (ver detalhe da figura 4.11(a) para  $J_0/J = 3$  e  $\mu = 1.00$ ). Este comportamento de  $\nu$  indica que o aumento de  $J_0$  pode favorecer as interações magnéticas e a fase VS pode aparecer para temperaturas mais altas quando  $J_0$  aumenta. Para  $\mu$  próximo ao ponto tricrítico ( $\mu/J = 2.08$ ), a dependência de  $\nu$  com  $T$  é suavizada pelo aumento de  $J_0$ . Neste caso, a transição reentrante de segunda ordem pode ocorrer com a temperatura tricrítica deslocada a baixas temperaturas. Para valores de  $\mu$  maiores ( $\mu/J = 2.2$ ),  $\nu$  somente aumenta quando a temperatura é diminuída, o que indica que a fase PM ocorre com diluição maior a baixas temperaturas. A influência de  $J_0$  sobre  $\nu$  também pode ser analisada na figura 4.11(b), onde  $\nu$  versus  $\mu$  é exibido para vários  $J_0$  para a mesma isoterma. Neste caso, o aumento de  $J_0$  requer valores maiores de  $\mu$  para aumentar a ocupação  $\nu$ . Isto significa que surge uma relação complicada entre flutuações de carga e interações de curto-alcance, na qual  $J_0$  fortalece as interações magnéticas enquanto  $\mu$  pode causar diluição magnética (favorecimento dos estados não-magnéticos).

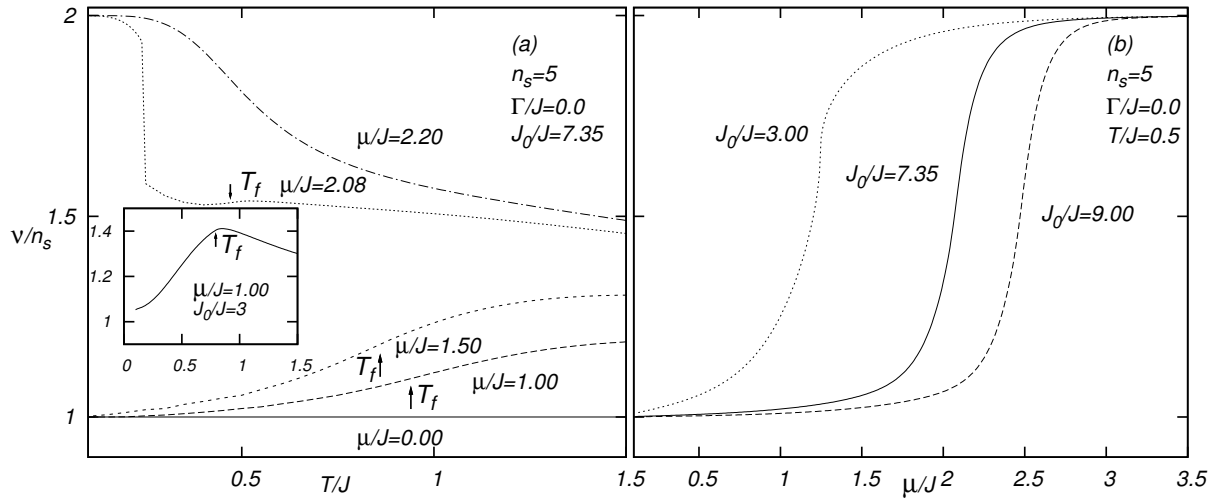


Figura 4.11: Ocupação média por cluster  $\nu$  para  $n_s = 5$  e  $\Gamma/J = 0$ . Figura (a) mostra  $\nu$  versus  $T/J$  para  $J_0/J = 7.35$  e vários valores de  $\mu$ . A figura (b) mostra  $\nu$  versus  $\mu/J$  para  $T/J = 0.5$  e três valores de  $J_0/J$  (ZIMMER; SILVA; MORAIS; MAGALHAES, 2011).

A curva do  $C_v$  também apresenta mudanças quando  $\Gamma > 0$ , como pode ser visto na figura 4.12. Devido à competição entre flutuações de carga, interações de curto-alcance e efeitos térmicos, seu comportamento é complicado. Para  $\mu = 0$ , a distância entre  $T^*$  e  $T_f$  é aumentada por  $\Gamma$ , como discutido na seção 4.1 (ZIMMER; SILVA; MORAIS; MAGALHAES, 2011). Quando  $\mu > 0$ , as flutuações estatísticas de carga também afetam a curva do  $C_v$ , suprimindo  $T^*$  ao mesmo tempo que  $\Gamma$  pode aumentar o valor de  $T^*$ . Portanto, há uma competição entre flutuações de carga introduzidas por  $\mu$  e flutuações quânticas introduzidas por  $\Gamma$ .

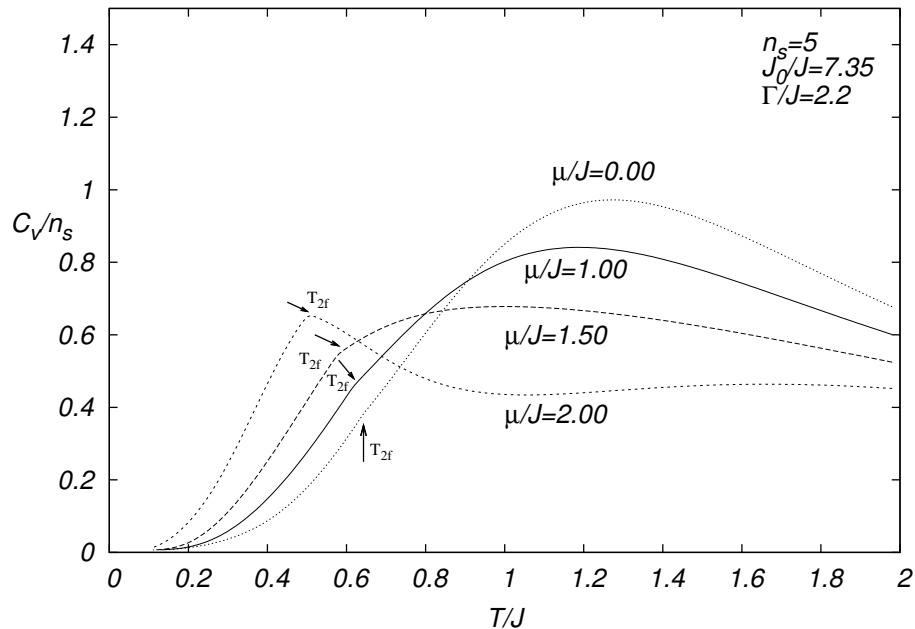


Figura 4.12:  $C_v$  em função da temperatura para  $\Gamma/J = 2.2$ ,  $n_s = 5$  com  $J_0/J = 7.35$  e vários valores de  $\mu$ .

Como conclusões desta seção, os diagramas de fase de  $T/J \times \mu/J$  mostram uma transição de segunda ordem PM/VS para  $\mu$  pequeno. Com o aumento de  $\mu$ , devido às flutuações de

carga,  $T_f$  diminui e um ponto tricrítico aparece. A partir deste ponto, uma transição de primeira ordem surge, e para uma certa região de  $\mu$ , um congelamento inverso ocorre. Estes resultados estão de acordo com os trabalhos de VS de Ising fermiônico com spins canônicos (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2008, 2010; MORAIS; ZIMMER; MAGALHAES, 2011). Entretanto, as interações de curto-alcance alteram a linha de transição como um todo, onde a região VS aumenta com o aumento de  $J_0$  e uma transição reentrante pode ocorrer em uma transição de segunda ordem. Estes resultados sugerem que  $J_0$  diminui as flutuações de carga, diminuindo a temperatura tricrítica, tal que uma transição inversa de segunda ordem aparece. Por outro lado, a presença de  $\Gamma$  pode destruir o congelamento inverso, pois, as flutuações quânticas produzidas por  $\Gamma$  diminui  $T_f$  e afeta a distribuição de carga, tal que os estados não-magnéticos são energeticamente desfavoráveis. Portanto, a diluição magnética do cluster diminui e o congelamento inverso desaparece. Esses resultados estão publicados em Journal of Statistical Mechanics, v. 2011, p. P05026 (ZIMMER; SILVA; MORAIS; MAGALHAES, 2011).

### 4.3 CONGELAMENTO INVERSO EM UM MODELO DE VIDRO DE SPIN DE ISING COM CLUSTERS PARA INTERAÇÕES INTRACLUSTER ANTIFERROMAGNÉTICAS

Com o intuito de investigar quais os mecanismos são necessários para o surgimento de transições inversas, em particular, o congelamento inverso, nesta seção é analisado o modelo desordenado de vidro de spin com clusters utilizando spins de Ising (SILVA; ZIMMER; MAGALHAES; LACROIX, 2012). As interações intracluster  $J_1$  são antiferromagnéticas (AF) e somente entre primeiros vizinhos. Além disso, são considerados clusters com  $n_s$  spins de Ising sobre uma rede quadrada. O modelo utilizado está descrito na equação 3.3.

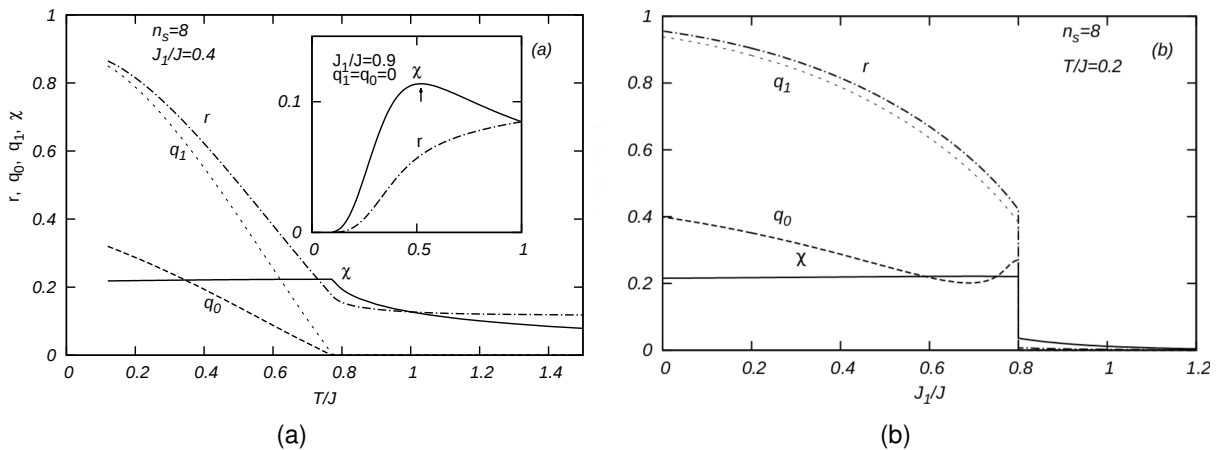


Figura 4.13: (a) Parâmetros de ordem e susceptibilidade em função da temperatura para  $J_1/J$  pequeno. Em detalhe, resultados para região  $J_1/J$  alto. (b) Parâmetros de ordem e susceptibilidade em função da interação de curto-alcance antiferromagnética para  $T/J$  pequeno. Ambos resultados para  $n_s = 8$  (SILVA; ZIMMER; MAGALHAES; LACROIX, 2012).

A figura 4.13, exibe os parâmetros de ordem normalizados ( $q_0 = Q_0/n_s^2$ ,  $q_1 = Q_1/n_s^2$ ,  $r = R/n_s^2$ ) e a susceptibilidade magnética  $\chi$  em função de  $T$  na figura 4.13(a) e em função das interações intracluster AF  $J_1$  na figura 4.13(b) para um cluster de tamanho  $n_s = 8$ . Na figura 4.13(a), a fase VS é encontrada abaixo de  $T_f$  para valores baixos de  $J_1/J$ , mas para valores altos de  $J_1/J$  somente a fase PM ocorre, como mostrado no detalhe da figura 4.13(a). Os efeitos do aumento de  $J_1$  pode ser melhor analisado na figura 4.13(b), onde os parâmetros apresentam uma descontinuidade na transição de fase de primeira ordem VS/PM a temperaturas mais baixas.

O parâmetro  $r$  também é muito importante neste estudo. Ele pode ser interpretado como o momento magnético total do cluster, como já discutido anteriormente. Através da figura 4.13, pode-se ver que  $r$  varia com a temperatura  $T/J$  e também com a interação AF  $J_1/J$ . O momento magnético total do cluster  $r$  diminui quando  $J_1/J$  aumenta e é muito pequeno dentro da fase paramagnética. Este comportamento será melhor discutido na figura 4.16. A susceptibilidade magnética, também apresentada na figura 4.13, exibe um pico na temperatura de transição  $T_f$  e é fracamente dependente de  $J_1/J$  e  $T/J$  em toda fase VS.

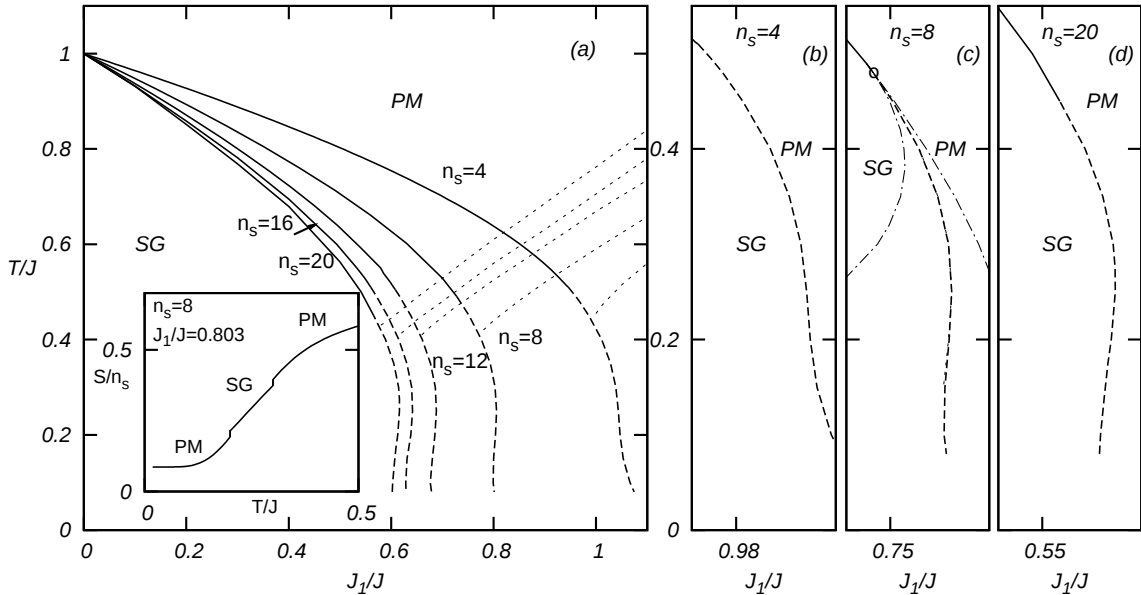


Figura 4.14: Diagramas de fase  $T/J$  versus  $J_1/J$  para vários tamanhos de clusters  $n_s$  com valores pares de  $n_s$ . Linhas sólidas representam transições de segunda-ordem e linhas tracejadas transições de primeira-ordem. (a) As formas dos clusters estão representadas no topo da figura para  $n_s = 4, 8, 12, 16$  e  $20$  da esquerda para a direita. Linhas pontilhadas correspondem a temperatura onde  $\chi$  apresenta o valor máximo. (b-d) Transições de primeira-ordem em detalhes, onde linhas ponto-tracejadas são as espinodais PM e VS. Detalhe na figura (a) Entropia em função da temperatura para  $J_1/J = 0.803$

A figura 4.14 mostra diagramas de fase para um conjunto de tamanhos de cluster  $n_s$ , com  $n_s$  sendo par. Esses diagramas de fase apresentam uma transição contínua da fase PM a altas temperaturas para a fase VS em  $T_f$  para intensidades baixas do acoplamento de curto-alcance AF. Quando  $J_1/J$  aumenta  $T_f$  gradualmente diminui até um ponto tricrítico, onde a transição torna-se de primeira-ordem. Próximo ao ponto tricrítico, o comportamento da transição de fase muda com o aumento do valor de  $n_s$ : uma transição reentrante VS/PM pode aparecer para valores de  $n_s$  bastante altos. Isso pode ser visto nos resultados para  $n_s \geq 8$ . A reentrância VS/PM é observada quando a temperatura diminui para uma certa região de  $J_1/J$ . Esta reentrância está relacionada ao congelamento inverso, como mostrado através dos resultados para a entropia no detalhe da figura 4.14(a), onde a entropia da fase PM a temperaturas baixas é menor que a entropia da fase VS. Observa-se também que a reentrância torna-se mais pronunciada quando  $n_s$  aumenta. Além disso, a diferença entre as linhas de transição de dois  $n_s$  sucessivos torna-se menor para  $n_s$  maior. Portanto, pode-se esperar consistência desses resultados quando o tamanho do cluster aumenta. Os mesmos resultados qualitativos foram também obtidos para outras estruturas de clusters (SOUKOULIS; LEVIN, 1978; SOUKOULIS, 1978). Portanto, a presença de interações antiferromagnéticas de curto-alcance em um modelo de VS com clusters pode diminuir a temperatura de transição, introduzindo uma transição VS/PM de primeira-ordem reentrante.

O comportamento das linhas de transição também é analisado para tamanhos de clusters

ímpares em valores de interação antiferromagnética pequeno e intermediário, mostrado na figura 4.15. Entretanto, há uma diferença importante entre os diagramas de fase com  $n_s$  par e ímpar com interações intracluster antiferromagnéticas fortes. Para  $n_s$  ímpar, o estado fundamental é VS em regiões de  $J_1/J$  grande. Porém, a temperatura de transição em  $J_1/J$  mais altos tende a temperaturas mais baixas quando  $n_s$  aumenta. Isto sugere que as linhas de transição para  $n_s$  par e ímpar convergem para a mesma localização em diagramas de fase para clusters de tamanhos suficientemente grande.

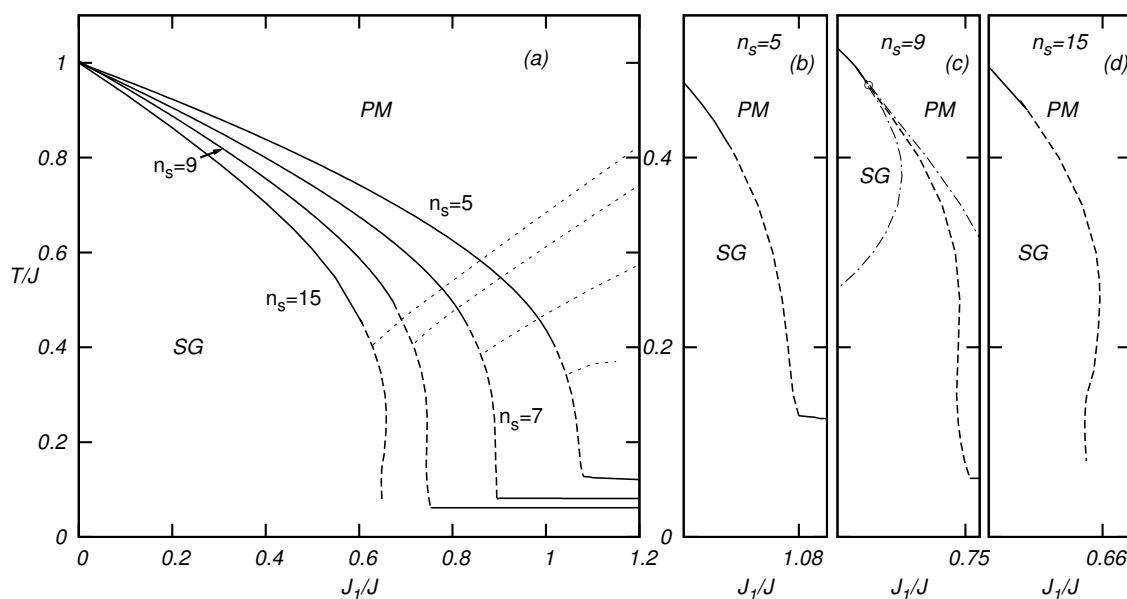


Figura 4.15: Diagramas de fase  $T/J$  versus  $J_1/J$  para  $n_s$  ímpares. A mesma convenção de linhas da figura 4.14 é usada. (a) As formas dos clusters estão representadas no topo da figura para  $n_s = 5, 7, 9$  e 15 aumentando da esquerda para a direita.

A figura 4.16 exibe o momento magnético do cluster  $r$  e a susceptibilidade magnética  $\chi$ , que permite discutir a fase PM a baixas temperaturas para valores altos de  $J_1/J$ . A intensidade de  $r$  diminui quando  $J_1/J$  aumenta, como mostrado na figura 4.16(a). Ao mesmo tempo, o acoplamento intercluster de longo-alcance é enfraquecido quando  $r$  diminui, o que pode evitar a ocorrência da fase VS para valores altos de  $J_1/J$ . Além disso, o aumento de  $J_1/J$  é capaz de introduzir uma fase PM a baixas temperaturas com um momento magnético muito baixo, no qual um número alto de clusters não-magnéticos com momento magnético  $S^z = 0$  é encontrado. Isto significa que os spins intracluster podem se congelar em estados AF com momento zero. Como consequência, sem interações entre os momentos de clusters (sem interação intercluster) nenhum estado ordenado surgirá. Logo, esta é a fonte da entropia diminuir na fase PM de baixa  $T$  comparada a fase PM a temperaturas altas. De fato o modelo não é de spin-1, mas para  $J_1$  forte, devido à existência de clusters não-magnéticos o modelo é similar ao modelo de spin-1, a nível de cluster. O aumento no tamanho do cluster também favorece o acoplamento de curto-alcance AF, reduzindo o parâmetro  $r$  como mostrado na figura 4.16(b). Este comportamento pode também afetar  $T_f$ . Portanto, para  $n_s$  ímpar, o momento total nunca é compensado dentro dos clusters, mesmo para valores muito altos de  $J_1/J$ . Neste caso, a fase VS pode ocorrer a temperaturas muito baixas mesmo para altos valores de  $J_1/J$ .

A susceptibilidade magnética também reflete os diferentes comportamentos da fase PM a baixas e altas temperaturas.  $\chi$  apresenta um máximo que é deslocado a temperaturas mais altas quando  $J_1/J$  aumenta (ver figura 4.16(c)). O mesmo efeito é observado com o aumento do

tamanho dos clusters, como mostrado na figura 4.16(d). Portanto, para valores ímpares de  $n_s$ , o estado fundamental pode ser VS, o que explica o aumento de  $\chi$  a temperaturas muito baixas. A localização do máximo em  $\chi$  também é deslocado nos diagramas de fase na figura 4.14(a) e 4.15(a), representado pelas linhas pontilhadas. Neste caso particular, pode-se ver que os efeitos das interações AF de curto-alcance sobre a fase PM são aumentados com o aumento de  $J_1/J$  ou  $n_s$ . Em outras palavras, o caráter AF dentro dos clusters pode ser favorecido por  $J_1/J$  e principalmente por  $n_s$ . Particularmente, para  $n_s$  no limite termodinâmico, pode-se esperar que o sistema apresente ordem AF pura sem desordem.

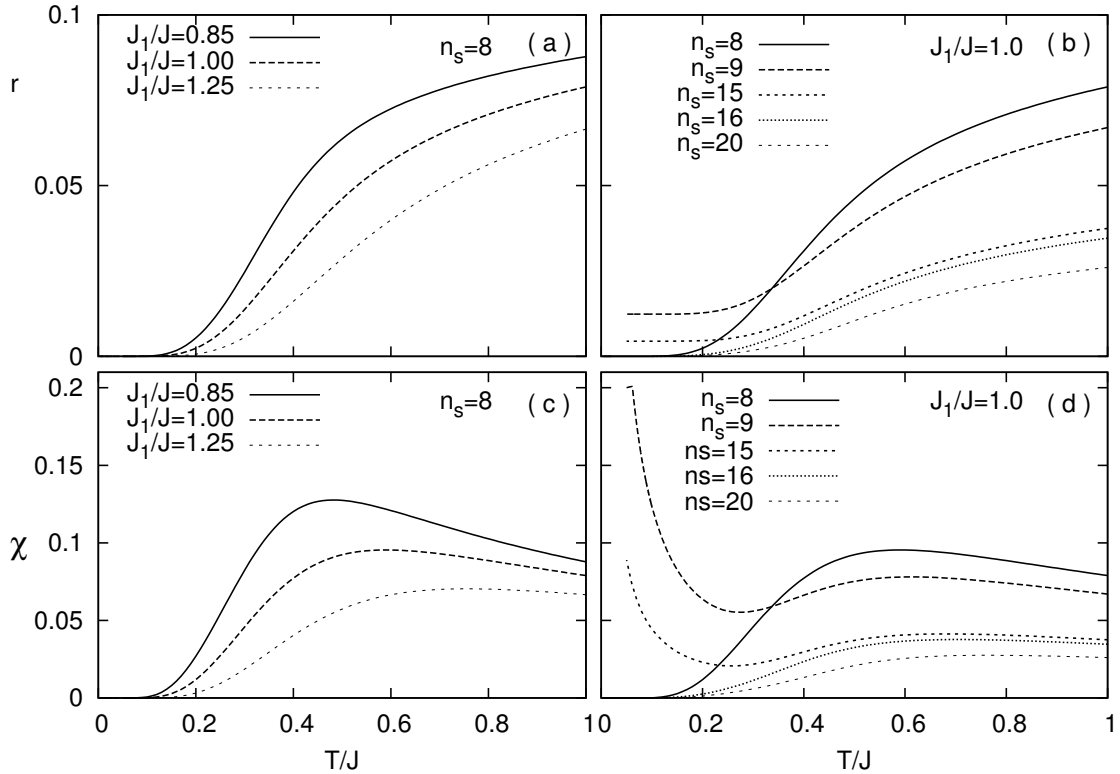


Figura 4.16: Susceptibilidade magnética  $\chi$  e parâmetro  $r$  em função de  $T/J$  para valores altos de  $J_1/J$ .

Sendo assim, pode-se concluir que frustração introduzida por desordem e uma fase PM com clusters de momentos magnéticos baixos são os elementos chaves para produzir congelamento inverso espontâneo no presente modelo de VS de Ising com clusters. Esses elementos podem ser produzidos por clusters fortemente desordenados de spins de Ising com interações de curto-alcance antiferromagnéticas. Resultados publicados em *Physical Review E*, v. 86, p. 051104 (SILVA; ZIMMER; MAGALHAES; LACROIX, 2012).

#### 4.4 VIDRO DE SPIN COM CLUSTERS GEOMETRICAMENTE FRUSTRADOS

Com o objetivo de investigar se outros tipos de frustrações, além da frustração gerada por desordem, podem dar origem ao congelamento inverso, nesta seção é analisado o modelo de VS de Ising com clusters, discutido na seção 3.1. Entretanto, são consideradas interações intracluster entre primeiros e segundos vizinhos, onde a interação intracluster segue o modelo  $J_1 - J_2$ , tal



que:

$$\sum_{ij}^{n_s} J_{ij}^0 S_{i\nu} S_{j\nu} = \sum_{(i,j)_1}^{n_s} J_1 S_{i\nu} S_{j\nu} + \sum_{(i,j)_2}^{n_s} J_2 S_{i\nu} S_{j\nu}, \quad (4.1)$$

onde a soma  $(i, j)_1$  [ $(i, j)_2$ ] corre sobre todos os primeiros [segundos] vizinhos do cluster  $\nu$  com uma rede de geometria quadrada.  $J_1$  e  $J_2$  são as intensidades de interações intracluster entre primeiros e segundos vizinhos, respectivamente. Devido ao modelo  $J_1 - J_2$ , é possível introduzir frustração ajustando a relação entre as interações  $J_1$  e  $J_2$ . Esta frustração é chamada de frustração geométrica (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES; LACROIX, 2014). Primeiramente, esta análise é realizada na seção 4.4.1 considerando ambas interações intracluster  $J_1$  e  $J_2$  antiferromagnéticas (AF). Posteriormente, considera-se as interações entre primeiros vizinhos ferromagnéticas (FE) e entre segundos vizinhos AF (seção 4.4.2).

#### 4.4.1 Interações Intracluster Antiferromagnéticas

Nos resultados apresentados nesta seção, as interações entre primeiros e segundos vizinhos são ambas antiferromagnéticas.

A figura 4.17 apresenta diagramas de fase da temperatura  $T/J_1$  em função das interações desordenadas  $J/J_1$  para diferentes tamanhos de clusters  $n_s$  e intensidades de interações intracluster  $J_2/J_1$ . Nesta análise, a normalização é feita em função da interação intracluster  $J_1$ , ou seja, todas as quantidades são escritas em termos de  $J_1$ . As formas dos clusters estão exibidas nas figuras, onde cada ponto representa os spins na rede, as linhas pretas representam interações entre primeiros vizinhos ( $J_1$ ) e as linhas vermelhas interações entre segundos vizinhos ( $J_2$ ). Nesta figura, observa-se uma transição de segunda ordem (linhas sólidas) a partir da fase PM a fase VS quando a temperatura diminui para valores altos de  $J$ . Quando  $J$  diminui, a transição torna-se de primeira ordem (linhas pontilhadas) e uma reentrância pode aparecer, exceto para  $J_2/J_1 = 0.5$ . Esta reentrância está relacionada ao congelamento inverso, como discutido anteriormente na seção 4.3 (SILVA; ZIMMER; MAGALHAES; LACROIX, 2012), onde  $J_2 = 0$ . Quando  $J_2/J_1$  são pequenos, os resultados são qualitativamente os mesmos apresentados na seção 4.3. O congelamento inverso resulta da relação entre desordem intercluster e interações AF de curto-alcance. A desordem intercluster favorece a fase VS que pode apresentar conteúdo entrópico maior do que a fase PM a baixas temperaturas. Esta fase PM aparece como um resultado das interações AF, na qual os spins intracluster tornam-se antiferromagneticamente compensados, gerando clusters com momentos magnéticos baixos sem ordem de longo alcance. Em outras palavras, na fase PM a baixas temperaturas, muitos clusters não magnéticos com momento total  $S = 0$  são encontrados. Esta é a fonte da entropia na fase PM de baixa temperatura ser pequena (SILVA; ZIMMER; MAGALHAES; LACROIX, 2012).

Entretanto, a presença de frustração geométrica intracluster aparenta não ter importância sobre o congelamento inverso. Por exemplo, a frustração geométrica máxima ocorre para  $J_2/J_1 = 0.5$  (LACROIX, 2010). Para este caso específico, nenhuma reentrância relacionada ao congelamento inverso surge. Diferentemente, a frustração geométrica intracluster favorece a fase VS para qualquer valor infinitesimal de desordem, como pode ser visto na figura 4.17 para  $J_2/J_1 = 0.5$ .

Pode-se observar que  $T_f$  apresenta dois comportamentos diferentes em torno de  $J_2/J_1 = 0.5$ : um para intensidades mais baixas de desordem, onde os efeitos de frustração geométrica são relevantes, e outro para valores altos de  $J/J_1$ , no qual não há distinção qualitativa entre os regimes de interação intracluster (ver  $T_f$  para  $J/J_1 > 4$  com diferentes valores de  $J_2/J_1$  na figura 4.17). Neste regime,  $T_f$  aumenta linearmente com  $J$ . Além disso, a frustração geométrica afeta o congelamento inverso mudando o comportamento de  $T_f$ . A reentrância desaparece na presença de frustração geométrica intracluster, que quebra uma das condições essenciais para a ocorrên-

cia de congelamento inverso: a baixa entropia da fase PM. O detalhe da figura 4.17(d) ajuda a entender os efeitos da frustração geométrica sobre a fase PM. Esta figura mostra a correlação  $R$  em função de  $J_2$  para baixas temperaturas na região PM próxima à transição PM/VS. A frustração intracluster provoca um aumento na curva de  $R$ . O parâmetro  $R$  pode contribuir para a desordem intercluster de longo-alcance e ao mesmo tempo evita a ocorrência da fase PM com momento magnético de cluster pequeno. Em outras palavras, o momento magnético do cluster é maximizado na presença de frustração geométrica e portanto a sensibilidade às interações desordenadas intercluster é aumentada.

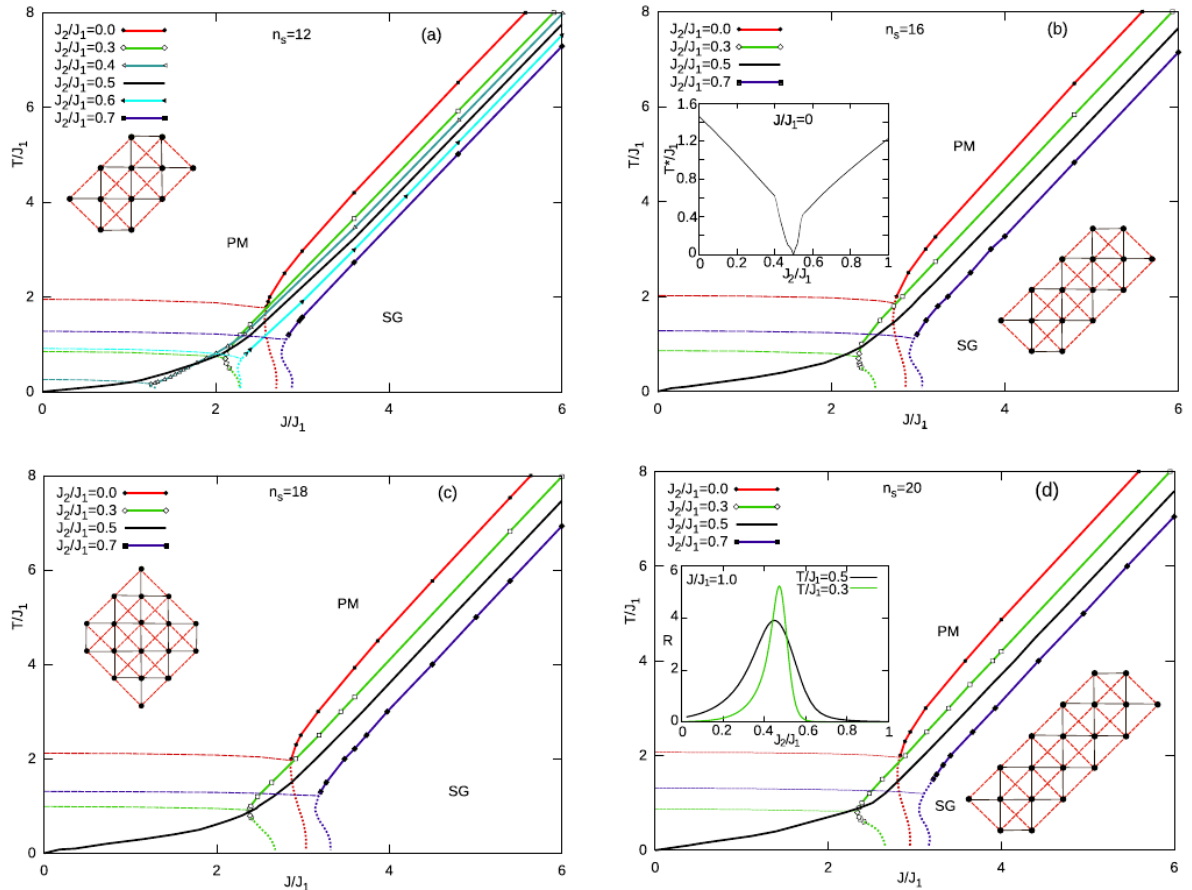


Figura 4.17: Diagramas de fase  $T/J_1$  versus  $J/J_1$  para vários valores de  $J_2/J_1$  com diferentes tamanhos de clusters e acoplamentos AF intracluster. As formas dos clusters são mostradas em cada painel, onde as linhas pretas representam interações entre primeiros vizinhos e as linhas pontilhadas vermelhas, as interações entre segundos vizinhos. As linhas sólidas representam transições VS/PM de segunda ordem e as linhas pontilhadas, transições de primeira ordem. As linhas tracejadas representam o máximo da susceptibilidade. O detalhe em (b) mostra o comportamento de  $T^*/J_1$  versus  $J_2/J_1$  para  $J = 0$ . O detalhe em (d) mostra o parâmetro  $R$  em função de  $J_2/J_1$  dentro da fase PM a baixas temperaturas.

A figura 4.18 exibe os parâmetros de ordem com um passo de quebra de simetria de réplicas para diferentes razões de  $J_2/J_1$ . Esta figura fortalece a discussão anterior relacionada à intensidade do momento magnético do cluster  $R$ , que depende da temperatura, de  $J$  e  $J_2$ . Para  $J_2 = 0$ ,  $R$  vai a zero quando a temperatura diminui para valores pequenos de  $J$ . Isto indica que os spins do cluster tornam-se compensados AF, afetando o acoplamento intercluster, que permanece na fase PM até a temperatura zero. Diferentemente, a frustração geométrica intracluster pode introduzir um cenário no qual configurações de spins degenerados com spins descompensados são termodinamicamente favorecidas. Isto reflete no aumento do momento magnético dos clusters quando comparado a outros regimes de  $J_2/J_1$ . Este aumento de  $R$  favorece o acoplamento intercluster que pode gerar a fase VS a regime mais baixos de desordem (ver  $Q_1 - Q_0 > 0$  para

$J_2/J_1 = 0.5$  na figura 4.18).

A susceptibilidade magnética  $\chi$  pode também ser explorada para esclarecer o regime de baixa desordem (ver detalhe da figura 4.18). Nesta figura,  $\chi$  mostra um comportamento do tipo Currie-Weiss na fase PM de altas temperaturas. Entretanto, como discutido anteriormente, pode-se encontrar uma fase PM a baixas temperaturas, no qual  $\chi$  diminui quando  $T$  diminui a partir de um certo valor de  $T_\chi^*$  (temperatura do máximo suave em  $\chi$ ). Neste caso, clusters com momentos magnéticos baixos caracterizam a fase PM que surge como consequência das interações AF de curto-alcance sem ordem de longo-alcance. A localização de  $T_\chi^*$  nos diagramas de fase da figura 4.17 é dada pelas linhas pontilhadas, que mostram a dependência de  $T_\chi^*$  com as interações de curto-alcance. Em particular, a frustração intracluster pode eliminar a fase PM de baixa temperatura e o sistema apresenta fase VS com um susceptibilidade fracamente depende da temperatura.

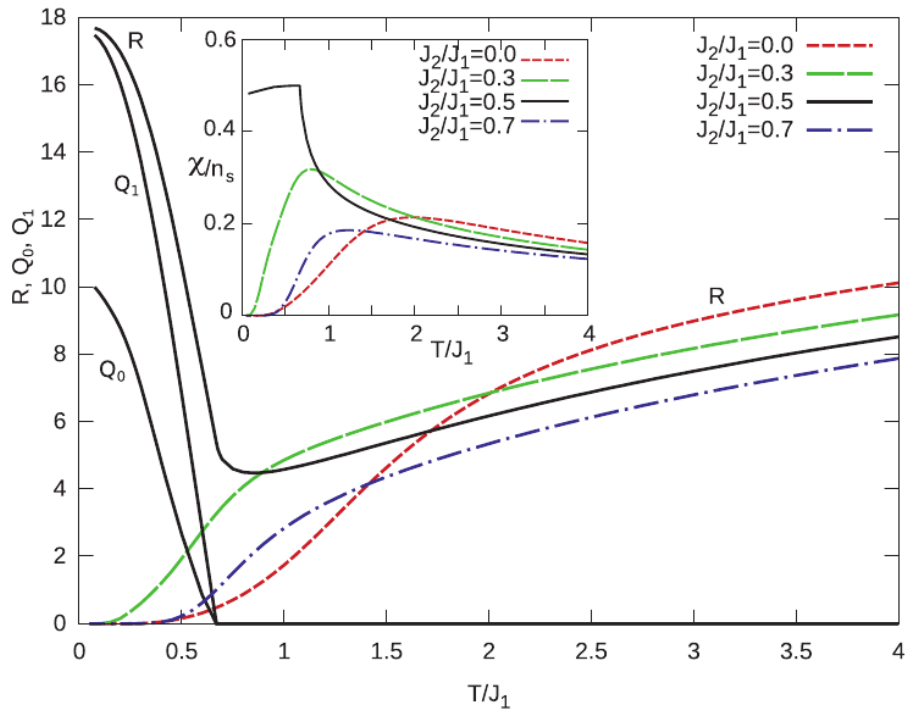


Figura 4.18: Parâmetros de ordem no regime de baixa desordem ( $J/J_1 = 2.0$ ) para vários valores de  $J_2/J_1$  e  $n_s = 16$  com a mesma forma da figura 4.17(b). O detalhe exibe a susceptibilidade em função de  $T$ .

#### 4.4.2 Interações Intracluster Ferromagnéticas e Antiferromagnéticas

Nesta seção, são consideradas interações intracluster ferromagnéticas e antiferromagnéticas entre primeiros e segundos vizinhos, respectivamente. O sinal das interações AF é assumido explicitamente. Para clusters ferromagnéticos ( $0 > J_2/J_1 > -0.5$ ), os diagramas de fase exibem ordem VS mesmo para valores baixos de desordem  $J/J_1$ , como pode ser visto na figura 4.19(a). Quando  $-J_2/J_1$  aumenta ( $J_2/J_1 < -0.5$ ), as interações intracluster de curto-alcance AF tornam-se mais fortes e a fase VS só é observada para intensidades de desordem mais altas. Além disso, uma transição reentrante de primeira ordem PM/VS aparece. Esta reentrância está relacionada ao congelamento inverso, como discutido na seção 4.2. Em particular, quando  $J_2/J_1$  é muito próximo de  $-0.5$  (ver figura 4.19(a)), a frustração geométrica intracluster é forte e a fase VS é encontrada para  $J \rightarrow 0$ .

O comportamento de  $R$  da figura 4.19(b) mostra dois regimes intracluster diferentes: um para  $-J_2/J_1$  baixo (onde  $R$  é máximo) e outro para valores altos de  $-J_2/J_1$  (onde  $R$  é mínimo). O comportamento do parâmetro  $R$  pode ajudar a explicar a presença da fase VS para valores de  $J$  mais baixos quando as interações intracluster FE são dominantes. Neste caso, as interações desordenadas intercluster são aumentadas devido aos grandes momentos magnéticos dos clusters ( $R$ ). Em contraste, a compensação AF intracluster torna os clusters menos predispostos às interações desordenadas intercluster. Portanto, a fase VS não pode ser encontrada a intensidades mais baixas de  $J$  quando  $-J_2$  é grande. Além disso, esta compensação AF pode introduzir a fase PM de baixa temperatura, que é essencial para a ocorrência de congelamento inverso.

Portanto, através dos resultados apresentados nesta seção, constata-se que a frustração geométrica não é capaz de dar origem ao fenômeno congelamento inverso. Em vez disso, observa-se que na região de máxima frustração geométrica ( $J_2/J_1 = 0.5$ ) a transição reentrante é completamente destruída e a fase VS é obtida para intensidades muito baixas de desordem (ver por exemplo figura 4.17). Uma justificativa para a frustração geométrica não ser capaz de produzir congelamento inverso deve-se ao fato de que ela aumenta não somente a entropia da fase VS, mas aumenta também a entropia da fase paramagnética.

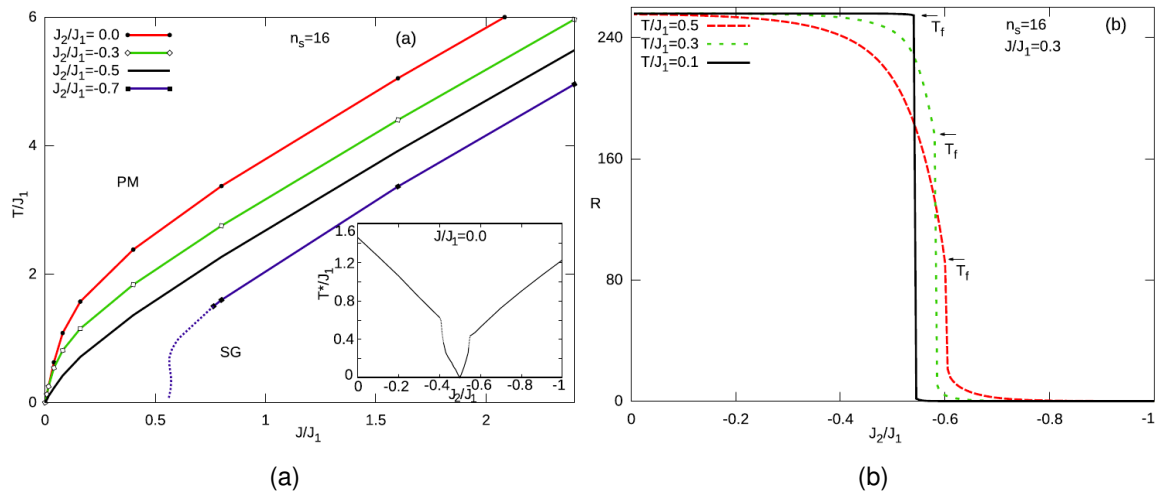


Figura 4.19: Resultados para interações intracluster FE e AF com  $n_s = 16$  e a mesma forma da figura 4.17(b). (a) Diagramas de fase  $T/J_1$  versus  $J/J_1$  para vários valores de  $J_2/J_1$ . (b) Parâmetro de ordem  $R$  em função de  $J_2/J_1$  para temperaturas mais baixas. O detalhe exibe o comportamento de  $T^*/J_1$  versus  $J_2/J_1$  para  $J = 0$ .

## 5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Na presente tese, é estudado um modelo de vidro de spin (VS) onde clusters correlacionados são as entidades básicas. O modelo considera dois tipos de interações: interações desordenadas de longo-alcance entre clusters distintos (interações intercluster) e interações de curto-alcance entre sítios pertencentes ao mesmo cluster (interações intracluster), que podem ser ferromagnéticas (FE) e/ou antiferromagnéticas (AF). O modelo de VS com clusters é analisado em duas abordagens distintas: uma abordagem clássica utilizando spins de Ising e em uma abordagem quântica utilizando operadores fermiônicos de criação e destruição na presença de um campo magnético transversal  $\Gamma$ . A análise é realizada dentro de uma teoria de campo médio seguindo o esquema de um passo de quebra de simetria de réplicas (PARISI, 1980) e aproximação estática (BRAY; MOORE, 1980), resultando em um modelo efetivo de um único cluster, que é calculado numericamente via métodos de diagonalização exata.

Primeiramente, é realizado um estudo sobre as propriedades magnéticas do modelo quântico de VS com clusters, admitindo-se spins de Ising na presença de um campo transversal  $\Gamma$ . Para este estudo, assume-se que os spins nos clusters estão dispostos em uma rede quadrada com interações ferromagnéticas entre primeiros vizinhos. Neste trabalho, são analisados os comportamentos do calor específico  $C_v$  e da susceptibilidade magnética  $\chi$  em função da temperatura  $T$ , além de diagramas de fase  $T$  em função do campo  $\Gamma$  para diversos tamanhos de clusters  $n_s$  e interações intracluster FE  $J_0$  (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010). Os diagramas de fase  $T \times \Gamma$  mostram a competição entre as fases PM e VS. Com o aumento de  $\Gamma$ , a temperatura de transição  $T_f$  diminui até chegar a um ponto crítico quântico. Estes resultados indicam que, para valores de  $J_0$  maiores, a fase VS ocupa uma região maior no plano  $T \times \Gamma$ . O aumento de  $n_s$  também aumenta a região VS. Isto significa que a localização do ponto crítico quântico depende tanto de  $J_0$  quanto de  $n_s$ . Para o  $C_v$ , encontra-se um máximo arredondado a uma temperatura  $T^*$  acima de  $T_f$ , tal que  $T^*/T_f \approx 1.2$ , e para  $\chi$ , encontra-se um pico agudo em  $T_f$  (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010). Estes resultados estão de acordo com o comportamento esperado para um sistema real VS (BINDER; YOUNG, 1986). A partir dos resultados obtidos, pode-se dizer que um estudo teórico com clusters ao invés de spins individuais produz uma melhoria na descrição do  $C_v$  quando comparado a modelos com spins canônicos (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1978). Entretanto, quando  $\Gamma$  aumenta,  $T^*$  é deslocado para temperaturas maiores, enquanto  $T_f$  diminui. Assim, o aumento de  $\Gamma$  pode levar a uma razão  $T^*/T_f$  maior do que os 20% esperados para um VS (BINDER; YOUNG, 1986). Tal comportamento é encontrado por alguns autores para a liga  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$  a baixas concentrações (QUILLIAM; MUGFORD; GOMEZ; KYCIA; KYCIA, 2007; QUILLIAM; MENG; MUGFORD; KYCIA, 2008). Portanto, apesar dos resultados serem obtidos para um modelo particular, eles sugerem que a presença de um campo transversal pode levar a um cenário onde o calor específico apresenta o comportamento encontrado para o composto  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$  a baixas concentrações (ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010).

Portanto, um modelo de VS com clusters ao invés de spins canônicos tem se mostrado capaz de descrever melhor as quantidades termodinâmicas (SOUKOULIS, 1978; SOUKOULIS; LEVIN, 1978; ZIMMER; SILVA; MAGALHAES, 2010). Desse modo, uma formulação fermiônica, onde considera-se os quatro estados do espaço de Fock por sítio (modelo 4S), do modelo VS com clusters no ensemble grão-canônico é utilizado para investigar os elementos essenciais para a existência de congelamento inverso (ZIMMER; SILVA; MORAIS; MAGALHAES, 2011). Nesta análise, são admitidas interações intraclusters ferromagnéticas entre primeiros vizinhos  $J_0$  de uma rede quadrada. Os resultados mostram diagramas de fase de  $T$  em função do potencial químico  $\mu$  para diversos tamanhos de clusters  $n_s$ , interações  $J_0$  e campo  $\Gamma$ . Tais diagramas exibem uma transição de segunda ordem entre as fases PM e VS para valores pequenos de potencial químico  $\mu$ . Aumentando  $\mu$ , chega-se a um ponto tricrítico e a partir dele surge uma transição de primeira ordem reentrante, como encontrado para o modelo canônico de VS fermiônico (MAGALHAES;

MORAIS; ZIMMER, 2008). Esta reentrância marca a ocorrência de congelamento inverso, que é confirmado através dos resultados obtidos para a curva da entropia em função de  $T$ , que mostra que a entropia da fase PM a baixas temperaturas é menor que a entropia da fase VS. Entretanto, as interações de curto-alcance FE introduzem mudanças significativas nas linhas de transição: a região VS é aumentada com o aumento de  $J_0$  e a reentrância pode ocorrer acima do ponto tricrítico, na região de segunda-ordem. Logo, transições inversas de primeira e segunda-ordem podem ser obtidas para  $J_0$  suficientemente grande (ZIMMER; SILVA; MORAIS; MAGALHAES, 2011). Por outro lado, as flutuações quânticas introduzidas por  $\Gamma$  podem destruir o congelamento inverso. O campo  $\Gamma$  afeta a distribuição de cargas tal que os estados não-magnéticos tornam-se energeticamente desfavoráveis a baixas temperaturas. Neste caso, a diluição magnética do cluster diminui e conseqüentemente o congelamento inverso desaparece. Portanto, a presença simultânea de frustração e estados não-interagentes (sítios vazios ou duplamente ocupados) podem dar origem ao congelamento inverso (ZIMMER; SILVA; MORAIS; MAGALHAES, 2011).

O congelamento inverso também é estudado adotando clusters com spins de Ising no lugar de operadores fermiônicos, entretanto, com interações de curto-alcance antiferromagnéticas (AF)  $J_1$  entre primeiros vizinhos dentro do mesmo cluster. Logo, diferentemente dos trabalhos anteriores (formulação fermiônica (MAGALHAES; MORAIS; ZIMMER, 2008; MORAIS; ZIMMER; MAGALHAES, 2011; MORAIS; LAZO; ZIMMER; MAGALHAES, 2012) ou com spins 1 (LEUZZI; PAOLUZZI; CRISANTI, 2011; SCHUPPER; SHNERB, 2005)), neste considera-se clusters com spins de Ising, que podem assumir somente os valores  $+1$  ou  $-1$ . Diagramas de fase da temperatura em função da interação intracluster  $J_1$  indicam o surgimento de congelamento inverso para uma certa região de  $J_1/J$  para um tamanho de cluster bastante grande. Particularmente, a fase PM a baixas temperaturas é caracterizada por clusters com magnitude de momentos magnéticos baixos, que são obtidos quando as interações AF de curto-alcance entre spins de Ising dentro dos clusters são grandes. Portanto, frustração introduzida por desordem e uma fase PM com clusters de momentos magnéticos baixos são os elementos chaves para produzir congelamento inverso espontaneamente no presente modelo. Esses elementos podem ser produzidos por clusters de spins de Ising fortemente desordenados com interações de curto-alcance AF (SILVA; ZIMMER; MAGALHAES; LACROIX, 2012).

A partir de trabalhos anteriores, sugere-se que frustração gerada por desordem é um dos ingredientes necessários para o aparecimento de congelamento inverso. Neste sentido, investiga-se o papel da frustração geométrica no congelamento inverso. O modelo de VS com clusters de spins de Ising é analisado com interações intracluster do tipo adotado no modelo  $J_1 - J_2$ , onde são consideradas interações de curto-alcance entre primeiros ( $J_1$ ) e segundos ( $J_2$ ) vizinhos pertencentes ao mesmo cluster. As interações dadas por  $J_1$  e  $J_2$  podem ser ferromagnéticas e/ou antiferromagnéticas e a frustração geométrica intracluster é obtida através do ajuste da relação  $J_2/J_1$  (frustração geométrica máxima ocorre em torno de  $J_2/J_1 = \pm 0.5$ ). Em um primeiro momento, as interações de curto-alcance são consideradas ambas AF. Os resultados mostram que a compensação AF intracluster afeta as interações desordenadas intercluster. No caso sem frustração geométrica, essa compensação suprime a fase VS e pode introduzir uma transição reentrante VS/PM que está associada ao congelamento inverso. Contrariamente, clusters FE (onde são consideradas interações  $J_1$  FE e  $J_2$  AF) podem fortalecer a fase VS. Entretanto, o resultado mais importante é obtido considerando clusters AF com frustração geométrica. A frustração geométrica intracluster pode aumentar a intensidade do momento magnético do cluster favorecendo a ordem VS intercluster mesmo com uma desordem muito pequena. Esses resultados indicam que a presença de pequenos clusters em sistemas geometricamente frustrados podem ajudar a estabilizar a fase VS dentro de regimes fracamente desordenados. Portanto, a frustração intrínseca não é capaz de produzir congelamento inverso, pois para tanto, ela deveria levar a clusters com baixos momentos magnéticos, e ocorre justamente o contrário, ela aumenta o momento magnético dos clusters favorecendo a ordem VS.

Apesar do modelo adotado nesta tese melhorar a descrição termodinâmica do VS quântico

e fornecer resultados importantes no estudo do congelamento inverso, ainda há melhorias que podem ser feitas. Por exemplo, utilizar teorias que vão além da aproximação estática (YE J., 1995), para o modelo quântico de VS com clusters. Além disso, pode-se melhorar o tratamento a nível de campo médio, usando por exemplo conectividade finita (VIANA; BRAY, 1985; KIM; RODGERS; KAHNG; KIM, 2005). Uma outra proposta é assumir uma distribuição de tamanhos de clusters em vez de considerar todos os clusters de mesmo tamanho (BIEN; USADEL, 1986).

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALMEIDA, J. R. L. de; THOULESS, D. J. Stability of the Sherrington-Kirkpatrick Solution of a Spin Glass Model. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 11, n. 5, p. 983–990, 1978.

AVRAHAM, B. K. N.; MYASOEDOV, Y.; RAPPAPORT, M.; SHTRIKMAN, H.; FELDMAN, D. E.; TAMEGAI, T.; KES, P. H.; LI, M.; KONCZYKOWSKI, M.; BEEK, K. van der; ZELDOV, E. 'Inverse' Melting of a Vortex Lattice. **Nature**, v. 411, p. 451–454, 2001.

BIEN, K.; USADEL, K. Spin glasses with infinite-range and short-range interactions. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 58, n. 1–2, p. 117–122, 1986.

BINDER, K.; YOUNG, A. P. Spin Glass: Experimental Facts, Theoretical Concepts, and Open Questions. **Review of Modern Physics**, v. 58, n. 4, p. 801–927, Oct. 1986.

BLUME, M. Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in  $UO_2$ . **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 141, n. 2, p. 517–524, Jan. 1966.

BRAY, A. J.; MOORE, M. A. Replica theory of quantum spin glass. **J. Phys. C: Solid St. Phys.**, n. 13, p. L655–60, Jun. 1980.

CALLEN, H. B. **Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics**. [S.I.]: John Wiley and Sons, 1985.

CAPEL, H. On the Possibility of First-Order Phase Transitions in Ising Systems of Triplet Ions with Zero-Field Splitting. **Physica**, v. 32, n. 5, p. 966 – 988, 1966.

COSTA, F. A. da; YOKOI, C. S. O.; SALINAS, S. R. A. First-order Transition in a Spin-Glass Model. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 27, n. 10, p. 3365–3372, 1994.

CRISANTI, A.; LEUZZI, L. Stable solution of the simplest spin model for inverse freezing. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 95, n. 8, p. 087201, Aug. 2005.

DONNIO, B.; DERORY, A.; TERAZZI, E.; DRILLON, M.; GUILLON, D.; GALLANI, J.-L. Very Slow High-temperature Relaxation of the Remnant Magnetic Moment in 2 nm Mesomorphic Gold Nanoparticles. **Soft Matter**, The Royal Society of Chemistry, v. 6, p. 965–970, 2010.

DOTSENKO, V. An Introduction to the Theory of Spin Glasses and Neural Networks. **Journal of Statistical Physics**, Springer Netherlands, v. 85, p. 519–520, 1996.

EDWARDS, S. F.; ANDERSON, P. W. Theory of spin glasses. **Journal of Physics F: Metal Physics**, v. 5, n. 5, p. 965–974, 1975.

FELDMANN, H.; OPPERMANN, R. Replica Symmetry Breaking Solution for the Fermionic Ising Spin Glass and the Ghatak-Sherrington Model. **Cond-Mat**, Oct. 1999.

FISCHER, K. H.; HERTZ, J. A. **Spin Glasses**. EUA: Oxford, 1991.

GHATAK, S. K.; SHERRINGTON, D. Crystal Field Effects in a General S Ising Spin Glass. **J. Phys. C: Solid State**, Institut Laue Langevin, 156X, France, v. 10, n. 16, p. 3149, Aug. 1977.

GHOSH, S.; ROSENBAUM, T. F.; AEPPLI, G.; COPPERSMITH, S. N. Entangled Quantum State of Magnetic Dipoles. **Nature**, v. 425, p. 48, 2003.



- GINGRAS, M. J. P.; HENELIUS, P. Collective Phenomena in the  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$  Quantum Ising Magnet: Recent Progress and Open Questions. **Journal of Physics: Conference Series**, v. 320, p. 012001, 2011.
- HAQUE, A.; MORRIS, E. R. Thermogelation of Methylcellulose. Part I: Molecular Structures and Processes. **Carbohydrate Polymers**, v. 22, p. 161–173, Jul. 1993.
- HIRRIEN, M.; CHEVILLARD, C.; DESBRIERES, J.; AXELOS, M.; RINAUDO, M. Thermogelation of methylcelluloses: new evidence for understanding the gelation mechanism. **Polymer**, v. 39, n. 25, p. 6251 – 6259, 1998.
- KIM, D.-H.; RODGERS, G. J.; KAHNG, B.; KIM, D. Spin-glass phase transition on scale-free networks. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 71, p. 056115, May 2005.
- KRIVORUCHKO V.N.; TARENKOV, V. V. D. D. A. P. O. I. V. Unconventional ferromagnetism and transport properties of (in,mn)sb dilute magnetic semiconductor. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 322, p. 915–923, April 2010.
- LACROIX, C. Frustrated Metallic Systems: A Review of Some Peculiar Behavior. **Journal of the Physical Society of Japan**, v. 79, n. 1, p. 011008, 2010.
- LEUZZI, L.; PAOLUZZI, M.; CRISANTI, A. Random Blume-Capel Model on a Cubic Lattice: First-Order Inverse Freezing in a Three-Dimensional Spin-Glass System. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 83, p. 014107, Jan. 2011.
- MAGALHAES, S. G.; MORAIS, C. V.; ZIMMER, F. M. Role of the Transverse Field in Inverse Freezing in the Fermionic Ising Spin-glass Model. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 77, n. 13, p. 134422, Apr. 2008.
- \_\_\_\_\_. Inverse Freezing in the Hopfield Fermionic Ising Spin Glass. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 81, n. 1, p. 014207, Jan. 2010.
- MAGALHAES, S. G.; SCHMIDT, A. A. Fermionic heisenberg model for spin glasses with bcs pairing interaction. **Phys. Rev. B**, v. 62, p. 11686, may. 2000.
- MARCANO, N. Inhomogeneidades intrínsecas en el sistema de electrones fuertemente correlacionados:  $\text{CeNi}_{1-x}\text{Cu}_x$ . **Tese de Doutorado Universidad de Cantabria**, 2004.
- MARCANO, N.; SAL, J. C. G.; ESPESO, J. I.; TERESA, J. M. D.; ALGARABEL, P. A.; PAULSEN, C.; IGLESIAS, J. R. Mesoscopic Magnetic States in Metallic Alloys with Strong Electronic Correlations: A Percolative Scenario for  $\text{CeNi}_{1-x}\text{Cu}_x$ . **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 98, n. 16, p. 166406, Apr. 2007.
- MORAIS, C. V.; LAZO, M. J.; ZIMMER, F. M.; MAGALHAES, S. G. Inverse freezing in the gatak-sherrington model with a random field. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 85, p. 031133, Mar 2012.
- MORAIS, C. V.; ZIMMER, F. M.; MAGALHAES, S. G. Inverse Freezing in the Hopfield Fermionic Ising Spin Glass with a Transverse Magnetic Field. **Physics Letters A**, v. 375, p. 689–697, jan. 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**. Department of Physics, Massachusetts Institute of Technology: Addison-Wesley Publishing Company, 1988.

PARISI, G. The Order Parameter for Spin Glasses: a Function on the Interval 0-1. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 13, n. 3, p. 1101–1112, 1980.

PATHRIA, R. **Statistical Mechanics**. [S.I.]: Butterworth Heinemann, second edition, 1996.

POPOV, V. N.; FEDOTOV, S. A. The Functional-integration Method and Diagram Technique for Spin Systems. **Soviet Physics**, v. 67, p. 535–541, Mar. 1988.

PORTMANN, A. V. . D. P. O. An inverse transition of magnetic domain patterns in ultrathin films. **Nature**, v. 422, p. 701–704, April. 2003.

QUILLIAM, J. A.; MENG, S.; MUGFORD, C. G. A.; KYCIA, J. B. Evidence of Spin Glass Dynamics in Dilute  $LiHo_xY_{1-x}F_4$ . **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 101, p. 187204, Oct. 2008.

QUILLIAM, J. A.; MUGFORD, C. G. A.; GOMEZ, A.; KYCIA, S. W.; KYCIA, J. B. Specific Heat of the Dilute Ising Magnet  $LiHo_xY_{1-x}F_4$ . **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 98, p. 037203, Jan. 2007.

RAMIREZ, A. P. Strongly Geometrically Frustrated Magnets. **Annual Reviews Mater. Sci.**, v. 24, p. 453–480, 1994.

REICH, D. H.; ELLMAN, B.; YANG, J.; ROSENBAUM, T. F.; AEPPLI, G.; BELANGER, D. P. Dipolar Magnets and Glasses: Neutron-scattering, Dynamical, and Calorimetric Studies of Randomly Distributed Ising Spins. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 42, p. 4631–4644, Sep. 1990.

ROSENOW, B.; OPPERMANN, R. Tricritical Behavior of Ising Spin Glasses with Charge Fluctuations. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 77, n. 8, p. 1608–1611, Aug. 1996.

SACHDEV, S. **Quantum Phase Transitions**. [S.I.]: Cambridge University Press, 1999.

SCHOLL, A.; KILIAN, L.; ZOU, Y.; ZIROFF, J.; HAME, S.; REINERT, F.; UMBACH, E.; FINK, R. H. Disorder of an organic overlayer on a metal surface upon cooling. **Science**, American Physical Society, v. 329, p. 303–305, Jul 2010.

SCHUPPER, N.; SHNERB, N. M. Spin Model for Inverse Melting and Inverse Glass Transition. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 93, p. 037202, Jul. 2004.

\_\_\_\_\_. Inverse Melting and Inverse Freezing: A Spin Model. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 72, n. 4, p. 046107, Oct. 2005.

SHERRINGTON, D.; KIRKPATRICK, S. Infinite-ranged Models of Spin-glasses. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 17, n. 11, p. 4384–4403, Jun. 1978.

SILVA, C. F.; ZIMMER, F. M.; MAGALHAES, S. G.; LACROIX, C. Inverse freezing in a cluster ising spin-glass model with antiferromagnetic interactions. **Phys. Rev. E**, v. 86, p. 051104, Nov 2012.

SOUKOULIS, C. M. Thermodynamic Properties of Concentrated Spin Glasses: A Cluster Mean-field Theory. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 18, p. 3757–3759, Oct. 1978.

SOUKOULIS, C. M.; LEVIN, K. Cluster Mean-field Model of the Spin Glasses: Static Properties. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 18, p. 1439–1445, Aug. 1978.

THEUMANN, A.; COQBLIN, B.; MAGALHAES, S. G.; SCHMIDT, A. A. Spin-glass freezing in kondo-lattice compounds. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 63, n. 5, p. 054409, Jan. 2001.

THEUMANN, A.; GUSMÃO, M. V. Quantum Ising Spin Glass. **J. Phys. C: Solid St. Phys.**, v. 105A, n. 6, Oct. 1984.

THEUMANN, A.; SCHMIDT, A. A.; MAGALHAES, S. G. The Ising Spin Glass in a Transverse Field Revisited. Results of Two Fermionic Models. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 311, n. 3-4, p. 498 – 506, 2002.

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

VIANA, L.; BRAY, A. J. Phase diagrams for dilute spin glasses. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, oct. 1985.

WIETHEGE, W.; SHERRINGTON, D. The Transverse Ising Model: Fermionic Representation and the Functional Integral Approach. **J. Phys. C: Solid State Phys**, n. 19, p. 6983–6991, Jun. 1986.

WILKS, J.; BETTS, D. S. **An Introduction to Liquid Helium**. [S.I.]: Oxford University Press, 1987.

WU, W.; BITKO, D.; ROSENBAUM, T. F.; AEPPLI, G. Quenching of the Nonlinear Susceptibility at a  $T=0$  Spin Glass Transition. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 71, n. 12, p. 1919–1922, Sep. 1993.

WU, W.; ELLMAN, B.; ROSENBAUM, T. F.; AEPPLI, G.; REICH, D. H. From Classical to Quantum Glass. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 67, n. 15, p. 2076–2079, Oct. 1991.

YE J., S. S. R. N. Landau theory of quantum spin glasses of rotors and ising spins. **Phys. Rev. B**, v. 52, n. 1, p. 384–410, Jul. 1995.

ZIMMER, F. M.; MAGALHAES, S. G. One-step Replica Symmetry Breaking Solution for a Fermionic Ising Spin Glass in a Transverse Field. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 74, p. 012202, Jul. 2006.

\_\_\_\_\_. One-step Replica Symmetry Breaking Solution for a Highly Asymmetric Two-Sublattice Fermionic Ising Spin-Glass Model in a Transverse Field. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 76, p. 014203, Jul. 2007.

ZIMMER, F. M.; SILVA, C. F.; MAGALHAES, S. G. Cluster Fermionic Ising Spin Glass Model with a Transverse Field. **Phys. A**, v. 389, p. 5594–5601, sep. 2010.

ZIMMER, F. M.; SILVA, C. F.; MAGALHAES, S. G.; LACROIX, C. Interplay between spin-glass clusters and geometrical frustration. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 89, p. 022120, Feb 2014.

ZIMMER, F. M.; SILVA, C. F.; MORAIS, C. V.; MAGALHAES, S. G. Inverse Freezing in the Cluster Fermionic Spin Glass Model with a Transverse Field. **Journal of Statistical Mechanics**, v. 2011, p. P05026, may 2011.