

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS
INSTITUTO DE FÍSICA E MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA



Dissertação

**Título: Modelo Vidro de Spin Fermiônico com Campos
Transverso e Longitudinal Aleatórios**

Alexsandra Pereira dos Santos

Pelotas, 2020

Alexsandra Pereira dos Santos

**Modelo Vidro de Spin Fermiônico com Campos Transverso e
Longitudinal Aleatórios**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física e Matemática da Universidade Federal de Pelotas, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Alberto Vaz de Moraes Júnior

Pelotas, 2020

Universidade Federal de Pelotas / Sistema de Bibliotecas
Catalogação na Publicação

S237m Santos, Alexandra Pereira dos

Modelo vidro de spin fermiônico com campos transverso e longitudinal aleatórios / Alexandra Pereira dos Santos ; Carlos Alberto Vaz de Moraes Júnior, orientador. — Pelotas, 2020.

124 f. : il.

Dissertação (Mestrado) — Programa de Pós-Graduação em Física, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, 2020.

1. Vidro de spin. 2. Modelo fermiônico. 3. Campos aleatórios. 4. Susceptibilidade. I. Moraes Júnior, Carlos Alberto Vaz de, orient. II. Título.

CDD : 530.143

Alexsandra Pereira dos Santos

Título: Modelo Vidro de Spin Fermiônico com Campos Transverso e Longitudinal Aleatórios

Dissertação aprovada, como requisito parcial, para obtenção do grau de Mestre em Física, Programa de Pós-Graduação em Física, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas.

Data da Defesa: 29 de maio de 2020

Banca examinadora:

Prof. Dr. Carlos Alberto Vaz de Moraes Júnior (Orientador)



Doutor em Física
Universidade Federal de Pelotas

Prof. Dr. Maurício Jeomar Piotrowski



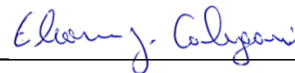
Doutor em Física
Universidade Federal de Pelotas

Prof. Dr. Fábio Teixeira Dias



Doutor em Física
Universidade Federal de Pelotas

Prof. Dr. Eleonir João Calegari



Doutor em Física
Universidade Federal de Santa Maria

AGRADECIMENTOS

Meu maior agradecimento é dedicado a minha família materna, a qual sempre foi incansável na luta diária, para que eu pudesse crescer da melhor forma possível. Minha família nunca mediu esforços para me proporcionar o necessário, para obter boas oportunidades. Oportunidades estas que nenhum deles teve, quando jovens. Obrigada por todo o carinho, amor e compreensão despendidos a mim durante a minha criação. Obrigada por todo o respaldo, encorajamento e força que me deram ao longo de todos estes anos da minha vida.

Agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e a Fundação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelos projetos e incentivos a pesquisa, através da concessão de bolsas, equipamentos e auxílios para a participação em eventos. Sem tais investimentos e suporte eu, assim como muitos outros colegas, não teríamos condições de ingressar, manter e finalizar uma pós-graduação. Dando assim continuidade aos nossos estudos e aperfeiçoamento profissional.

Agradeço também a Universidade Federal de Pelotas (UFPel) que vem me acolhendo de forma extraordinária, ao longo da minha graduação e mestrado. Obrigada ao Programa de Pós-Graduação em Física, pela oportunidade e assistência. Assim como, por todas as experiências que me foram proporcionadas dentro desta Instituição e Programa ao longo destes anos. Através destas pude me desenvolver e crescer, pessoal e profissionalmente. Agradeço imensamente ao meu orientador, o Prof. Dr. Carlos Morais, pela dedicação, suporte, norteamto e ensinamentos transmitidos durante toda a minha formação acadêmica até o presente momento. Começamos em um projeto de iniciação científica durante a minha graduação, que se estendeu para um mestrado e lá se foram quase 6 anos de trabalhos, os quais sem ele não seriam possíveis.

Por último e de forma bem geral, gostaria de agradecer aos amigos, professores, demais colegas e profissionais, assim como as pessoas aleatórias com as quais compartilhei vivências ao longo da minha vida. Independentemente das experiências vivenciadas terem sido boas ou ruins, elas são as responsáveis pela construção de quem sou. Neste presente momento, sou o resultado de todas as interações e experiências que vivi. Então, obrigada. Pois em consequência destas, me encontro aqui escrevendo esses agradecimentos.

RESUMO

SANTOS, Alessandra, **Modelo Vidro de Spin Fermiônico com Campos Transverso e Longitudinal Aleatórios** 2020, 122p. Dissertação (Mestrado em Física) - Programa de Pós-Graduação em Física, Departamento de Física, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2020.

O presente trabalho estudou os comportamentos das susceptibilidades magnéticas linear e não linear, assim como do parâmetro de ordem vidro de spin q e da linha de Almeida-Thouless λ_{AT} , utilizando o Modelo Vidro de Spin Ising Fermiônico (VSIF) com ambos campos transverso e longitudinal aleatórios. A motivação deste trabalho encontra-se na controvérsia acerca da existência, ou não, de uma transição de fase vidro de spin (VS) no composto de $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$. Este composto, no regime de baixas diluições $x = 0,167$ apresenta um comportamento peculiar em sua susceptibilidade magnética não linear χ_3 , o qual tem sido fonte de controvérsias em sua interpretação. Na ausência de um campo transverso B_x aplicado, χ_3 apresenta uma divergência em uma temperatura T_f , a qual indica uma transição de fase VS de segunda ordem. No entanto, na presença de B_x , a divergência em χ_3 é substituída por um máximo arredondado, localizado em uma temperatura T^* . Neste caso $T^* < T_f$, ou seja, a temperatura do máximo é menor que a temperatura de transição de fase a B_x nulo. Sugere-se que esse comportamento ocorre pela presença de campos aleatórios no interior do material, os quais são induzidos através do campo transverso aplicado. Outro importante comportamento observado experimentalmente no composto de $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$, está relacionado ao seu diagrama de fases. No qual, o aumento do campo transverso leva o sistema a um ponto crítico quântico (PCQ), onde há transição de fase para temperatura nula. No modelo VSIF, os spins são escritos em termos de operadores fermiônicos. Tal modelo prevê quatro estados distintos por sítio, dois estados não-magnéticos $|00\rangle$ e $|\uparrow\downarrow\rangle$ e dois magnéticos $|\uparrow 0\rangle$ e $|0 \downarrow\rangle$. Particularmente, o trabalho buscou analisar os efeitos combinados de campos transverso e longitudinal aleatórios. No modelo proposto, é introduzido o parâmetro p , o qual regula a fração de spins sobre a influência do campo transverso. Como consequência, além de permitir uma alternância entre os regimes semi-clássico e quântico através do ajuste do parâmetro p , importantes mecanismos relacionados a mudanças de comportamento da susceptibilidade não linear no composto $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ puderam ser investigados. Através dos resultados obtidos, foi observado que apenas na presença de campo longitudinal aleatório, $\Delta/J > 0,00$ há a substituição da divergência pelo máximo em χ_3 . Verifica-se também que a temperatura T^* não indica uma temperatura de transição de fase, e sim uma temperatura que indica a presença de uma fase de Griffiths, a qual sugerem singularidades dentro da fase paramagnética. Outro resultado importante foi a obtenção do ponto crítico quântico, o qual indica uma transição de fase em $T = 0,00$. Neste caso, observou-se que tal ponto é encontrado apenas no limite quântico, quando $p = 0,00$, onde todos os spins estão sob a influência do campo transverso.

Palavras Chave: Vidro de spin, campos aleatórios, susceptibilidade, modelo fermiônico.

ABSTRACT

SANTOS, Alexsandra, **Fermionic Model Spin Glass with randoms transverse and longitudinal fields** 2020, 122p. Dissertation (Master Degree in Physics) - Programa de Pós-Graduação em Física, Departamento de Física, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, 2020.

The present work studies the behaviors of linear and non-linear magnetic susceptibilities, as parameters of order of spin glass q and of the Almeida-Thouless line λ_{AT} , using the Fermionic Ising Spin Glass Model (FISG) with both random transverse and longitudinal fields. The motivation of this work is in the controversy about the existence, or not, of a phase transition of spin glass (SG) in the compound $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$. This compound, in the low dilution regime $x = 0.167$, presents a peculiar behavior in the non-linear magnetic susceptibility χ_3 , which has been a source of controversy in its interpretation. In the absence of an applied transverse field B_x , χ_3 presents a divergence in a temperature T_f , which indicates a second order SG phase transition. However, in the presence of B_x , the divergence in χ_3 is replaced by a rounded maximum, located at a temperature T^* . In this case $T^* < T_f$, which means that the maximum temperature T^* is lower than the phase transition temperature T_f when B_x is absent. It is suggested that this behavior occurs due to the presence of random fields, which are induced through the applied transverse field. Another important behavior observed experimentally in the compound $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$, is related to its phase diagram. In which, the increase in the transverse field takes the system to a quantum critical point (QCP), where there is transition from phase to zero temperature. In the FISG model, spins are written in terms of fermionic operators. This model provides for four distinct states per site, two non-magnetic states $|00\rangle$ and $|\uparrow\downarrow\rangle$ and two magnetic $|\uparrow 0\rangle$ and $|0 \downarrow\rangle$. In particular, the objective of the work is to analyze the combined effects of randoms transverse and longitudinal fields. In the proposed model, the parameter p is introduced, which controls the fraction of spins on the influence of the transverse field. As a consequence, in addition to allows the alternate between the semi-classical and quantum regimes by adjusting the parameter p , important mechanisms related to the changes in the behavior of non linear susceptibility in the $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ compound are investigated. Through the results obtained, it was observed that only in the presence of a random longitudinal field, $\Delta/J > 0.00$ the divergence is replaced by the maximum in χ_3 . It is also verified that the temperature T^* does not indicates a phase transition temperature, but a temperature that indicates the presence of a Griffiths phase, in which suggests singularities inside the paramagnetic phase. Another important result was the obtaining of the quantum critical point, a phase transition at $T = 0,00$. In this case, it was observed that such a point is found only at the quantum limit, when $p = 0.00$, where all spins are under the influence of the transverse field.

Key-words: Spin-glass, random fields, susceptibility, fermionic model.

SUMÁRIO

Pág.

LISTA DE FIGURAS

1	INTRODUÇÃO	17
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	23
2.1	Magnetismo em Sólidos	23
2.2	Ordenamento Magnético Vidro de Spin	25
2.3	Vidro de Spin e o Composto de LiHoF_4	32
2.4	Abordagem Teórica para a Fase Vidro de Spin	38
2.4.1	Modelo de Ising	38
2.4.2	Teoria de Campo Médio e Modelo de Alcance Infinito	40
2.4.3	Modelo Vidro de Spin de Ising	43
2.4.4	Modelo Vidro de Spin de Ising Fermiônico	46
2.5	Abordagens Teóricas para o Composto de $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$	50
3	METODOLOGIA	55
3.1	Modelo Vidro de Spin de Ising Fermiônico com Campos Transverso e Longitudinal Aleatórios	55
3.2	Cálculos Numéricos	62
4	RESULTADOS	65
4.1	Resultados para $p = 0,00$.	65
4.2	Resultados para $p > 0,00$.	69
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	79
A	APÊNDICE A - MODELO VIDRO DE SPIN SHERRINGTON E KIRKPATRICK (SK)	83
B	APÊNDICE B - EXPANSÃO DA MAGNETIZAÇÃO E OBTENÇÃO DAS SUSCEPTIBILIDADES MAGNÉTICAS	87
C	APÊNDICE C - ESTABILIDADE DA SOLUÇÃO COM SIMETRIA DE RÉPLICAS	89
D	APÊNDICE D - MODELO VIDRO DE SPIN FERMIÔNICO	91

D.1 Modelo Vidro de Spin Fermiônico com Campos Transverso e Longitudinal Aleatórios	91
D.1.1 Frequências de Matsubara	91
D.1.2 Transformação de Hubbard-Stratonovich	94

A ANEXO A - TRATAMENTO DE SISTEMAS COM MUITOS CORPOS 97

A.1 Segunda Quantização	97
A.1.1 Operadores de Criação e Aniquilação	97
A.1.2 Espaço dos Estados Coerentes	100
A.1.3 Álgebra de Grassmann	101
A.1.4 Estados Coerentes Para Férmions	104
A.1.5 Integrais Gaussianas	106
A.1.6 Formulação das Integrais Funcionais	108
A.1.6.1 Integral de Caminho do Tempo Imaginário e a Função de Partição	112
A.1.7 Integral Funcional dos Estados Coerentes	114
A.1.8 Função de Partição Para Sistema de Muitos Corpos	116

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 119

LISTA DE FIGURAS

	<u>Pág.</u>	
2.1	Esquema ilustrativo dos momentos dipolares magnéticos (setas vermelhas) contidos no átomo. (a) Momento magnético orbital, relacionado ao movimento de translação do elétron ao redor no núcleo. (b) Momento magnético de spin, relacionado ao movimento de rotação do elétron.	23
2.2	Esquema ilustrativo de uma rede quadrada frustrada devido a fixação de um número ímpar de interações.	26
2.3	Susceptibilidade magnética <i>vs</i> T para: $Cu - 0,1\%Mn(x)$, $Ag - 0,5\%Mn(\bullet)$, $Au - 0,5\%Mn(+)$, $Au - 0,2\%Cr(\Delta)$ e $Ag - 1,0\%Mn(\square)$ para um campo magnético $H = 20$ Oe e 100 Hz.	28
2.4	Parte real da susceptibilidade $\chi(\omega) - \chi'$ em função da temperatura para $Cu - 0,9\%Mn$. Na janela a direita observa-se o máximo de forma detalhada, onde cada máximo corresponde a uma determinada frequência do campo magnético externo, as frequências são de: 1,33 kHz (\square), 234 Hz (\circ), 10,4 Hz (x), e 2,6 Hz (Δ).	29
2.5	Susceptibilidade magnética estática <i>vs</i> temperatura de CuMn para concentrações de 1,08% e 2,02% de Mn. Após o resfriamento a campo nulo ($H < 0,005$ Oe), as susceptibilidades iniciais (b) e (d) foram obtidas a partir do aumento da temperatura em um campo de $H = 5,90$ Oe. No caso das susceptibilidades (a) e (b) o campo de $H = 5,90$ Oe foi aplicado para uma temperatura maior que T_f e a amostra foi resfriada na presença deste campo.	31
2.6	(a) Estrutura cristalina tetragonal do composto $LiHoF_4$. Tem-se um espaçamento de treliça $a = 5,177 \text{ \AA}$ e $c = 10,75 \text{ \AA}$. As linhas sólidas representam as vias de super-troca entre os íons de Ho^{3+} magnéticos (círculos pretos), mediadas via flúor - F (círculos verdes). (b) Diagrama de fases esquemático da temperatura (T) - diluição (x) - campo transversal grande (B_x). A diluição é realizada através da substituição aleatória de íons de Ho^{3+} magnéticos por íons de Y^{3+} não magnéticos, tal substituição mantém a estrutura cristalina inalterada. No diagrama as siglas representam: PM - fase paramagnética, SG - fase vidro de spin e FM- fase ferromagnética, e <i>FM or SG</i> é a indicação de uma fase “ferroglass”.	33
2.7	Susceptibilidade magnética não linear - $\chi_3 \times B_x$ do composto $LiHo_{0.167}Y_{0.833}F_4$, para quatro temperaturas distintas. A temperatura de transição de fase VS é $T = 98$ mK.	36

2.8	Diagrama de fases do campo transversal Γ vs T para o composto $\text{LiHo}_{0,167}\text{Y}_{0,833}\text{F}_4$. SG: fase vidro de spin; PM: fase paramagnética. Círculos preenchidos seguem medidas dinâmicas, círculos abertos medidas a partir de χ_3 e quadrados estão relacionados com medidas de χ_1 ($f=1,5$ Hz).	37
2.9	Susceptibilidade magnética não linear teórica - $J_0^3\chi_3$ x B_x . Na janela superior encontra-se o gráfico de χ_3 x B_x experimental, obtido na [23]	51
2.10	(a) Susceptibilidade magnética não linear teórica - χ_3 vs Γ/J , para temperaturas fixas. (b) Diagrama de Fase T/J vs Γ/J , onde Δ e Γ/J possuem a seguinte relação: $\Delta = 0.002(\Gamma/J)^2$	53
4.1	Parâmetro de ordem q e linha de Almeida-Thouless λ_{AT} , como funções da temperatura. Linhas cheia e tracejada, respectivamente, para $p = 0,00$, em (a) para $\Gamma/J = 0,00$ e em (b) para $\Gamma/J = 1,25$, para diversos valores de Δ/J . Linhas: vermelhas para $\Delta/J = 0,00$; verdes para $\Delta/J = 0,25$ e azuis para $\Delta/J = 0,50$	66
4.2	Susceptibilidade magnética linear como função da temperatura, para $\Delta/J = 0,00$ e $\Delta/J = 0,25$, linhas vermelha cheia e azul tracejada, respectivamente. Em (a) $\Gamma/J = 0,00$ e em (b) $\Gamma/J = 1,25$. Em ambos os casos a temperatura de transição encontra-se no pico de χ_1 para $\Delta/J = 0,00$ e é indicada pela flecha.	67
4.3	Susceptibilidade magnética não linear como função da temperatura para $\Gamma/J = 0,00$ e $p = 0,00$, para $\Delta/J = 0,10$ (linha verde sólida); $0,25$ (linha azul pontilhada); $0,50$ (linha rosa tracejada) e na janela para $\Delta/J = 0,00$ (linha vermelha sólida).	67
4.4	Susceptibilidade magnética não linear vs temperatura, para $p = 0,00$. Em (a) para $\Delta/J = 0,00$ e em (b) $\Delta/J = 0,25$. Em ambos os casos nas linhas sólidas verdes tem-se $\Gamma/J = 0,00$, tracejadas vermelhas $\Gamma/J = 0,50$ e pontilhada/tracejada azuis $\Gamma/J = 1,00$	68
4.5	Susceptibilidade magnética não linear vs Γ/J para valores distintos de T/J . Em (a) para $\Delta/J = 0,00$ e $p = 0,00$ e em (b) $\Delta/J = 0,25$ e $p = 0,00$	69
4.6	Susceptibilidade magnética linear como função da temperatura, para $\Delta/J = 0,00$. Em (a) para $\Gamma/J = 0,00$ onde a linha cheia vermelha equivale a $p = 0,00$ e o símbolo (+) a $p = 0,50$; na janela observa-se χ_1 vs T para para $\Gamma/J = 0,00$ onde a linha cheia vermelha equivale a $p = 0,00$ e o símbolo (+) a $p = 0,50$. Em (b), $\Gamma/J = 1,25$, a linha vermelha sólida equivale a $p = 0,00$, verde tracejada a $p = 0,50$ e a linha azul pontilhada/tracejada a $p = 1,00$. Em ambos os gráficos as temperaturas de transição de fase para cada caso é indicada pela seta.	70

4.7	Susceptibilidade magnética linear <i>vs</i> temperatura, para $\Gamma/J = 1,25$. Em (a) para $\Delta/J = 0,25$ e em (b) $\Delta/J = 0,50$, em ambos os casos nas linhas sólidas vermelhas equivalem a $p = 0,00$, tracejada verdes a $p = 0,50$ e pontilhada/tracejadas azuis a $p = 1,00$	71
4.8	Susceptibilidade magnética não linear como função da temperatura, para $\Delta/J = 0,00$. Em (a) para $\Gamma/J = 0,00$ onde a linha cheia vermelha equivale a $p = 0,00$ e o símbolo (+) em azul a $p = 0,50$. Em (b), $\Gamma/J = 1,25$, linha vermelha tracejada equivale a $p = 0,00$, verde sólida a $p = 0,50$ e a linha azul pontilhada/tracejada a $p = 1,00$	71
4.9	Susceptibilidade magnética não linear <i>vs</i> temperatura, para $\Gamma/J = 1,25$. Em (a) para $\Delta/J = 0,25$ e em (b) $\Delta/J = 0,50$, em ambos os casos nas linhas azuis tem-se $p = 0,00$, vermelhas $p = 0,50$ e verdes $p = 1,00$	72
4.10	Susceptibilidade magnética não linear <i>vs</i> Γ/J para valores distintos do parâmetro p . Em (a) para $\Delta/J = 0,00$ e $T/J = 1,30$ e em (b) $\Delta/J = 0,25$ e $T/J = 0,90$	73
4.11	Diagrama de fase T/J <i>vs</i> Γ/J para: (a) $p = 0,00$ e (b) $p = 0,50$. Em ambos os casos as linhas vermelhas correspondem a $\Delta/J = 0,00$, verdes a $\Delta/J = 0,25$ e azuis a $\Delta/J = 0,50$. Nestes casos, as linhas indicam uma transição VS/PM com o aumento de T/J e Γ/J	73
4.12	Diagrama de fase T <i>vs</i> Γ/J para: (a) $\Delta/J = 0,00$ e (b) $\Delta/J = 0,25$. Em ambos os gráficos as linhas vermelhas correspondem a $p = 0,00$, verdes a $p = 0,50$ e azuis a $p = 1,00$. Nas figuras acima as linhas indicam uma transição VS/PM, com o aumento de T/J e Γ/J	74
4.13	Diagrama de fase T/J <i>vs</i> Δ/J para $\Gamma/J = 0,00$ e $p = 0,00$	75
4.14	Em (a) Parâmetros q e λ_{AT} <i>vs</i> T/J , no qual a temperatura de transição de fase T_f é indicada pela seta. Em (b) χ_3 <i>vs</i> T/J , onde o máximo em χ_3 localiza a temperatura T^* . Em ambos os casos para $\Gamma/J = 1,20$, $p = 0,00$ e $\Delta/J = 0,25$	76
4.15	Diagrama de fase T_f/J <i>vs</i> Γ/J (linha sólida vermelha) e T^*/J <i>vs</i> Γ/J (linha tracejada azul), para $\Delta/J = 0,25$. Em (a) para $p = 0,00$ e em (b) para $p = 0,50$.	76

1 INTRODUÇÃO

O estudo de sistemas magnéticos é de fundamental importância tanto nas áreas da física como em suas aplicações tecnológicas [1, 2]. Com o avanço da tecnologia, foram observados experimentalmente novos comportamentos e propriedades físicas, bem como o surgimento de novos sistemas (materiais, ligas, entre outros). Particularmente interessantes são os diferentes tipos de ordenamentos e fases magnéticas que estes sistemas podem apresentar como, por exemplo, ferromagnetismo, antiferromagnetismo e mais recentemente, os Vidros de Spin (VS) [1, 2]. Os estudos a respeito do problema vidro de spin foram desenvolvidos a partir da década de 70. O vidro de spin é um sistema magnético desordenado, o qual pode exibir propriedades peculiares. Neste, verifica-se uma competição de interações entre os momentos magnéticos, bem como uma aleatoriedade destas interações. Consequentemente, observa-se uma desordem congelada dos spins para temperaturas abaixo da temperatura crítica de transição de fase T_c [1, 2]. Em outras palavras, a desordem e a competição entre as interações (frustração) conduzem ao congelamento dos momentos magnéticos em direções totalmente aleatórias para uma temperatura $T_c = T_f$, onde T_f é a temperatura de transição de fase.

A caracterização de tais sistemas não é trivial. Por exemplo, o pico dependente da frequência do campo magnético aplicado na susceptibilidade magnética linear em T_f , uma peculiaridade dos VS, pode ser considerado um traço relativamente universal, já que ocorre em outros ordenamentos magnéticos [3]. Contudo, análises mais profundas em torno dos sistemas VS indicaram também outras características, como magnetização remanente para temperaturas acima da temperatura de transição $T > T_f$ e magnetização dependente da frequência do campo aplicado. O conjunto destas especificidades definiram o VS como um novo ordenamento magnético. Como consequência, houve grande interesse quanto ao tratamento de sistemas deste tipo, devido principalmente a complexidade associada a desordem e aleatoriedade [1, 3].

A partir da descoberta desse ordenamento, começaram-se as buscas por modelos teóricos que fossem capazes de descrevê-lo. No entanto, em sistemas VS, a desordem e a aleatoriedade nas interações geram uma maior dificuldade na descrição teórica. De forma geral, Modelos de Ising os quais geralmente descrevem sistemas com características binárias, têm sido adotados por diversos teóricos para a descrição de sistemas magnéticos [4–6]. Nesse sentido, os primeiros trabalhos teóricos na descrição VS propunham um modelo de Ising com a introdução de aleatoriedade, a qual ocorre através da troca de uma interação J fixa entre os sítios, por uma variável aleatória de interação J_{ij} [5, 6]. Consequentemente, alguns resultados experimentais, como o pico na susceptibilidade magnética linear, foram reproduzidos pelo modelo dentro da teoria de campo médio [6]. No entanto, ao longo dos anos, diversos desafios até então desconhecidos surgiram na descrição dos VS como, por

exemplo, na representação do calor específico [7–9]. Desta forma, novas abordagens a modelos já existentes bem como novos modelos foram propostos na busca da descrição dos vidros de spin [1, 3, 10].

De maneira geral, diversos avanços, tanto experimentais quanto teóricos, foram feitos na descrição dos VS [5, 6, 10]. Especificamente, dentre os sistemas que são sugeridos apresentar este ordenamento e que têm sido extensivamente discutidos, destaca-se o composto LiHoF_4 (Lítio, Hólmio e Flúor) [11–14]. O LiHoF_4 é um sistema bem descrito por spins Ising, podendo gerar compostos do tipo $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ (Lítio, Hólmio, Ítrio e Flúor), onde a desordem é introduzida pela substituição aleatória de átomos de Ho^{3+} (magnéticos) pelos de Y^{3+} (não magnéticos), o que pode ser pensado como um mecanismo de diluição magnética [12, 13]. Além dos efeitos observados no composto de $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ gerados pela aleatoriedade, outros efeitos surgem devido a aplicação de um campo magnético transversal B_x . Nestes sistemas, os spins estão alinhados paralelamente ao eixo z . Por este motivo B_x é dito transversal. O principal efeito da presença de B_x é a temperatura de transição de fase T_f ser levada a um ponto crítico quântico (PCQ), onde uma transição de fase a temperatura nula ocorre, efeito este que possui uma origem puramente quântica [11, 13]. Experimentalmente, no que diz respeito ao comportamento da susceptibilidade magnética não linear χ_3 temos dois contextos distintos. Observa-se que na ausência do campo transversal aplicado B_x , χ_3 apresenta clara divergência na temperatura de transição de fase T_f , indicando uma transição de fase VS de segunda ordem. Porém, a partir da aplicação do B_x , a divergência dá lugar a um máximo arredondado [11]. Esse máximo se localiza em uma temperatura T^* , mais baixa que T_f obtida na ausência de B_x . Esta mudança no comportamento da susceptibilidade não linear tem sido fonte de grande controvérsia acerca da existência, ou não, da fase VS a partir da aplicação de campo transversal B_x [11–16]. Sugere-se que esta mudança no comportamento de χ_3 ocorre devido a indução de campos aleatórios por meio da aplicação do campo transversal em sistemas de $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ [12–16].

Do ponto de vista teórico, com intuito de entender o comportamento experimental de χ_3 e o significado da temperatura T^* , uma análise detalhada de χ_3 no modelo vidro de spin dentro de um Modelo de Ising em formalismo semi-clássico foi realizada na referência [14] e fermiônico em [16]. No caso da referência [14], uma abordagem dentro do formalismo semi-clássico foi utilizada para o modelo vidro de spin Sherrington-Kirkpatrick (modelo SK). O Hamiltoniano do modelo SK é dado por um acoplamento spin-spin, o qual possui uma variável de interação J_{ij} entre o par de spins vizinhos (i, j) . A variável J_{ij} segue uma distribuição de probabilidade gaussiana, e os spins assumem valores de ± 1 . No caso da referência [14] foi adicionado ao Hamiltoniano um termo de campo aleatório (h_i) e um de campo longitudinal uniforme (H_l) . Com isso o papel do campo aleatório no comportamento da susceptibilidade magnética não linear foi investigado, bem como a

relação da susceptibilidade não linear com a linha de Almeida-Thouless λ_{AT} . Em adição, a relação entre χ_3 e a susceptibilidade vidro de spin χ_{VS} a partir da aplicação do campo aleatório foi investigada. Neste trabalho, para relacionar o modelo utilizado com os experimentos a respeito do composto de $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$, foi considerado que o campo transversal B_x é suficientemente pequeno, de forma a garantir que as flutuações quânticas pudessem ser desprezadas, mas tal que o campo ainda tivesse influência sobre o sistema [14]. Os resultados obtidos na referência mostram que a susceptibilidade magnética não linear não é inversamente proporcional apenas a linha de Almeida-Thouless λ_{AT} , mas sim a um termo $\lambda_{AT} + I_1$, onde I_1 é uma função do parâmetro de ordem vidro de spin q e do campo aleatório Δ . Deste modo, quando λ_{AT} e I_1 são iguais a zero, a susceptibilidade magnética não linear diverge em T_f , indicando uma transição de fase vidro de spin-paramagnética (VS/PM). Porém, quando $\lambda_{AT} = 0$ e $I_1 > 0$ a divergência em χ_3 é substituída por um máximo arredondado, localizado em uma temperatura T^* , onde $T^* < T_f$. Portanto, pode-se dizer que há duas fases paramagnéticas distintas, PM_1 e PM_2 , onde uma transição $VS - PM_1$ é indicada pela divergência em χ_3 , e uma transição $PM_1 - PM_2$ é indicada pelo máximo em χ_3 . Desta forma, devido às fracas correlações encontradas na transição $PM_1 - PM_2$ concluiu-se que esta é uma fase de Griffiths e não uma verdadeira transição de fase. A fase de Griffiths é na verdade uma singularidade dentro da fase paramagnética, que pode ocorrer devido aos efeitos do campo aleatório no composto de $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ [14]. Sendo assim, os resultados da referência em questão mostram que a aplicação do campo aleatório é a responsável pelo aparecimento do máximo em χ_3 , bem como que há transição de fase VS/PM neste tipo de sistema [14]. Análise similar pode ser encontrada na referência [17], em que o modelo de cluster vidro de spin foi utilizado na descrição do composto $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$. Neste, não somente a susceptibilidade magnética não linear foi analisada, mas também o calor específico [10].

No trabalho da referência [16], foi utilizado o modelo de vidro de spin fermiônico. No formalismo fermiônico, os spins são descritos como operadores fermiônicos. Nesse caso, o modelo prevê quatro estados distintos por sítio, dois não magnéticos $|00\rangle$ e $|\uparrow\downarrow\rangle$ e dois estados magnéticos $|\uparrow 0\rangle$, $|0 \downarrow\rangle$ [18]. A referência [16] utilizou o modelo fermiônico com campo aleatório longitudinal (com largura de distribuição de campos aleatórios Δ) e campo transversal Γ (com $\Gamma = \Gamma(B_x)$ representando alguma função monotonicamente crescente de B_x). O eixo z é o eixo com o qual os spins estão alinhados paralelamente. Desta forma, o campo magnético transversal e longitudinal são aplicados, perpendicular e paralelamente ao eixo z , respectivamente. Nos resultados da referência [16], duas situações foram analisadas: (i) o campo transversal Γ e o campo aleatório Δ são termos independentes; (ii) ambos estão relacionados por meio de uma dependência imposta na forma $\Delta = \Delta(\Gamma)$. Particularmente, somente a partir do caso (ii) os resultados teóricos

produzidos pelo modelo coincidiram qualitativamente com os resultados experimentais da susceptibilidade não linear obtidas para o composto de $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$. Assim como na referência [14], os resultados da referência [16] sugerem que a temperatura T^* associada ao máximo da susceptibilidade não linear, não assinala uma transição de fase, mas sim, efeitos de campos aleatórios dentro da fase paramagnética.

O uso da dependência na forma $\Delta = \Delta(\Gamma)$ na referência [16] produziu resultados teóricos satisfatórios quando comparados aos experimentais. No entanto, salienta-se que no caso da referência [16], a obtenção dos resultados envolvia a imposição de uma relação entre Δ e Γ , onde originalmente estes campos podem ser ajustados de forma independente do ponto de vista do modelo. Sendo assim, tal trabalho leva ao questionamento se existem outras formas de introdução de mecanismos de ajustes simultâneos de campos aleatórios e transversos a nível de modelo. Para procurar contornar o problema da imposição da relação entre Δ e Γ , uma possível abordagem teórica para o problema seria a utilização do Modelo Vidro de Spin de Ising Fermiônico com um termo de Campo Transverso Aleatório Γ_i , o qual segue uma distribuição de probabilidade, ao invés de um campo transversal fixo como o utilizado na referência [16].

Portanto, o propósito do presente trabalho é estudar a susceptibilidade magnética não linear χ_3 utilizando o modelo Vidro de Spin Ising Fermiônico na presença de campos transversos Γ_i e longitudinal h_i aleatórios. A abordagem teórica utilizada ainda conta com a introdução do parâmetro p , o qual é a fração de spins sob a influência do campo transversal Γ . De forma geral, para $p = 0,00$ os spins estão sob total influência do campo transversal Γ/J , sendo então considerado o limite quântico. Logo, os resultados obtidos para $p = 0,00$ podem ser comparados com os obtidos no trabalho da referência [16], onde o modelo fermiônico foi utilizado na análise da susceptibilidade magnética não linear entre outras grandezas físicas, correspondentes ao sistema de $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$. No caso em que $p = 1,00$, os spins estão sob a ausência de Γ/J . Desta forma, não há a presença de efeitos quânticos. Neste caso, os resultados obtidos podem ser comparados com os já obtidos no trabalho da referência [14], onde o modelo vidro de spin de Ising Sherrington-Kirkpatrick foi utilizado dentro de uma abordagem clássica. Sendo assim, a principal proposta do presente trabalho é analisar valores intermediários do parâmetro p , através do qual podemos transitar entre os limites quântico e clássico dos modelos teóricos utilizados nas referências [14] e [16].

A motivação desta abordagem se dá pela controvérsia ainda presente acerca da existência da transição vidro de spin em compostos derivados do LiHoF_4 . Nestes sistemas, o comportamento observado experimentalmente para χ_3 tem sido a fonte de conflitos entre resultados teóricos e experimentais, particularmente os resultados sem aplicação de campo transversal B_x são colocados lado a lado aos resultados obtidos a partir da aplicação de B_x [11–16]. Na ausência de campos transversos aplicados, há indicação clara da existência do ordenamento vidro de spin no sistema proposto [11]. Por outro lado, existem

resultados discordantes acerca da existência desse ordenamento a partir da aplicação de campo transversal B_x [12]. Esta controvérsia surge devido aos comportamentos distintos obtidos para χ_3 na presença e na ausência de B_x . Sugere-se que essa mudança no comportamento de χ_3 ocorra devido a indução de campos aleatórios por meio da aplicação de B_x no composto de $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ [16].

Nesse sentido, é esperado que a formulação fermiônica, em teoria de campo médio, possa trazer mais informações acerca da relação entre vidros de spin e desordem por campos aleatórios no sistema em questão. Particularmente, no presente trabalho, ocorrerá a introdução simultânea de aleatoriedade no campo e efeitos de natureza quântica por meio do campo transversal aleatório. Com isso, pode-se questionar se, dentro da abordagem proposta, características gerais relacionadas ao comportamento de χ_3 experimental podem ser obtidas.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Magnetismo em Sólidos

De forma geral, os sólidos apresentam duas formas distintas de magnetismo: as formas não interagente e interagente [2]. Estas formas estão relacionadas com o estado magnético macroscópico que o material apresenta. Porém, este estado macroscópico é um resultado do comportamento microscópico dos átomos que compõe este material, na presença ou não de um campo magnético. As características magnéticas de um material são resultantes de dois momentos dipolares magnéticos microscópicos distintos: orbital e de spin. É importante ressaltar que posteriormente, a discussão apresentada a partir deste momento será utilizada na caracterização do composto $LiHoF_4$.

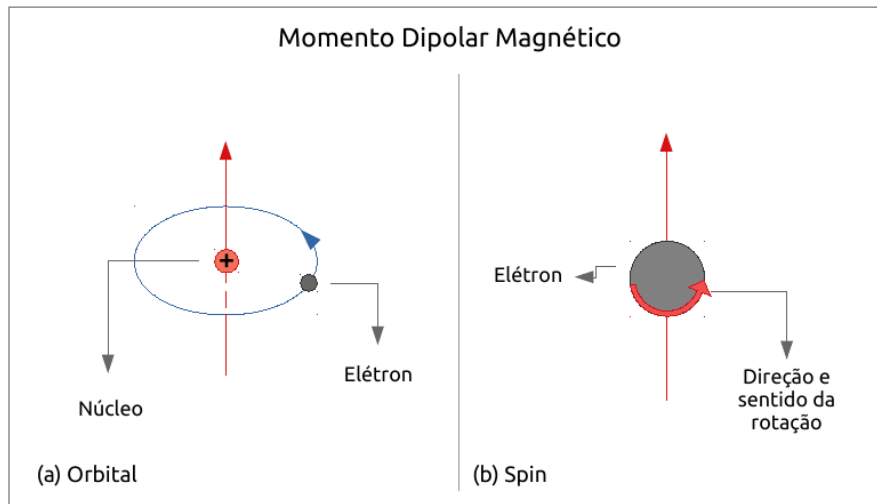


Figura 2.1 - Esquema ilustrativo dos momentos dipolares magnéticos (setas vermelhas) contidos no átomo. (a) Momento magnético orbital, relacionado ao movimento de translação do elétron ao redor do núcleo. (b) Momento magnético de spin, relacionado ao movimento de rotação do elétron. Fonte: Criação do autor.

O momento dipolar magnético orbital é relacionado ao movimento de translação dos elétrons ao redor do núcleo, como ilustrado na figura 2.1 (a). O momento magnético de uma carga eletrônica orbitando em uma trajetória circular de raio r é dado por:

$$\mu = \frac{-e}{2\pi r} \pi r^2. \quad (2.1)$$

Considerando $L_e = mvr$, o momento orbital do elétron, temos $\mu_{\vec{L}_e} = \frac{-e\hbar}{2m} \vec{L}_e$. Desta forma, o momento angular é quantizado em unidades de \hbar , tal que: $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$, e l é o número quântico orbital [2]. Salienta-se que a componente z do momento de

dipolo magnético orbital do elétron é dado por: $\mu_{Lz} = \frac{-e\hbar}{2m}m_l$.

O momento dipolar magnético de spin está relacionado ao movimento de rotação dos elétrons, ilustrado na figura 2.1 (b). O momento angular de spin do elétron é dado por S_e . Logo, o momento magnético do spin é $\mu_S = -g_S \frac{\mu_B}{\hbar} S_e$. Neste caso, μ_B é o magneton de Bohr e g_S é o fator de giromagnético. Sendo assim, a componente z do momento magnético de spin é dada por $\mu_{Sz} = \pm \mu_B$, pois $S_e = \pm \frac{\hbar}{2}$.

O momento magnético total relacionado a um elétron é composto pela soma das componentes orbital e de spin:

$$\vec{\mu}_e = \frac{-\mu_B}{\hbar} \vec{L}_e + g_S \vec{S}_e. \quad (2.2)$$

Tratando-se do momento magnético atômico, devemos considerar um átomo com muitos elétrons. No esquema de acoplamento de Russel-Saunders, válido para interações spin-órbita fracas, os momentos magnéticos orbitais e de spins individuais somam-se vetorialmente gerando resultantes totais do momento angular $\vec{L} = \sum_i \vec{L}_i$ e momento de spin $\vec{S} = \sum_i \vec{S}_i$. Posteriormente, o momento magnético total atômico \vec{J} é dado pela soma dos momentos orbital e de spin totais, sendo assim: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. Devido ao princípio de exclusão de Pauli, o termo \vec{J} é referente aos níveis atômicos semi-preenchidos, estes são os responsáveis pelas propriedades magnéticas dos átomos, pois os níveis que estão totalmente preenchidos possuem momento magnético orbital e de spin nulos [2]. Os elétrons são divididos nos níveis atômicos através da regra de Hund [2]. Quando um campo externo é aplicado sob algum material, este faz com que os momentos magnéticos atômicos sejam polarizados, permanentemente ou não, de forma induzida. Sendo assim, essa indução pode modificar as características magnéticas do material [2]. Contudo, é importante e conveniente que tenha-se grandezas físicas que descrevam a interação do campo magnético externo aplicado \vec{B} com o material, a fim de que se possa verificar o resultado gerado no material a partir da aplicação do campo externo, o qual é descrito por:

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} + \mu_0 \vec{M}. \quad (2.3)$$

Na equação acima a permeabilidade magnética no vácuo é dada por μ_0 , \vec{H} é o vetor intensidade do campo magnético, associado a fontes externas ao material e \vec{M} é o vetor magnetização, associada a magnetização interna do material [2]. A magnetização \vec{M} é conhecida como a resposta do material a um campo magnético externo \vec{H} , a função resposta é dada pela susceptibilidade magnética χ , de forma que:

$$\vec{M} = \chi \vec{H}. \quad (2.4)$$

A susceptibilidade magnética χ é uma variável sem dimensões, e é alterada de

um material para outro. Como podemos observar na equação 2.4, a magnetização é proporcional ao \vec{H} , de modo que o quociente entre \vec{M} e \vec{H} gera um escalar, χ . Os sistemas interagentes possuem uma magnetização espontânea abaixo de uma certa temperatura crítica (T_f). Neste caso, tem-se uma magnetização não nula para $T < T_f$ mesmo quando não há campo magnético externo aplicado. Todos estes sistemas possuem uma temperatura crítica de transição. Nestes, ocorre um fenômeno de transição de fase magnética, o qual na maioria das vezes é assinalado por um comportamento atípico na susceptibilidade magnética [2]. Essas fases magnéticas ou ordenamentos magnéticos são denominados de acordo com as características magnéticas macroscópicas e microscópicas dos materiais [2]. Um ordenamento magnético que se destaca através das suas particularidades é o vidro de spin [1, 2]. Este ordenamento possui uma desordem congelada para temperaturas menores que a temperatura de transição de fase. O ordenamento vidro de spin é caracterizado por um máximo agudo (pico) na susceptibilidade magnética linear e uma divergência na susceptibilidade magnética não linear [1, 2], assim como uma magnetização remanente para $T < T_f$. Tais características podem ser explicadas através da presença de aleatoriedade nas interações de spins e da frustração em sistemas vidro de spin [1, 2].

2.2 Ordenamento Magnético Vidro de Spin

O ordenamento magnético Vidro de Spin (VS) é uma fase ou estado magnético no qual os momentos magnéticos do material, abaixo da temperatura de transição de fase (T_f), encontram-se em uma desordem congelada. Este tipo de comportamento não é uma característica comum observada em sistemas magnéticos. Os primeiros sistemas a serem estudados que apresentaram a fase VS, foram ligas de metais nobres (ouro, prata, etc.) com impurezas vindas de metais de transição (ferro, cobre, etc.), em meados da década de 70 [1, 7, 8, 20]. Nestes sistemas os momentos magnéticos das impurezas produzem no material uma polarização magnética dos elétrons de condução dos metais nobres ao seu redor. Essa polarização será maior em uma direção do que em outras. Desta forma, os momentos magnéticos dos outros átomos de impurezas sentem o campo magnético local produzido pelos elétrons polarizados e tentam se alinhar ao longo deles, gerando assim uma interação de troca indireta entre os átomos de impurezas contidos neste sistema. Tal interação indireta é chamada de RKKY (Ruderman e Kittler (1954), Kasuya (1956) e Yosida (1957)) [1, 3, 4]. Esta interação oscila fortemente com a distância entre os spins, por um fator $1/R^3$, e R é a distância entre os spins. Como as distâncias entre os spins são aleatórias, já que a substituição dos átomos de metais nobres pelos de metais de transição ocorre de forma aleatória, algumas interações entre spins serão positivas favorecendo um alinhamento paralelo entre os spins ($\uparrow\uparrow$ ou $\downarrow\downarrow$). Porém outras interações serão negativas, favorecendo interações antiparalelas ($\uparrow\downarrow$ ou $\downarrow\uparrow$). Por este motivo não é possível encontrar

um alinhamento para spins que satisfaça todas as interações de troca vizinhas, gerando assim um sistema frustrado [1,3].

De maneira geral, são necessários dois componentes para que a fase vidro de spin ocorra: **1.** Frustração, que é a competição entre as interações de spin, como ilustrado na figura 2.2. Tal mecanismo resulta de um spin que é frustrado, não satisfaz nenhuma das possíveis interações vizinhas. Na figura 2.2, o esquema mostra a frustração devido a fixação de um número ímpar de interações em uma rede quadrada. Nesta rede, temos um total de quatro interações. Ao fixarmos três interações como antiferromagnéticas (AF) e uma como ferromagnética (FM), estamos frustrando um dos spins. Devido a fixação das interações, o spin frustrado deveria satisfazer ambas interações AF e FM com os vizinhos, o que não ocorre. Por este motivo, o spin fica em uma posição aleatória estática, a qual não é paralela e nem antiparalela aos vizinhos causando assim uma desordem congelada, característica dos sistemas vidro de spin. **2.** Interações Aleatórias: as interações entre os spins devem se dar de forma aleatória. Logo, nenhuma das interações, por exemplo AF ou FM, devem ser favorecidas. Este tipo de sistema apresenta grande complexidade, devido a frustração e a aleatoriedade nas interações [1,4]. Por este motivo, ele é objeto de inúmeros estudos tanto experimentais quanto teóricos [1].

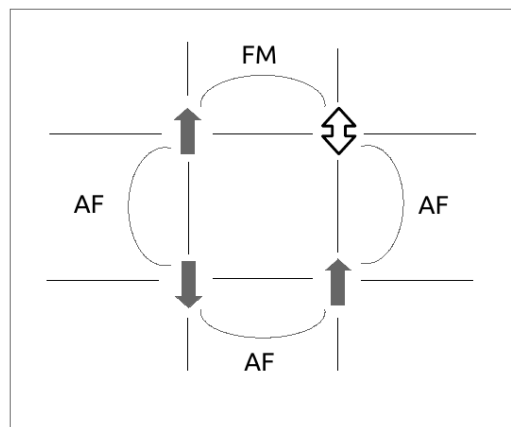


Figura 2.2 - Esquema ilustrativo de uma rede quadrada frustrada devido a fixação de um número ímpar de interações.

Fonte: Criação do autor, baseada em [19, p. 456].

Em um primeiro momento, pensou-se que apenas as ligas de metais nobres com impurezas de metais de transição, apresentassem a fase VS [1,3,4]. Neste tipo de sistema, temos as interações aleatórias que ocorrem através da colocação das impurezas e competição entre as interações através da polarização dos elétrons do metal nobre. Portanto, observam-se os dois componentes necessários para a ocorrência da fase vidro de spin. Posteriormente com uma gama maior de experimentos realizados, a fase VS foi observada

em diversos outros sistemas. Desta forma, a razão pela qual a frustração e as interações aleatórias ocorrem, variam de sistema para sistema [1]. Sabe-se então quais são os requisitos necessários para um sistema apresentar uma fase vidro de spin. Consequentemente, os mecanismos pelos quais possamos identificar a presença desta fase foram investigados. A desordem congelada apresentada pelos VS indica que este sistema possui um estado em que a magnetização espontânea local é diferente de zero, $m_i = \langle S_i \rangle$, i é um sítio (local) e $\langle S_i \rangle$ é a média convencional da magnetização, embora a magnetização global seja nula [1]. Experimentalmente, a magnetização espontânea local é vista através da diminuição do valor da susceptibilidade magnética. Neste caso, há uma redução intensa da susceptibilidade magnética, onde o máximo acentuado (pico) indica uma transição de fase de segunda ordem, da fase PM para uma VS. Esse comportamento ocorre tanto para os sistemas VS quanto para os AF [1]. A conexão entre a susceptibilidade e os momentos congelados da fase vidro de spin pode ser esclarecida considerando um sistema de spin de Ising, que assume valores $S_i = \pm 1$, e a susceptibilidade de um único sítio - χ_{ii} é definida como a magnetização - m_i induzida em um único sítio (i) por um campo externo ($B_i = \frac{-h_i}{g\mu_B}$) aplicado apenas em i . Logo, teremos que:

$$\chi_{ii} = \frac{\partial m_i}{\partial h_i}. \quad (2.5)$$

Na mecânica estatística clássica, o valor em equilíbrio de qualquer grandeza termodinâmica variável é relacionada com a quantidade média da variável induzida por um campo conjugado [1]. Para os sistemas VS,

$$T \chi_{ii} = \langle (S_i - \langle S_i \rangle)^2 \rangle = 1 - m_i^2. \quad (2.6)$$

No caso acima, temos que $S_i^2 = 1$. A soma total dos χ_{ii} de todos os sítios dividida pelo número total de sítios do sistema resulta em uma susceptibilidade magnética média local (χ_{loc}) [1], que será:

$$\chi_{loc} = \frac{1}{N} \sum_i \chi_{ii} = \frac{1 - N^{-1} \sum_i m_i^2}{T}. \quad (2.7)$$

Logo, a redução da susceptibilidade local média característica dos momentos livres da Lei Curie é uma medida direta da magnetização espontânea local quadrada média no estado congelado [1]. Porém, experimentalmente χ_{loc} não é medida, o que é medido é a susceptibilidade uniforme (χ) mostrada na figura 2.3 e é dada por:

$$\chi = \frac{1}{N} \sum_{ij} \chi_{ij} = \frac{1}{N} \sum_i \frac{\partial m_i}{\partial h_i}. \quad (2.8)$$

De forma geral, χ apresentará um pico, caso χ_{loc} tenha um pico. Isso indica experimen-

talmente uma magnetização espontânea diferente de zero e congelada, o que é uma das características da fase vidro de spin [1].

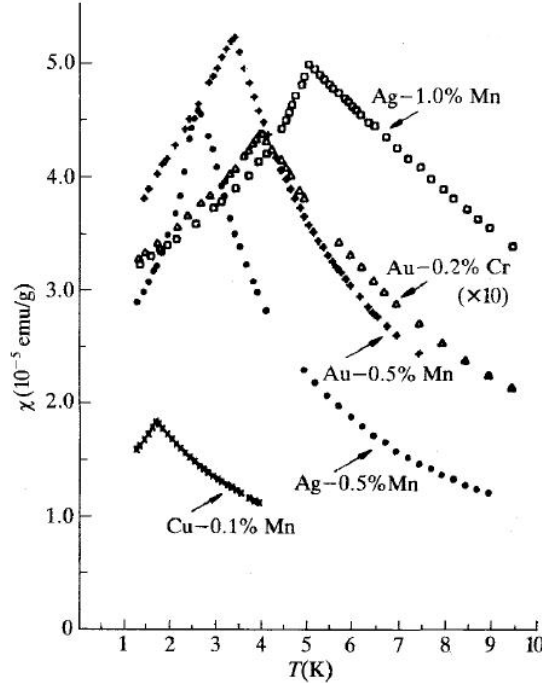


Figura 2.3 - Susceptibilidade magnética *vs* T para: *Cu* – 0,1%*Mn*(x), *Ag* – 0,5%*Mn*(●), *Au* – 0,5%*Mn*(+), *Au* – 0,2%*Cr*(△) e *Ag* – 1,0%*Mn*(□) para um campo magnético $H = 20$ Oe e 100 Hz. Fonte: Figura retirada de [1, p. 4], adaptada de [7, 20].

A temperatura de transição de fase T_f , a qual determina o congelamento dos momentos magnéticos, é definida pelo máximo agudo (pico) em χ . Na figura 2.3 pode-se observar a susceptibilidade magnética, para vários sistemas distintos. O pico em χ indica uma transição de fase VS para cada um dos sistemas contidos na figura 2.3 [1, 7, 20].

Contudo, alguns estudos distinguem as partes real e imaginária da susceptibilidade magnética, afim de analisar de forma detalhada possíveis dependências da susceptibilidade com o tempo do experimento, temperatura e frequência do campo magnético aplicado [1, 21]. Então, a susceptibilidade mostrada na figura 2.3, pode ser dividida em duas contribuições distintas: parte real χ' , conhecida como componente em fase de χ , e a parte imaginária χ'' , componente fora de fase de χ . Desta forma, a susceptibilidade é uma variável complexa, sendo uma função da frequência do campo magnético aplicado e da temperatura, desta forma temos que:

$$\chi(\omega, T) = \chi'(\omega, T) + i\chi''(\omega, T). \quad (2.9)$$

Na referência [21], diversos arranjos experimentais foram realizados para que fosse possível a obtenção experimental das susceptibilidade χ' e χ'' . Como resultado, foi observado que a contribuição de χ'' para χ é cerca de dez vezes menor que a contribuição de χ' [1, 20, 21]. Desta forma, a parte real da susceptibilidade equivale a susceptibilidade AC (corrente alternada, campo magnético alternado). Foi mostrado também na referência [21] que o pico da susceptibilidade χ' possui uma dependência com a frequência do campo magnético aplicado, como pode-se observar na janela e na figura 2.4, onde o pico de χ' não é totalmente nítido. Neste caso, a T_f verdadeira é definida pelo limite da frequência quando esta desaparece. Pode-se observar na figura 2.4, para cada frequência de campo magnético aplicado, que o máximo em χ' possui uma intensidade [1, 21]. Quanto menor a frequência maior é a intensidade de χ' e mais próximo da verdadeira T_f estaremos [1, 21].

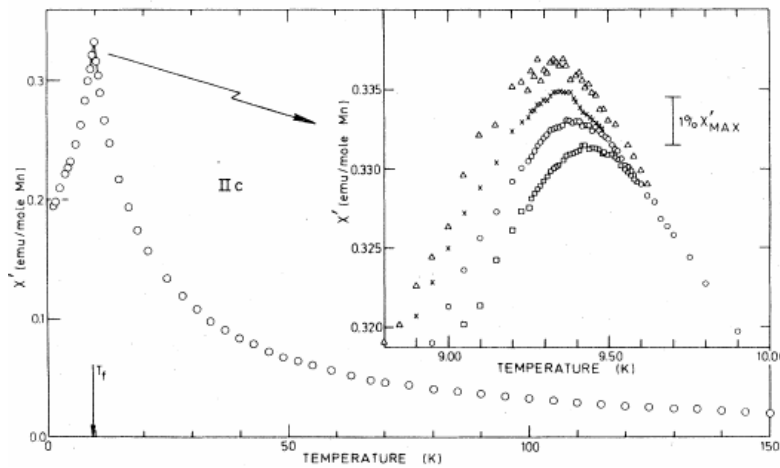


Figura 2.4 - Parte real da susceptibilidade $\chi(\omega)$ - χ' em função da temperatura para $Cu - 0,9\%Mn$. Na janela a direita observa-se o máximo de forma detalhada, onde cada máximo corresponde a uma determinada frequência do campo magnético externo, as frequências são de: 1,33 kHz (\square), 234 Hz (\circ), 10,4 Hz (\times), e 2,6 Hz (\triangle).

Fonte: Figura retirada de [21, p. 23].

Sendo assim, através da equação 2.9 e dos experimentos realizados na referência [21] como o da figura 2.4, uma descrição teórica para as susceptibilidade χ' e χ'' pode ser realizada. Para frequências como as mostradas na figura 2.4, o experimento consiste em dinâmicas lentas, nas quais o tempo de relaxação, de grandezas como a magnetização, é maior que o tempo da realização do experimento. Neste caso, pode-se considerar que abaixo de $T_f(\omega)$ a parte real $\chi'(\omega)$ varia de forma aproximadamente logarítmica com a frequência [1, 21], então:

$$\chi'(\omega) = \chi_0 + a \ln \frac{1}{|\omega|}. \quad (2.10)$$

Esta consideração é baseada nas relações de Kramers-Kronig, a qual estabelece uma relação entre as partes real e imaginária de uma grandeza física que depende da frequência. Desta forma, para a descrição de $\chi(\omega, T)$, implica-se que χ'' seja aproximadamente independente da frequência [1], mas mensurável:

$$\chi'' = \frac{\pi a}{2} \operatorname{sgn} \omega. \quad (2.11)$$

Na equação acima sgn representa a função sinal. A dependência logarítmica não é a única que satisfaz o comportamento de χ' , porém é um bom ajuste, considerando a equação 2.9 e a figura 2.4. Para frequências muito mais baixas que as da figura 2.4, onde o tempo de relaxação equivale ao tempo utilizado no experimento, a dependência de χ' com a frequência parece desaparecer, o que indica que o equilíbrio no limite de $\chi(0)$ foi atingido. Neste caso, quando a frequência é desprezada teremos uma susceptibilidade magnética estática, a qual é dada pela equação 2.9 para o caso em que $\omega = 0$. A susceptibilidade magnética estática pode ser observada na figura 2.5 [1]. Já para frequências altas $\omega \gg 0$, a dependência com a frequência também é dada pela equação 2.9. A relação entre a susceptibilidade magnética e a frequência do campo magnético aplicado, bem como a relação entre o tempo de relaxação e tempo de realização do experimento são características exclusivas dos vidros de spin, já que sistemas magnéticos convencionais não apresentam este tipo de dependência com a frequência e com o tempo de relaxação simultaneamente [1, 21].

A remanência para $T < T_f$ é também uma característica presente nos sistemas VS. Na figura 2.5, encontra-se a susceptibilidade magnética estática, também conhecida como susceptibilidade DC (corrente contínua, campo magnético constante), para dois sistemas de CuMn os quais possuem concentrações distintas de Mn. Essa grandeza é descrita teoricamente a partir da equação 2.9 para $\omega = 0$, e é a soma das partes real e imaginária da susceptibilidade magnética. Em campos externos pequenos ($0,05 \text{ Oe} \leq H \leq 5,90 \text{ Oe}$), o comportamento de χ_{DC} depende da maneira como o experimento é realizado. Desta forma, χ_{DC} é mais intensa (maior) e aproximadamente independente da temperatura para $T < T_f$, com a utilização do protocolo FC (*'field cooling'*), o qual é descrito pelas curvas (a) e (c) da figura 2.5 [1, 22]. Neste protocolo, o campo magnético externo é aplicado antes do início do processo de resfriamento, no momento em que o sistema encontra-se em uma temperatura $T > T_f$. Desta forma, a amostra é resfriada na presença de um campo magnético externo até que $T < T_f$. Esse tipo de medida, para uma aproximação, mostra-se reversível. O que significa que a temperatura pode ser variada sem que as curvas (a) e (c) da figura 2.5 apresentem qualquer mudança [1, 22]. Já com a utilização do protocolo ZFC (*'zero field cooling'*), descrito pelas curvas (b) e (d) da figura 2.5, a amostra é resfriada até $T < T_f$ sem aplicação de campo magnético externo.

Depois, abaixo de T_f o campo magnético externo é aplicado, resultando em um salto em χ_{DC} (ou χ_{zfc}) para um valor finito, seguido de um crescimento até T_f . Essa característica é irreversível já que ao variar a temperatura novamente, teremos novas curvas no lugar das curvas (b) e (d) da figura 2.5. Importante ressaltar, que caso o campo externo seja desligado χ_{zfc} decai muito lentamente [1, 22]. As características observadas em χ_{DC} e χ_{AC} , discutidas até aqui, surgem devido a existência de inúmeras configurações de spins aproximadamente equivalentes. Portanto, o estado que será obtido dependerá de forma crucial do tipo de protocolo adotado para a realização do experimento, FC ou ZFC [1, 22].

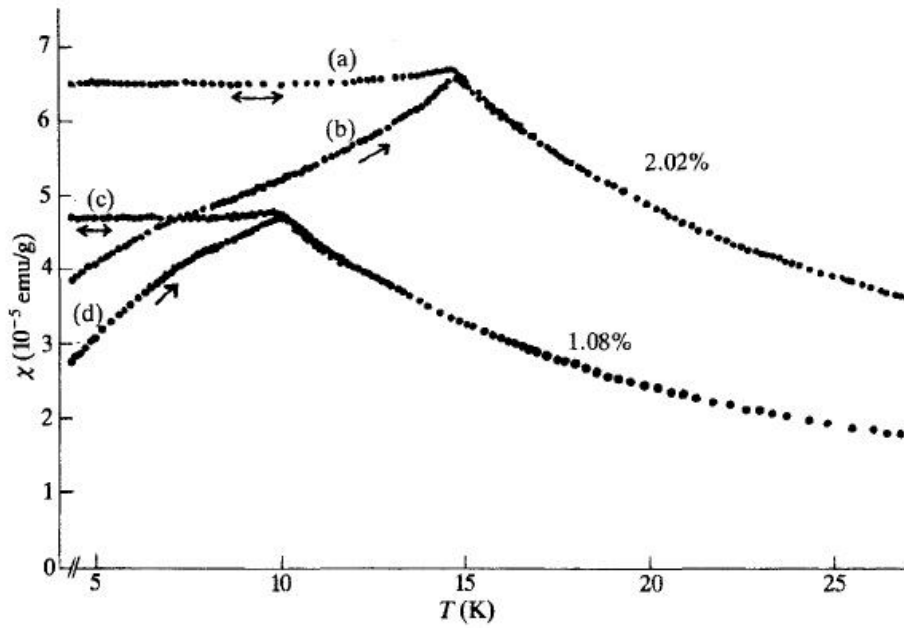


Figura 2.5 - Susceptibilidade magnética estática *vs* temperatura de CuMn para concentrações de 1,08% e 2,02% de Mn. Após o resfriamento a campo nulo ($H < 0,005$ Oe), as susceptibilidades iniciais (b) e (d) foram obtidas a partir do aumento da temperatura em um campo de $H = 5,90$ Oe. No caso das susceptibilidades (a) e (b) o campo de $H = 5,90$ Oe foi aplicado para uma temperatura maior que T_f e a amostra foi resfriada na presença deste campo.

Fonte: Figura retirada de [22, p. 19].

Outro comportamento observado nos sistemas VS é que o quadrado das correlações de spin ($\langle S_i S_j \rangle$) adquire um comportamento de longo alcance, gerando uma susceptibilidade divergente na temperatura de transição de fase. Este fenômeno é similar ao que ocorre com a susceptibilidade magnética de sistemas FM na temperatura de Curie. Essa susceptibilidade divergente dos vidros de spin é conhecida como χ_{vs} , que é dada por:

$$\chi_{vs} = \frac{1}{N} \sum_{ij} \chi_{ij}^2 = \frac{\bar{\beta}^2}{N} \sum_{ij} \langle S_i S_j \rangle^2, \quad (2.12)$$

para $T > T_f$ e $\bar{\beta} = \frac{1}{T}$. Na equação acima χ_{ij} é escrita em uma forma geral da equação 2.6, de forma que:

$$\chi_{ij} = \frac{\partial m_i}{\partial h_j} = \bar{\beta} \langle (S_i - \langle S_i \rangle)(S_j - \langle S_j \rangle) \rangle. \quad (2.13)$$

A susceptibilidade χ_{vs} é uma grandeza que pode ser medida, porém não diretamente. Utilizando da expansão da magnetização, que é dada por:

$$m = \chi_1 h - \chi_3 h^3 + \dots, \quad (2.14)$$

obtem-se as susceptibilidades magnéticas linear e não linear, χ_1 e χ_3 , respectivamente [1]. A susceptibilidade VS pode ser medida através da seguinte relação com χ_3 :

$$\chi_3 = \bar{\beta} \left(\chi_{vs} - \frac{2}{3} \bar{\beta}^2 \right). \quad (2.15)$$

A característica de divergência encontrada em χ_3 na temperatura de transição de fase, assim como o pico de χ_1 em T_f possibilitam o encaixe das transições de fase VS dentro da área teórica de transições de fase de segunda ordem, esse tipo de transição é caracterizado por expoentes críticos [1].

Até o presente momento vimos quais os comportamentos de grandezas físicas, como susceptibilidade AC e DC, remanência, etc., caracterizam a fase vidro de spin. Vimos também alguns sistemas como AuFr, CuMn que apresentam esta fase, porém muitos outros sistemas apresentam tal fase, como é o caso do composto de $LiHo_xY_{1-x}F_4$. Este composto apresenta comportamentos intrigantes, os quais serão discutidos com maior atenção na próxima seção.

2.3 Vidro de Spin e o Composto de $LiHoF_4$

A fase vidro de spin surge em alguns materiais quando estes estão sob condições específicas. Isso ocorre com o composto de $LiHoF_4$ (Li - lítio, Ho - hólmio, F - flúor). Este composto pode sofrer diluições originando compostos do tipo $LiHo_xY_{1-x}F_4$, a partir da substituição dos íons Ho^{3+} (magnéticos) pelos de Y^{3+} (Y - ítrio, não magnéticos) outras fases diferentes das apresentadas pelo composto original, $LiHoF_4$, podem ser encontradas. No caso específico deste trabalho, tais diluições são consideradas magnéticas, já que estamos interessados nas implicações magnéticas que a substituição dos íons Ho^{3+} pelos de Y^{3+} geram no sistema. A partir das diferentes diluições - x o composto $LiHo_xY_{1-x}F_4$, pode apresentar uma fase ferromagnética (FM), vidro de spin (VS) ou mesmo uma fase antividro (AV) [12, 13].

O $LiHoF_4$ é um composto de terras raras isolante, o qual possui uma estrutura cristalina tetragonal, que pode ser vista na figura 2.6 (a) [12, 13]. Neste composto os íons Ho^{3+} são substituídos aleatoriamente por íons de Y^{3+} , durante o crescimento do

crystal gerando o composto $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$, esta mudança não altera a estrutura cristalina do material. Na figura 2.6 (a) a ilustração das vias de super-troca podem ser vistas, estas são as linhas que conectam os íons de Ho^{3+} centrais com os íons de F vizinhos, e depois estes com outros íons de Ho^{3+} próximos [12, 13]. Nas interações de super-troca os elétrons de um íon magnético (Ho^{3+}) interagem com os elétrons de outro íon magnético (Ho^{3+}) por meio de um elétron covalente de um ânion intermediário, que neste caso são os íons de Y^{3+} .

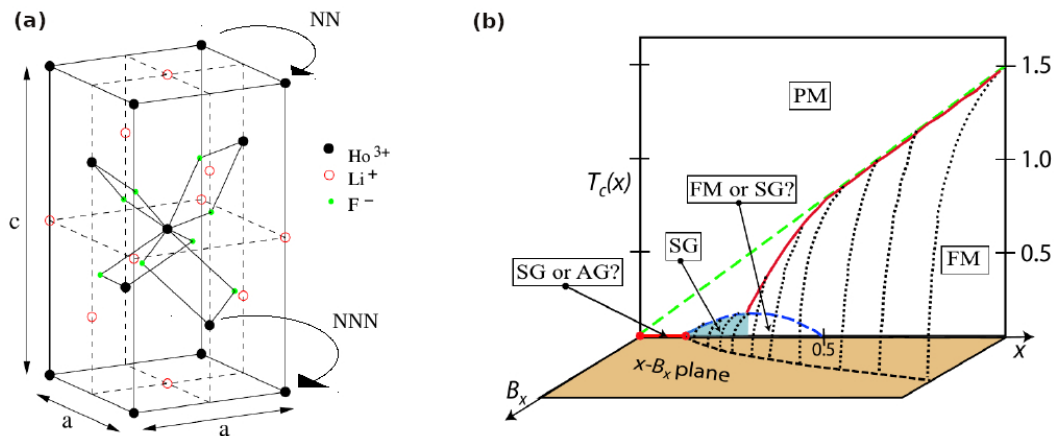


Figura 2.6 - (a) Estrutura cristalina tetragonal do composto LiHoF_4 . Tem-se um espaçamento de treliça $a = 5,177 \text{ \AA}$ e $c = 10,75 \text{ \AA}$. As linhas sólidas representam as vias de super-troca entre os íons de Ho^{3+} magnéticos (círculos pretos), mediadas via flúor - F (círculos verdes). (b) Diagrama de fases esquemático da temperatura (T) - diluição (x) - campo transverso grande (B_x). A diluição é realizada através da substituição aleatória de íons de Ho^{3+} magnéticos por íons de Y^{3+} não magnéticos, tal substituição mantém a estrutura cristalina inalterada. No diagrama as siglas representam: PM - fase paramagnética, SG - fase vidro de spin e FM- fase ferromagnética, e *FM or SG* é a indicação de uma fase "ferroglass".

Fonte: Figura adaptada de [13, p. 2].

O composto de LiHoF_4 é um sistema ferromagnético de Ising Dipolar, o qual possui um momento magnético de $\sim 7\mu_B$ por íon de Ho^{3+} e uma temperatura crítica de transição de $T_c = 1,53K$ [12, 13]. Medidas experimentais mostram que o tensor - g do composto LiHoF_4 é altamente anisotrópico [13]. Este tensor indica a simetria dos campos internos contidos em um sistema cristalino. Sendo assim, o tensor - g do composto LiHoF_4 ser altamente anisotrópico significa que tal tensor possui valores completamente distintos nas direções $y = x$ e z , eixos a e c da figura 2.6 (a). Isso implica que grandezas físicas terão comportamentos completamente distintos em cada uma das direções. Por exemplo, quando um campo magnético é aplicado sobre esse tipo de sistema os resultados do seu efeito serão diferentes nas direções y e z . Na figura 2.6 (b), pode-se observar um

diagrama de fases esquemático da temperatura (T) - diluição (x) - campo magnético transversal grande (B_x). A direção global de Ising no composto de LiHoF_4 está ao longo do eixo c (ver figura 2.6 (a)), desta forma um campo magnético transversal - B_x é aplicado perpendicularmente ao eixo c . No regime de diluição $x = 1,00$, o composto original LiHoF_4 , é um ferromagneto dipolar de Ising (FM) sendo um sistema bem descrito teoricamente pelo modelo de Ising Dipolar. Mesmo através da diluição a fase FM é encontrada para o intervalo de concentração $0,25 < x < 1,00$. Contudo, a partir do resfriamento no regime de concentração de $0,25 < x < 0,50$ os resultados experimentais indicam uma fase mista Ferrovidro (*ferroglass*). Para os regimes de concentração em que $x < 0,25$, uma fase VS é encontrada [12, 13].

Estes compostos são considerados excelentes para uma representação através do modelo de Ising Dipolar. O modelo de Ising Dipolar nada mais é do que o modelo de Ising usual, no qual um termo de interação entre os momentos magnéticos dos spins é adicionado. O Hamiltoniano total neste caso é dado por:

$$H_D = \sum_{i,j} \frac{\mu_0}{4\pi} g_{eff}^2 \mu_B^2 \left(\frac{r_{ij} - 3z_{ij}^2}{r_{ij}^5} \right) S_i^z S_j^z. \quad (2.16)$$

Na equação acima, S_i^z são os operadores de spins ($1/2$), o fator $g_{eff} = 2g_J \langle \uparrow | J^z | \uparrow \rangle$, μ_0 é o momento magnético de dipolo dos spins, e i e j são o par vizinho [12]. Sistemas como o $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ tem sido destaque nos últimos anos devido aos comportamentos observados em limites de diluição x pequeno. Estudos teóricos e experimentais ainda encontram-se em controvérsia a respeito de quais fases este sistema realmente apresentam no regime de baixo x , e quais os mecanismos que levam este sistema a apresentar tais comportamentos e fases [12, 13]. A estrutura cristalina do composto LiHoF_4 apresenta um campo cristalino com simetria S_4 em torno dos íons Ho^{3+} , levando a um duplete de estado fundamental de Ising. Devido ao campo cristalino, a única interação existente entre o íon central e os ligantes é de natureza eletrostática. Sendo assim, o Hamiltoniano deste sistema terá também um termo relacionado a este campo, dado por H_{CC} (Hamiltoniano do Campo Cristalino), que é descrito em termos dos operadores de Steven (ver referência [12] para mais informações), descrito como:

$$H_{CC} = \sum_{m,\alpha} B_m^\alpha O_m^\alpha. \quad (2.17)$$

Os íons de Ho no composto de $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ possuem spin $S = 2$ e o momento angular orbital $L = 6$, com momento angular total $J = 8$, segundo a regra de Hund. Com isso observa-se um acoplamento spin-órbita forte, comportamento este típico de terras raras. Os níveis $J = 8$ podem ser divididos em níveis de energia pelo campo elétrico cristalino de simetria S_4 . Na diluição, a frustração aleatória é proveniente da anisotropia

de interação dipolar. A interação dipolar é ferromagnética entre os vizinhos NN mais próximos, e antiferromagnética entre os vizinhos mais próximos NNN , como ilustra a figura 2.6. Como dito, este sistema é bem descrito por Ising Dipolar, o que se consiste na adição de um termo de interação dipolar ao modelo de Ising clássico. No entanto, como os elétrons da camada $4f$ dos íons de terras raras estão fortemente ligados, gerando uma relação de troca pequena. Portanto, quando combinada com grandes momentos magnéticos a interação dipolo-dipolo pode se tornar importante energeticamente. Como resultado, esta acaba sendo muitas vezes maior que a interação de troca entre spins, ou seja, a interação de dipolo é a dominante e o H total é praticamente o termo referente ao dipolo, H_D . A interação de dipolo é uma interação de longo alcance, caindo com $1/r^3$. Nesta interação cada spin é acoplado a todos os outros spins pelo menos em algum grau. O sinal da interação de dipolo depende do ângulo do vetor que conecta os spins, e isso acaba levando a um grau de frustração em 3 dimensões. No composto puro LiHoF_4 , temos apenas acoplamentos FM dominantes, e o material possui uma temperatura de transição FM de $1,53K$. Quando se faz a diluição aleatória com os íons de Y^{3+} não magnéticos obtendo o composto $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$, os vizinhos mais próximos (NN), mostrados na figura 2.6 exibem acoplamento FM e os vizinhos mais próximos (NNN) exibem acoplamento AFM, causando a frustração, que é o principal componente para a obtenção da fase VS, observada experimentalmente para $x = 0,25$ [12].

Outra contribuição para o Hamiltoniano deste sistema é a energia de Zeeman:

$$H_Z = g_J \mu_B \vec{H} \cdot \vec{J}. \quad (2.18)$$

A qual é resultante da aplicação de um campo magnético sobre o sistema. Quando um campo magnético transversal ao eixo c é aplicado efeitos de flutuações quânticas são induzidas. Diversos estudos buscam entender o efeito destas flutuações quânticas, e o Modelo de Ising com campo transversal tem sido extensivamente utilizado na busca deste entendimento, já que ele é um dos modelos onde transições de fase quânticas podem ser analisadas [14, 16]. Estas transições de fase quânticas ocorrem para temperatura nula [12, 13, 16, 23]. A última componente do Hamiltoniano deste sistema está relacionada ao acoplamento hiperfino com momento angular $I = 7/2$. O átomo do elemento hólmio possui uma interação hiperfina extraordinariamente grande dada por:

$$H_{HF} = A \vec{I} \cdot \vec{J}. \quad (2.19)$$

Neste caso $A = 40,21\text{mK}$ é o valor encontrado na literatura [12]. A interação hiperfina está relacionada com a interação do momento magnético do núcleo com o momento magnético dos elétrons, e resulta em um efeito de deslocamento nos níveis de energia atômicos. Em um caso perfeito do modelo de Ising, onde não são considerados os estados excitados

relacionados ao campo cristalino, isto leva a oito níveis distintos de energia eletrônica, separados por 207mK. Este efeito tem importância maior no composto $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$, para concentrações baixas $x < 0,25$. A interação hiperfina também tem consequências importantes perto da transição de fase quântica em amostras de concentrações mais altas, criando um diagrama de fases nada trivial [12, 13].

Contudo, outros efeitos como os relacionados a presença de um campo magnético transversal (B_x) aplicado podem ser observados em amostras de $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$. Sendo assim, termos de campo transversal podem ser adicionados no Hamiltoniano que descreve este sistema [13]. Nesse sentido, emprega-se o uso do modelo de Ising com campo transversal, com Hamiltoniano dado por:

$$H_{MICT} = \sum_{i>j} \Omega_{ij}^{zz} S_i^z S_j^z - \Gamma \sum_i \epsilon_i S_i^x. \quad (2.20)$$

Na equação acima Γ é o campo transversal efetivo, Ω_{ij}^{zz} acoplamentos aleatórios (termo de frustração), a variável Ω_{ij}^{zz} segue uma distribuição de probabilidade gaussiana. O termo ϵ_i está relacionado com a diluição em um determinado sítio i . Quando o sítio está ocupado por um íon magnético Ho^{3+} , $\epsilon_i = 1$ e quando o sítio é ocupado por um íon não magnético de Y^{3+} $\epsilon_i = 0$ [13]. De forma geral, a fase vidro de spin ocorre para baixas concentrações de Ho , e a sua presença é indicada pela divergência da susceptibilidade magnética não linear na temperatura de transição de fase T_f . Como vimos na seção 2.2, a divergência em χ_3 é uma das características que indicam a presença de VS. Porém, tal grandeza física apresenta comportamentos peculiares a partir da aplicação de um campo transversal B_x [23].

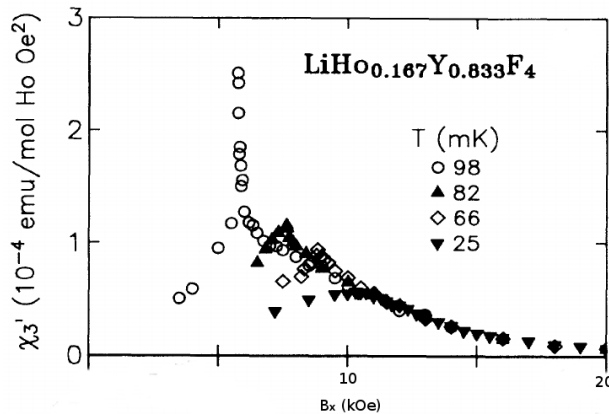


Figura 2.7 - Susceptibilidade magnética não linear - $\chi_3 \times B_x$ do composto $\text{LiHo}_{0.167}\text{Y}_{0.833}\text{F}_4$, para quatro temperaturas distintas. A temperatura de transição de fase VS é $T = 98$ mK.

Fonte: Figura retirada de [23, p. 1919].

Na figura 2.7, observa-se o comportamento experimental de χ_3 pelo campo transversal aplicado. Pode-se observar a divergência em χ_3 indicando uma transição de fase VS de segunda ordem, para uma temperatura de transição $T_f = 98$ mK, com B_x baixo. Porém, a divergência em χ_3 é substituída por um máximo arredondado com o aumento de B_x . Este máximo está localizado em uma temperatura T^* , que é menor que a temperatura de transição de fase T_f a baixo B_x . Sugere-se que este efeito surge devido ao campo transversal B_x que pode introduzir efeitos de aleatoriedade através da indução de campos aleatórios dentro do material [16]. Por exemplo, no composto original, puro, LiHoF_4 , devido às simetrias, a soma da rede h_i^z , associada aos campos aleatórios, desaparece. Por outro lado, no composto diluído $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$, a soma da rede h_i^z não desaparece, devido a existência de campos aleatórios internos correlacionados, os quais são induzidos pelos momentos magnéticos transversos [16]. Outro efeito que surge no composto $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ a partir do aumento de B_x é a diminuição da temperatura de transição de fase, até atingir um ponto crítico quântico (PCQ), quando há transição de fase a temperatura nula [23]. Este efeito pode ser observado na figura 2.8, onde temos o diagrama de fases do campo transversal Γ vs T para uma concentração de $x = 0,167$, composto $\text{LiHo}_{0,167}\text{Y}_{0,833}\text{F}_4$ [23].

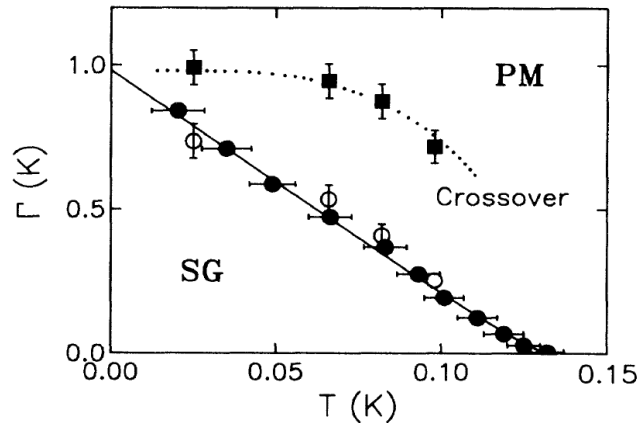


Figura 2.8 - Diagrama de fases do campo transversal Γ vs T para o composto $\text{LiHo}_{0,167}\text{Y}_{0,833}\text{F}_4$. SG: fase vidro de spin; PM: fase paramagnética. Círculos preenchidos seguem medidas dinâmicas, círculos abertos medidas a partir de χ_3 e quadrados estão relacionados com medidas de χ_1 ($f=1,5$ Hz). Fonte: Figura adaptada de [23, p. 1920].

Diversos trabalhos indicam que os fenômenos mostrados nas figuras 2.7 e 2.8 surgem através da introdução de flutuações quânticas e efeitos de aleatoriedade impulsionadas pelo campo transversal B_x [11–13, 16, 23]. As flutuações quânticas são causadas pela inversão dos momentos magnéticos do sistema, o que faz com que os estados quânticos puros se misturem, surgindo estados quânticos mistos. Desta forma, quando o campo magné-

tico é aplicado transversalmente ao acoplamento de Ising surgem termos não comutativos, devido a dinâmica quântica da mudança dos estados. Como consequência, flutuações de natureza quântica são introduzidas. Sendo assim, o modelo de Ising com campo transversal pode ser empregado para o tratamento teórico do composto de $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ [24]. Em relação a aleatoriedade e a sua relação com os fenômenos citados ainda não está clara. Sabe-se que sem a presença do campo transversal no composto $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$, a fase VS é encontrada, a qual é indicada pela divergência em χ_3 , o que sugere a ausência de campos aleatórios. Porém, quando o campo transversal é aplicado a divergência em χ_3 é substituída por um máximo arredondado. A sugestão para a ocorrência de tal fenômeno é que campos aleatórios sejam induzidos pelo B_x , gerando assim máximo arredondado em χ_3 [12, 13, 16].

2.4 Abordagem Teórica para a Fase Vidro de Spin

A seguir apresenta-se uma breve revisão acerca dos tratamentos teóricos empregados na descrição da fase vidro de spin. Começando com o Modelo de Ising original e sua abordagem clássica para o problema VS, até a utilização do Modelo de Ising em uma descrição quântica, na qual os spins são tratados como férmions.

2.4.1 Modelo de Ising

Como consequência da descoberta do ordenamento vidro de spin, houve grande interesse quanto ao seu tratamento, devido principalmente a complexidade associada a desordem e a aleatoriedade [1, 4]. Particularmente, no que diz respeito ao tratamento teórico destes sistemas, iniciaram-se buscas por modelos teóricos para a descrição de sistemas VS. De forma geral, Modelos de Ising [4] têm sido adotados por diversos teóricos para a descrição de sistemas magnéticos, sendo estes também adotados para discussão dos sistemas VS.

O modelo de Ising surgiu com o intuito de descrever propriedades físicas observadas macroscopicamente em sistemas ferromagnéticos através das interações microscópicas. O modelo possui uma formulação que permite investigar mecanismos gerais de mudança nos estados macroscópicos dos materiais magnéticos, sendo utilizado na descrição de sistemas com N spins interagentes. O Modelo de Ising é descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H = -J \sum_{ij} S_i S_j - h \sum_{i=1}^N S_i. \quad (2.21)$$

No Hamiltoniano, J é a interação de troca entre dois sítios vizinhos S_i e S_j mais próximos, os termos S_i e S_j assumem valores $+1$ ou -1 . O segundo termo é o de campo externo h que age sobre cada um dos sítios S_i . O spin de Ising no caso de um sistema magnético

indica se o momento magnético microscópico está direcionado para baixo (\downarrow) ou para cima (\uparrow). Os sítios i e j formam um par, para que o termo relacionado com a energia de interação entre esse par seja positivo, temos que $S_i \neq S_j$, já no caso em que $S_i = S_j$ o termo referente a energia de interação será negativo. Como o modelo de Ising possui uma característica binária ele pode ser utilizado nas mais diversas áreas (física, biologia, neurociência, economia, etc.) [4].

No caso do modelo de Ising para sistemas magnéticos, a magnetização surge como um parâmetro de ordem. O parâmetro de ordem é, de forma sucinta, uma grandeza física que contém, através de algumas relações, características do sistema, como por exemplo em qual fase este se encontra. No caso da magnetização ela é descrita por:

$$m = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i^N S_i \right\rangle = \frac{1}{N} Tr \left(\left(\sum_i S_i \right) P(S) \right). \quad (2.22)$$

Neste caso, $P(S)$ é a distribuição de probabilidade de Gibbs-Boltzmann:

$$P(S) = \frac{e^{-\bar{\beta}H}}{Z}. \quad (2.23)$$

De forma que, $\bar{\beta} = \frac{1}{T}$, Z é a função de partição dada por:

$$Z = Tre^{-\bar{\beta}H} \quad (2.24)$$

Neste caso, $e^{-\bar{\beta}H}$ é o fator de Boltzmann. Caso o sistema magnético contenha números iguais de $S_i = +1$ e $S_i = -1$, a magnetização total será nula como indica o somatório contido na equação 2.22. Para $\bar{\beta} \gg 1$, isto é em baixas temperaturas, a distribuição de Gibbs-Boltzmann aponta que os estados de menor energia possuem uma probabilidade maior de serem encontrados. Para $h = 0$ em baixa temperatura, o modelo magnético de Ising possui configurações de estado predominantes, $S_i = +1$ ou $S_i = -1$. Desta forma, a magnetização se aproxima de $+1$ ou -1 . Porém, com o aumento da temperatura, as configurações de estados variam, e S_i muda de $+1$ para -1 e vice e versa. Desta maneira, a magnetização (variável macroscópica) se torna extinta devido as anulações dos estados microscópicos que estão desordenados. No caso de um sistema FM, a magnetização é um parâmetro de ordem, e através de seu comportamento é possível analisar as transições de fase deste sistema. A transição de fase ocorre para uma determinada temperatura crítica de transição T_c ou como é mais conhecida temperatura de transição T_f . Neste caso para $m \neq 0$ temos a fase FM para $T < T_f$, porém quando $T > T_f$ a magnetização é nula indicando uma fase PM [4].

2.4.2 Teoria de Campo Médio e Modelo de Alcance Infinito

De forma geral, é possível calcular o valor esperado de qualquer grandeza física através da distribuição de Gibbs-Boltzmann, equação 2.23. Porém, este cálculo torna-se, muitas vezes difícil devido aos termos quadráticos que aparecem na equação 2.24 para a função de partição. Por este motivo é comum recorrer a algum método de aproximação como é o caso da Teoria de Campo Médio. Nesta abordagem, as flutuações das variáveis microscópicas em torno de seus valores médios são desconsideradas [4]. Desta forma, é realizado a introdução de uma variável de spin médio, onde a magnetização será dada por:

$$m = \frac{\sum_i \langle S_i \rangle}{N}. \quad (2.25)$$

Teremos um certo desvio relacionado com a magnetização dado por: $\delta S_i = S_i - m$, assume-se que o termo de segunda ordem em relação as flutuações δS_i é insignificante na energia de interação. Sendo assim o Hamiltoniano de Ising para um sistema magnético dentro da teoria de campo médio, será:

$$H = -J \sum_{ij} (m + \delta S_i)(m + \delta S_j) - h \sum_i S_i, \quad (2.26)$$

desta forma:

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_{ij} (m^2 + m\delta S_i + m\delta S_j + \delta S_i \delta S_j) - h \sum_i S_i \\ &\simeq -Jm^2 N_B - Jm \sum_{ij} (\delta S_i + \delta S_j) - h \sum_i S_i. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Nota-se que cada uma das ligações (ij) aparece uma vez na soma de $(\delta S_i + \delta S_j)$ na equação 2.27, assumindo que as ligações δS_i e δS_j estão em ambas, nas extremidades de uma ligação, as ligações podem ser somadas z vezes. O número z , é o número de ligações que saem de um determinado local (número de coordenação) [4]. Desta forma o Hamiltoniano passa a ser dado por:

$$\begin{aligned} H &= -Jm^2 N_B - Jmz \sum_i \delta S_i - h \sum_i S_i \\ &= Jm^2 N_B - (Jmz + h) \sum_i S_i. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Nas equações acima N_B é o número de elementos no conjunto B de ligações. O número de coordenação z é independente do local de i . O número de ligações e o número de coordenação estão relacionados por: $\frac{zN}{2} = N_B$. É necessário dividir zN por dois, porque caso contrário as ligações das extremidades seriam contadas duas vezes, uma em cada extremidade. Assume-se também que o valor de S_i é independente do local i e deve ser igual ao m . Com a utilização da Teoria de Campo Médio os efeitos das interações

do Hamiltoniano estão contidos de forma não explícita na magnetização m , o que facilita o tratamento analítico do problema. Sendo assim, a função de partição será dada por:

$$Z = Tr \exp \left[\bar{\beta} \left\{ -N_B J m^2 + (J m z + h) \sum_i S_i \right\} \right] \quad (2.29)$$

$$= \exp[-\bar{\beta} N_B J m^2] \{2 \cosh \bar{\beta}(J m z + h)\}^N.$$

A magnetização será:

$$m = \frac{Tr S e^{-\bar{\beta} H}}{Z} = \tanh \bar{\beta}(J m z + h), \quad (2.30)$$

A equação acima do parâmetro de ordem magnetização é uma equação de estado. A magnetização espontânea para $h = 0$, é obtida com a solução gráfica da equação 2.30, de modo que existe uma solução para $m = 0$ com $h = 0$, se e somente se, $\bar{\beta} J z > 1$, e $\bar{\beta} J z = \frac{J z}{T} = 1$. Desta forma a temperatura crítica de transição de fase será encontrada para $T_c = J z$ [4].

Outras grandezas físicas podem ser calculadas, como a susceptibilidade magnética e o calor específico através da teoria de campo médio. A teoria geral da mecânica estatística nos diz que a energia livre é proporcional ao $\ln Z$. Considerando que Z , dentro da teoria de campo médio, é dado pela equação 2.29, teremos a energia livre dada por:

$$F = -T \ln Z = -NT \ln [2 \cosh \bar{\beta}(J m z + h)] + N_B J m^2. \quad (2.31)$$

Para $h = 0$, a temperatura está próxima de T_f e a magnetização é próxima de zero. Utilizando a teoria de transições de fase de Landau, ou seja, expandindo o lado direito da equação 2.31 em uma série de Taylor (de potências) para o parâmetro de ordem (m), teremos:

$$F = -NT \ln 2 + \frac{J z N}{2} (1 - \bar{\beta} J z) m^2 + \frac{N}{12} (J z m)^4 \bar{\beta}^3. \quad (2.32)$$

Salienta-se que o coeficiente m^2 muda de sinal em T_f . Desta forma, os mínimos da energia livre estão localizados em $m = 0$ quando $T < T_f$ e em $m \neq 0$ se $T > T_f$. O valor médio de uma grandeza física na mecânica estatística, obtido a partir da distribuição de Gibbs-Boltzmann, é correspondente ao seu valor no estado mínimo da energia livre, o estado de equilíbrio térmico. Logo, a magnetização é nula no equilíbrio térmico quando $T > T_f$ e não desaparece para $T < T_f$ [4].

Pode-se considerar ainda o modelo de Ising com interações de alcance infinito. Neste modelo, todos os pares possíveis de sítios tem interações e são considerados, e o

Hamiltoniano é dado por:

$$H = \frac{-J}{2N} \sum_{i \neq j} S_i S_j - h \sum_i S_i. \quad (2.33)$$

Utilizando a teoria de campo médio, reescrevendo o primeiro somatório para um único sítio, teremos:

$$H = \frac{-J}{2N} \left[\left(\sum_i S_i \right)^2 - N \right] - h \sum_i S_i. \quad (2.34)$$

Desta forma, com a utilização do modelo de alcance infinito a função de partição será:

$$Z = Tr \exp \left[\frac{J\bar{\beta}}{2N} \left(\sum_i S_i \right)^2 - \frac{J\bar{\beta}}{2} + \bar{\beta}h \sum_i S_i \right]. \quad (2.35)$$

No limite termodinâmico em que $N \rightarrow \infty$, o termo $\frac{\bar{\beta}J}{2}$ é extremamente pequeno, podendo ser desconsiderado. Em particular, na equação 2.35 operações que devem ser feitas com o termo de somatório ao quadrado. Para obtenção da função é necessária a linearização do termo de somatório ao quadrado contido na equação 2.35. O método de linearização utilizado é a transformação de Hubbard-Stratonovich, para mais detalhes ver apêndice A. Desta forma, a função de partição resulta em:

$$Z = Tr \sqrt{\frac{\bar{\beta}JN}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[\frac{-N\bar{\beta}Jm^2}{2} + \bar{\beta}Jm \sum_i S_i + \bar{\beta}h \sum_i S_i \right] dm. \quad (2.36)$$

Utilizando o resultado encontrado na equação 2.29, a função de partição é descrita por:

$$Z = Tr \sqrt{\frac{\bar{\beta}JN}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ \frac{-N\bar{\beta}Jm^2}{2} + N \ln [2 \cosh \bar{\beta}(Jm + h)] \right\} dm. \quad (2.37)$$

A integral acima é resolvida pelo método *Steepest Descent* (ponto de sela), no limite termodinâmico em que $N \rightarrow \infty$. Particularmente, é necessário encontrar o ponto de m_0 onde a derivada da função que compõe o argumento da exponencial seja nula. Desta forma, o que queremos encontrar é o valor de m_0 para o qual a derivada da função $L(m)$, argumento da exponencial, seja igual a zero. Sendo assim, teremos:

$$L(m) = \frac{-\bar{\beta}Jm_0^2}{2} + \ln[2 \cosh \bar{\beta}(Jm_0 + h)]. \quad (2.38)$$

Derivando $L(m)$:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dm_0}L(m) &= \frac{d}{dm_0} \frac{-Jm_0^2}{2} + \ln[2 \cosh(Jm_0 + h)], \\ &= -Jm_0\bar{\beta} + J \tanh \bar{\beta}(Jm_0 + h)\bar{\beta} = 0.\end{aligned}\tag{2.39}$$

Então para que a derivada de $L(m)$ seja igual a zero, temos que:

$$m_0 = \tanh \bar{\beta}(Jm_0 + h).\tag{2.40}$$

Por comparação, percebe-se que os resultados para a magnetização são iguais dentro da teoria de campo médio equação 2.30 e do modelo de alcance infinito equação 2.40. No modelo de alcance infinito, o parâmetro m entra como um parâmetro auxiliar vindo da transformação de Hubbard-Stratonovich. Após a comparação deste com o parâmetro de ordem m da teoria de campo médio, observa-se que eles são a mesma quantidade. Portanto, o parâmetro auxiliar torna-se uma grandeza física. As flutuações magnéticas desaparecem no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$ no modelo de alcance infinito. Logo, a teoria de campo médio gera um resultado exato. A ideia até o momento foi explicar os aspectos teóricos matemáticos e termodinâmicos, assim como as ferramentas, utilizados no tratamento analítico do Modelo de Ising. Estas mesmas ferramentas foram utilizadas na década de 70, quando foi proposto um modelo vidro de spin de Ising para o tratamento do problema vidro de spin.

2.4.3 Modelo Vidro de Spin de Ising

Os primeiros trabalhos teóricos na descrição dos VS propunham um modelo de Ising com a introdução de aleatoriedade através da interação entre os sítios. Edwards e Anderson (EA) em fevereiro de 1975 [5], através da teoria de Curie-Weiss construíram uma abordagem onde os spins são tratados como dipolos magnéticos clássicos que apontam em uma direção s_i , e possuem uma energia de interação dada por: $J_{ij}s_i s_j$, J_{ij} é a variável de interação entre os sítios. Nesta abordagem, a demarcação da transição de fase é realizada através de um parâmetro de ordem q . Este parâmetro é dado por $q = \langle s_i^{(1)} \cdot s_i^{(2)} \rangle$, onde $q \neq 0$ em $T < T_f$, indicando a existência da fase vidro de spin. Para temperaturas maiores $T > T_f$, o parâmetro $q = 0$. Em particular, $q = 1$ em $T = 0$ e $q = 0$ para $T \geq T_f$.

Mais tarde, Sherrington e Kirkpatrick (SK) [6, 25] propuseram, dentro de uma teoria de campo médio, um modelo de alcance infinito definido pelo Hamiltoniano de Ising:

$$H = - \sum_{i < j} J_{ij} S_i S_j - h \sum_{i=1}^N S_i.\tag{2.41}$$

Neste caso, $S_i = \pm 1$ e J_{ij} é a variável aleatória de interação, a qual segue uma distribuição de probabilidade gaussiana dada por:

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{(J_{ij} - J_0)^2}{2J^2} \right\}. \quad (2.42)$$

A aleatoriedade nas interações foi introduzida com o objetivo de causar o efeito de desordem no sistema. O tratamento analítico completo e detalhado do modelo SK encontra-se no apêndice A. No tratamento analítico, salienta-se a necessidade de obtenção das médias configuracionais das grandezas físicas, como a energia livre, que é dada de forma geral por:

$$\langle \ln Z \rangle = -\bar{\beta} \langle f \rangle, \quad (2.43)$$

com $\langle \ln Z \rangle$ dado por:

$$\langle \ln Z \rangle = \int P(J_{ij}) dJ_{ij} \ln Z. \quad (2.44)$$

Contudo, verifica-se uma dificuldade no cálculo da média sobre $\ln Z$ devido a integral em J_{ij} [4]. Para contornar este problema, o método das réplicas é utilizado. Este método é um artifício matemático que permite a realização da integral sobre J_{ij} . No método das réplicas o $\langle \ln Z \rangle$ é escrito como:

$$\langle \ln Z \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\langle Z^n \rangle - 1}{n}.$$

De forma geral, para obter a energia livre, equação 2.45, foi utilizado no tratamento analítico do Hamiltoniano o método das réplicas e a transformação de Hubbard-Stratonovich para a linearização dos termos quadráticos:

$$-\bar{\beta} \langle f \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \left(\frac{-\bar{\beta}^2 J^2}{4n} \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{\bar{\beta} J_0}{2n} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + \frac{\bar{\beta}^2 J^2}{4} + \frac{\ln \text{Tr} e^L}{n} \right). \quad (2.45)$$

Na equação acima L é o Hamiltoniano efetivo dado por:

$$L = \beta^2 J^2 \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta} S^{\alpha} S^{\beta} + \beta \sum_{\alpha} (J_0 m_{\alpha} + h) S^{\alpha} \quad (2.46)$$

A partir da solução com simetria de réplicas (ver apêndice A para detalhes) que considera $m_{\alpha} = m$ e $q_{\alpha\beta} = q$ (para $\alpha \neq \beta$), extremizando a Energia Livre em relação a $q_{\alpha\beta}$ e m_{α} e abrindo o traço obtemos os parâmetros de ordem:

$$m = \int Dz \tanh \bar{\beta} \tilde{H}(z), \quad (2.47)$$

$$q = \int Dz \tanh^2 \bar{\beta} \tilde{H}(z), \quad (2.48)$$

com $\tilde{H}(z) = \bar{\beta}(J\sqrt{q})z + J_0M + h$. Neste caso, m é a magnetização do sistema e q é o parâmetro de ordem da fase VS. Quando $q \neq 0$ em $T < T_f$ o sistema apresenta uma fase VS, e para $T > T_f$ o parâmetro $q = 0$ [6, 25]. Destaca-se que o modelo SK conseguiu reproduzir alguns resultados experimentais, como o pico na susceptibilidade linear e diagramas de fases, com transições entre as fases vidro de spin, paramagnética e ferromagnética [6, 25].

Sherrington e Kirkpatrick, na resolução do modelo conforme discutido, utilizaram o método das réplicas com uma solução com simetria de réplicas. Tal método se mostrou válido reproduzindo resultados satisfatórios para o comportamento de certas grandezas físicas como as susceptibilidades magnéticas e apresentando boa demarcação nas transições de fase. Porém, problemas como valores negativos de entropia para baixas temperaturas surgiram. Como consequência, no ano de 1977 Almeida e Thouless analisaram a estabilidade da solução com simetria de réplicas proposta por Sherrington e Kirkpatrick [26]. Almeida e Thouless utilizaram um método de perturbação da energia livre do sistema, através do qual pequenas perturbações são feitas na solução com simetria de réplicas. Estas pequenas perturbações resultam em um Δ , e este parâmetro será o responsável por gerar os elementos da matriz Hessiana G . A matriz G é utilizada para verificar a estabilidade de soluções. Para que uma solução seja estável todos os autovalores da matriz Hessiana devem ser positivos. Contudo, Almeida e Thouless mostraram que a solução com simetria de réplicas não é estável dentro da fase vidro de spin, pois um dos três autovalores da matriz Hessiana possui valores negativos, no intervalo de temperatura correspondente a fase vidro de spin. No caso do modelo SK a instabilidade na solução com simetria de réplicas se dá pelo fato de valores negativos serem atribuídos ao autovalor $\lambda_3 = P - 2Q + R$ da matriz Hessiana, para certos valores de temperatura T . Por esta razão, o limite da estabilidade do modelo SK, através da utilização do método das réplicas, é demarcado pela linha de Almeida-Thouless λ_{AT} [1, 26], a qual é dada por:

$$\begin{aligned} (\bar{\beta}J)^{-2}\lambda_{AT} &= 1 - (\bar{\beta}J)^2(1 - 2q + r) \\ &= 1 - (\bar{\beta}J)^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dz e^{-\frac{z^2}{2}} \operatorname{sech}^4 \eta(z). \end{aligned} \quad (2.49)$$

Neste caso, $\eta(z) = \bar{\beta}(J\sqrt{q})z + J_0M + h$. Com isso, uma importante relação foi obtida entre a equação 2.49 e a susceptibilidade magnética vidro de spin. Dentro do modelo vidro de spin de Ising SK, em uma solução a partir da teoria de perturbação a susceptibilidade magnética vidro de spin [1], é dada por:

$$\chi_{vs} = \frac{\bar{\beta}^2 \int dz e^{-\frac{z^2}{2}} \operatorname{sech}^4 \eta(z)}{1 - (\bar{\beta}J)^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dz e^{-\frac{z^2}{2}} \operatorname{sech}^4 \eta(z)}. \quad (2.50)$$

Através das equações 2.49 e 2.50 pode-se observar que a susceptibilidade não linear é inversamente proporcional ao λ_{AT} [1]. Como foi visto anteriormente neste capítulo, na seção 2.2, as susceptibilidades magnéticas não linear e vidro de spin possuem uma relação dada pela equação 2.15, sendo assim a susceptibilidade não linear também é inversamente proporcional ao λ_{AT} [1].

Contudo, ao longo dos anos, diversos desafios até então desconhecidos surgiram na descrição VS como, por exemplo, na representação do calor específico [7–9]. Assim, novos modelos começaram a ser pensados e propostos para descrição destes sistemas. Por exemplo, Soukoulis e Levin [10] em 1978 propuseram um modelo clássico em que são considerados clusters dinâmicos como entidades básicas ao invés de sítios como no caso do Modelo SK. Em outro caso, o modelo Fermiônico de Vidro de Spin tem sido utilizado para descrever sistemas VS com diversos tipos de interações. Pode-se citar, por exemplo, o modelo vidro de spin Ising Fermiônico com formação de pares de Cooper, referente a um pareamento BCS (Bardeen, Cooper e Schrieffer) local, relacionando desta forma a fase de formação de pares de Cooper com uma fase supercondutora [27].

2.4.4 Modelo Vidro de Spin de Ising Fermiônico

Theumann e Gusmão em 1984 na referência [18], propuseram uma abordagem quântica do Modelo de Ising com interações aleatórias, onde os spins são descritos como operadores quânticos. Nessa aproximação, os parâmetros de ordem foram obtidos através da simetria de réplicas e aproximação estática. Neste modelo quântico, é obtida uma susceptibilidade estática χ_{est} , a qual surge como um parâmetro de ordem independente. Em particular, a formulação associada ao modelo permite adição de diversos tipos de acoplamentos, que usualmente não são possíveis dentro de abordagens clássicas. Como consequência, diferentes efeitos e propriedades físicas podem ser analisados nesta formulação. Exemplos desta ampla abordagem são destacados a seguir: (i) análises dos efeitos do potencial químico [28]; (ii) competição entre as fases vidro de spin e de formação de pares de Cooper (referente a fase supercondutora) [27, 29, 30]; (iii) análise de sistemas com adição de campo transversal [24].

O Modelo Vidro de Spin de Ising Fermiônico é tratado dentro da formulação da segunda quantização (anexo A), no espaço dos estados coerentes (anexo A.1.2). Como as partículas neste modelo são férmions, o tratamento analítico segue dentro do espaço dos estados coerentes para férmions (anexo A.1.4), onde se faz necessário o uso da Álgebra de Grassman (anexo A.1.3) para lidar com a anticomutação dos operadores, bem como formalismo das integrais funcionais (anexo A.1.6). A obtenção da função de partição da equação 2.51 pode ser vista em detalhes no decorrer do anexo A. Contudo a função de

partição para um sistema de muitos corpos A.1.8 é dada por:

$$Z = \int_{\phi_\alpha(\beta) \varsigma \phi_\alpha(0)} D(\phi_\alpha^*(\tau) \phi_\alpha(\tau)) \times \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \left[\sum_\alpha \phi_\alpha^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) \phi_\alpha(\tau) + H(\phi_\alpha^*(\tau), \phi_\alpha(\tau)) \right] \right\}. \quad (2.51)$$

O Hamiltoniano do Modelo Vidro de Spin de Ising Fermiônico é dado por:

$$H - \mu \hat{N} = - \sum_{ij} J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - \sum_s (\mu + sh) \sum_i \psi_{is}^* \psi_{is}. \quad (2.52)$$

Na equação acima, μ é o potencial químico, h o campo magnético uniforme e J_{ij} é a variável de interação aleatória entre os spins, a qual segue uma distribuição de probabilidade gaussiana com variância de acordo com:

$$\langle J_{ij} \rangle^2 = \frac{16J^2}{N}. \quad (2.53)$$

Na equação acima N é o número de sítios. Neste modelo, os operadores de spins são descritos como uma combinação bilinear de férmions, localizados em um determinado sítio i da rede, esses operadores são descritos por:

$$\begin{aligned} \sigma_i^z &= \frac{1}{2} \sum_s s \psi_{is}^* \psi_{is}, \\ \sigma_i^+ &= \psi_{i+}^* \psi_{i-} = (\sigma_i^-)^*. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Nesta abordagem, os autovalores são dados pelos autovalores n_{is} que é o operador número de ocupação $\psi_{is}^* \psi_{is}$, e $n_{is} = 0$ ou 1 , e os autovalores de S_i^z podem ser $S(S+1) = \frac{3}{4}$ ou 0 [18]. Os operadores ψ_{is}^* e ψ_{is} satisfazem as regras de anticomutação dos férmions e $s = +$ ou $-$, os quais satisfazem as seguintes regras de comutação:

$$\begin{aligned} [\sigma_i^\pm, \sigma_j^z] &= \mp \delta_{ij} \sigma_j^\pm, \\ [\sigma_i^+, \sigma_j^-] &= 2\delta_{ij} \sigma_i^z. \end{aligned} \quad (2.55)$$

A grande função de partição é dada por

$$Z = \int D\psi^* \psi \exp \left\{ \sum_j A_j^0 + \frac{1}{4} \left(\sum_{ij} \bar{\beta} J_{ij} \right) \sum_\nu S_i(\nu) S_j(-\nu) \right\}, \quad (2.56)$$

(ver equação A.106 do anexo A para detalhes da notação) em que:

$$\begin{aligned} A_j^0 &= \sum_s \sum_\omega (i\omega + \bar{\beta}(\mu + sh)) \psi_{j\sigma}^*(\omega) \psi_{j\sigma}(\omega), \\ S_i(\nu) &= \sum_{\omega,s} \sum_\sigma s \psi_{is}^*(\omega + \nu) \psi_{is}(\omega). \end{aligned} \quad (2.57)$$

Nas equações acima, $\omega = \pi(2m + 1)$ e $\nu = 2\pi p$ são as frequências de Matsubara, $\psi_{i\sigma}^*(\omega)$ e $\psi_{i\sigma}(\omega)$ são variáveis de Grassman anticomutantes (anexo A.1.3) e $\bar{\beta} = 1/k_b T$ [18]. O método das réplicas é utilizado para calcular a energia livre média por sítio, que é dada por:

$$F = -\frac{1}{\beta N} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{(\langle Z \rangle_{CA}^n - 1)}{n}. \quad (2.58)$$

A aproximação estática foi utilizada na referência [18], em que $\nu = 0$. Como consequência, teremos que:

$$\langle Z^N \rangle = \int \prod_\alpha D\psi_\alpha^* D\psi_\alpha \exp \left\{ \sum_{i\alpha} A_{i\alpha}^0 + \frac{\bar{\beta}^2 J^2}{2N} \sum_\alpha \sum_{\alpha'} M^{\alpha\alpha'} M^{\alpha'\alpha} \right\}, \quad (2.59)$$

onde:

$$\begin{aligned} M^{\alpha\alpha'} &= \sum_i S_{i\alpha}(0) S_{i\alpha'}(0), \\ M^{\alpha'\alpha} &= \sum_j S_{j\alpha'}(0) S_{j\alpha}(0). \end{aligned}$$

A variável $\alpha = 0, 1, 2, \dots, n$ é o índice de réplicas. Na equação 2.59, $A_{j\alpha}^0$ é o mesmo explicitado na equação 2.57 com índices diferentes, e com variáveis α dependentes de $\psi_{j\sigma}^{\alpha}(\omega)$ e $\psi_{j\sigma}^{\alpha}(\omega)$. As variáveis de Grassmann foram utilizadas pelo fato de que uma combinação linear delas são um número complexo comutante. Em adição, as médias da equação 2.59 podem ser realizadas pela separação das exponenciais [18]. Depois campos auxiliares são introduzidos para que ocorra a separação dos sítios, assim teremos que:

$$Z(n) = \int \prod_{\alpha\alpha'} dQ_{\alpha\alpha'} \exp \left\{ -N \left(\frac{-1}{2J^2 \bar{\beta}^2} \sum_{\alpha\alpha'} Q_{\alpha\alpha'}^2 - \ln \Lambda_{ST} \right) \right\}, \quad (2.60)$$

onde:

$$\Lambda_{ST} = \int \prod_\alpha D\psi_\alpha^* D\psi_\alpha \exp \left\{ \sum_\alpha A_\alpha^0 + \sum_{\alpha\alpha'} M^{\alpha\alpha'} Q_{\alpha\alpha'} \right\}. \quad (2.61)$$

Utilizando o método do ponto de sela para N grande, teremos:

$$Q_{\alpha\alpha'} = \frac{1}{\bar{\beta}^2 J^2} Q_{\alpha\alpha'} - \frac{\partial}{\partial Q_{\alpha\alpha'}} \ln \Lambda_{ST}.$$

A partir da solução com simetria de réplicas, teremos para $\alpha \neq \alpha'$:

$$Q_{\alpha\alpha'} = (\bar{\beta}J)^2 \frac{1}{n(n-1)} \sum_{\alpha \neq \alpha'} \langle S^\alpha(0)S^{\alpha'}(0) \rangle = (\bar{\beta}J)^2 q = Y. \quad (2.62)$$

Para $Q_{\alpha\alpha'}$ com $\alpha = \alpha'$:

$$Q_{\alpha\alpha} = (\bar{\beta}J)^2 \frac{1}{n} \sum_{\alpha} \langle (S^\alpha(0))^2 \rangle = X. \quad (2.63)$$

O parâmetro q na equação 2.62 é o parâmetro de ordem vidro de spin [18]. A magnetização e a susceptibilidade magnética são dados respectivamente por:

$$\begin{aligned} m &= \frac{1}{\bar{\beta}n} \frac{\partial \Lambda_{st}}{\partial h} = \frac{1}{n} \sum_{\alpha} \langle S^\alpha(0) \rangle_{st}, \\ \chi &= \frac{\bar{\beta}}{n} \sum_{\beta, \alpha} \langle S^\alpha(0)S^\beta(0) \rangle_{st} = \frac{1}{\bar{\beta}J^2} (X - Y). \end{aligned} \quad (2.64)$$

No limite de $n \rightarrow 0$, teremos:

$$\Lambda_{st} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dz \exp \left[\frac{-z^2}{2} \right] \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d\zeta \exp \left[\frac{-\zeta^2}{2} \right] I(\zeta, z, h) \right\}^n, \quad (2.65)$$

em que

$$I(\zeta, z, h) = \int \partial\psi^* \partial\psi \exp \left(\sum_{\omega, s} (i\omega + \bar{\beta}\mu + s\lambda) \right) \psi_s^*(\omega) \psi_s(\omega), \quad (2.66)$$

com $\lambda = \sqrt{2Y}z + \sqrt{2(X-Y)}\zeta + \bar{\beta}h$. Quando $\mu = 0$, garante-se que o número médio de ocupação por sítio é igual a 1 [18]. Com isso, obtêm-se a energia livre do sistema, a qual é dada por:

$$F = \frac{\bar{\beta}J^2}{2} (\bar{\chi}^2 + 2q\bar{\chi}) - \frac{1}{\bar{\beta}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(\frac{-z^2}{2} \right) \ln \left(1 + e^{(\bar{\beta}J)^2 \bar{\chi}} \cosh(z\bar{\beta}J\sqrt{2q} + \bar{\beta}h) \right). \quad (2.67)$$

Com $\bar{\chi} = \frac{\chi}{\bar{\beta}}$. As equações do ponto de sela para $m = 0$, são:

$$\bar{\chi} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dz e^{-\frac{z^2}{2}} \cosh(z\bar{\beta}J\sqrt{2q}) \left[e^{-(\bar{\beta}J)^2 \bar{\chi}} + \cosh(z\bar{\beta}J\sqrt{2q}) \right]^{-1} - q, \quad (2.68)$$

$$q = \int \frac{dz e^{-\frac{z^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sinh^2(z\bar{\beta}J\sqrt{2q})}{\left[e^{-(\bar{\beta}J)^2 \bar{\chi}} + \cosh(z\bar{\beta}J\sqrt{2q}) \right]^2}. \quad (2.69)$$

As equações 2.67 e 2.69 são semelhantes com as equações obtidas no modelo vidro de spin Sherrington-Kirkpatrick, visto na seção 2.4.3. Em adição ao modelo SK, te-

mos a equação 2.68 para a susceptibilidade estática, a qual é um parâmetro teórico a ser determinado simultaneamente ao parâmetro q . Isso indica que embora a abordagem estática mostrada aqui produza resultados semelhantes aos encontrados para spins clássicos (modelo SK), as flutuações quânticas ainda persistem na determinação da susceptibilidade estática, que surge nesta abordagem como um parâmetro de ordem [18].

2.5 Abordagens Teóricas para o Composto de $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$

Como discutido anteriormente, o composto de $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ tem sido o foco de diversos estudos tanto teóricos quanto experimentais [11–17, 23, 31, 34]. Estes estudos são motivados, principalmente, pela divergência entre os pesquisadores sobre a existência da fase vidro de spin para baixas concentrações de Ho^{3+} a partir da aplicação de campo transversal. Para campo transversal nulo, o composto $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ apresenta uma transição de fase vidro de spin em uma temperatura T_f , demarcada através da divergência na susceptibilidade magnética não linear. Porém, a partir da aplicação de campo transversal, a divergência em χ_3 é substituída por um máximo arredondado, o qual localiza-se em uma temperatura T^* . Esta temperatura T^* é menor que a temperatura T_f encontrada para a transição de fase a campo transversal nulo. De forma geral, devido a essa mudança no comportamento da susceptibilidade não linear na presença de campo transversal, surgem discussões a cerca de existência ou não da fase vidro de spin no composto $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$.

Com o objetivo de tentar explicar os comportamentos observados no composto de $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$, os autores da referência [31] propuseram o uso de um modelo vidro de spin com campo transversal, em uma aproximação estática. Nesta referência, o Hamiltoniano deste modelo é composto por três termos: vidro de spin, campo transversal e campo longitudinal. Nesta proposta o formalismo das réplicas foi utilizado no cálculo analítico para encontrar grandezas como a energia livre, a linha λ_{AT} , o parâmetro vidro de spin e as susceptibilidades linear e não linear. A referência [31] mostrou que a partir do modelo utilizado, a fase vidro de spin é obtida, e que a solução com simetria de réplicas é na maior parte estável. A solução com quebra na simetria de réplicas ocorre para valores muito pequenos de campo transversal ($\Gamma = 0,06$) e para temperaturas $T < 1,00$. Essencialmente na referência [31], o parâmetro de ordem q é a diretriz acerca da localização da transição de fase. Isso se deve ao fato de a linha λ_{AT} se mostrar estável na maior parte da fase vidro de spin. Tal resultado diverge daqueles demonstrados em [26] sobre a demarcação da fase vidro de spin a partir do início da instabilidade na solução com simetria de réplicas. O trabalho [31] mostrou ainda que quando $H = 0,00$, χ_3 apresenta uma divergência em T_f , para qualquer valor de campo transversal. Porém, quando $H \neq 0,00$ essa divergência é substituída por um máximo arredondado.

Algum tempo depois, a referência [15] utilizou o modelo vidro de spin de Ising SK com campo transversal para o tratamento do problema do composto $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$. Nesta

abordagem, o Hamiltoniano do modelo é composto por cinco termos: vidro de spin, campo transverso, campo longitudinal aleatório, campo longitudinal fixo e um termo referente a anisotropia (K_{ij}). O modelo foi tratado dentro do formalismo das réplicas e do tempo imaginário assim como em [31]. O trabalho em questão obteve um bom comparativo para a susceptibilidade magnética não linear teórica obtida em relação aos resultados experimentais, como pode ser observado na figura 2.9. Porém, a partir da abordagem utilizada, não há como localizar a linha de Almeida-Thouless, e portanto determinar uma transição de fase vidro de spin, quando Γ assume certo valor crítico. Basicamente, com Γ maior que certo valor, a simetria de réplicas seria recuperada, tal que não há λ_{AT} negativo. Nesse caso, T_f é localizada somente a partir do parâmetro de ordem. Contudo, ao ligar ambos campo aleatório e transverso nesta abordagem, não haveria como determinar o T_f , uma vez que haveria a indução do parâmetro de ordem via campos, bem como ausência de uma linha λ_{AT} . Conseqüentemente, no caso da referência [15], é sugerida que não há transição, primeiro porque o parâmetro vidro de spin é induzido quando $\Gamma \neq 0$, dada a relação utilizada entre Δ e Γ , e segundo pela não existência da linha λ_{AT} .

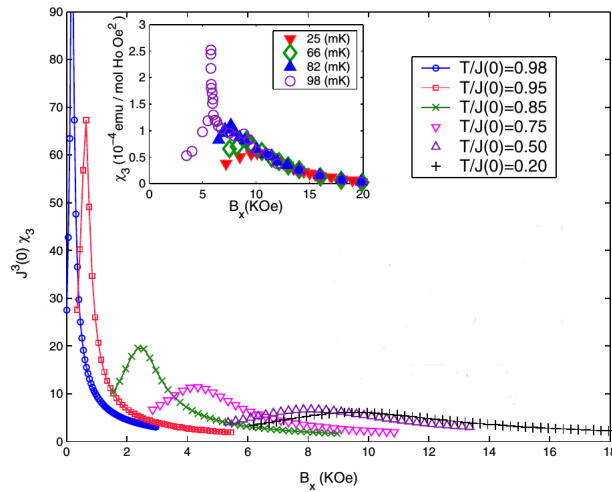


Figura 2.9 - Susceptibilidade magnética não linear teórica - $J_0^3 \chi_3 \times B_x$. Na janela superior encontra-se o gráfico de $\chi_3 \times B_x$ experimental, obtido na [23]

Fonte: Figura adaptada de [15, p. 237203-3].

A referência [14] propôs uma investigação detalhada do efeito dos campos aleatórios no comportamento da susceptibilidade não linear e da linha λ_{AT} . Essa investigação foi realizada através do modelo vidro de spin de Ising SK, dentro do formalismo das réplicas. O Hamiltoniano utilizado possui termos: vidro de spin, campo aleatório e campo longitudinal fixo. Tal trabalho mostrou que susceptibilidade não linear possui uma relação

não apenas com λ_{AT} mas também com o campo aleatório, tal relação é dada por:

$$\chi_3(T) = \frac{\bar{\beta}^3}{3} \left[\frac{3}{\lambda_{AT} + (\bar{\beta}J)^2 I_1} - 2 \right]. \quad (2.70)$$

Neste caso, I_1 é uma função de Δ (campo aleatório) e q (parâmetro vidro de spin). Neste caso quando $\Delta \neq 0$, a divergência em χ_3 era substituída pelo máximo arredondado em uma temperatura T^* . Além disso, a referência [14] mostrou que há transição de fase VS, e que esta pode ser demarcada por λ_{AT} através da quebra na estabilidade da solução com simetria de réplicas. A quebra na estabilidade ocorre para a temperatura em que $\lambda_{AT} = 0$, ou seja T_f . Contudo, a conclusão a respeito de T^* é que esta não é uma temperatura de transição de fase real, e sim uma temperatura que indica uma fase de Griffiths entre as fases paramagnética e vidro de spin, que encontra-se na região de temperatura T , de maneira que $T_f < T < T^*$ em um diagrama T/J vs Δ/J . Com o intuito de uma descrição mais precisa a respeito de tal sistema, uma análise do problema dentro de uma abordagem fermiônica foi proposta pela referência [16]. Nesta abordagem, os spins são descritos como férmions e o Hamiltoniano do sistema continha termos referentes ao vidro de spin, campo aleatório e campo transversal fixo. A referência [16] propôs dois casos distintos para a relação entre o campo transversal e o campo aleatório. No caso em que ambos estão relacionados através de uma dependência onde o campo aleatório é uma função do campo transversal $\Delta = \Delta(\Gamma)$, o modelo produziu resultados que coincidem de forma qualitativa com os encontrados experimentalmente para o composto de $LiHo_xY_{1-x}F_4$. Tais resultados dizem respeito a susceptibilidade não linear, indicando que T^* , temperatura do máximo de χ_3 na presença de campo transversal, não é uma temperatura de transição de fase, como pode ser observado na figura 2.10 (a). Desta forma, o máximo encontrado em χ_3 é um efeito dos campos aleatórios dentro da fase paramagnética. A referência em questão ainda mostra que a transição VS/PM é demarcada através da linha λ_{AT} . Na figura 2.10 (b), pode-se observar o diagrama de fases T vs Γ/J , a linha vermelha cheia corresponde a transição VS/PM, demarcada através da linha λ_{AT} , indicando a temperatura de transição de fase T_f . Já a linha azul pontilhada exibe a temperatura T^* , obtida através do máximo arredondado em χ_3 . De acordo com tal referência a linha construída a partir de χ_3 não construiu uma transição de fase real e sim uma fase de Griffiths dentro da fase PM [16].

Como podemos observar os trabalhos teóricos acima citados apresentam uma divergência a respeito da existência da fase vidro de spin no composto de $LiHo_xY_{1-x}F_4$, na presença de campo transversal em [31], na presença de campo aleatório [14] e na presença de campo aleatório e transversal fixo nas referências [15, 16]. Estes apresentam resultados distintos a respeito da relevância e comportamento da linha λ_{AT} . Contudo, os trabalhos mencionados tendem a concordar acerca da relação entre campos longitudinais aleatórios e da presença do máximo arredondado na susceptibilidade não linear. Porém, os mesmos

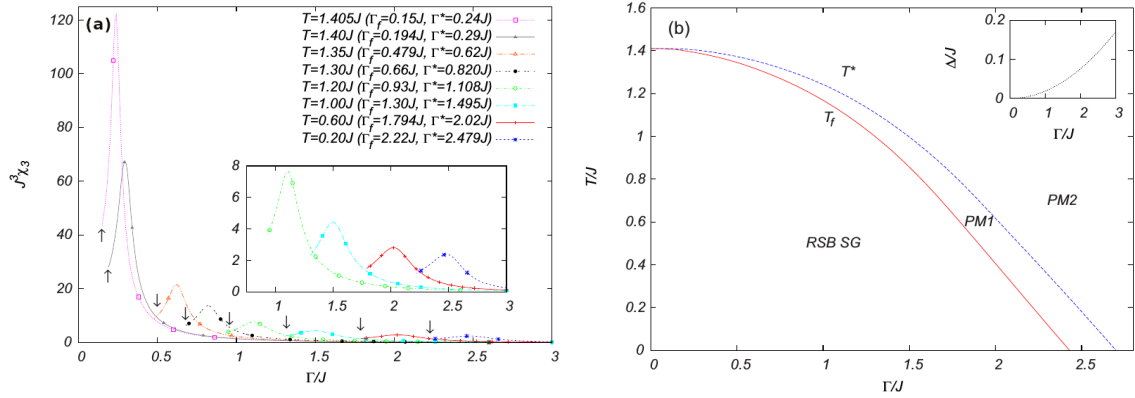


Figura 2.10 - (a) Susceptibilidade magnética não linear teórica - χ_3 vs Γ/J , para temperaturas fixas. (b) Diagrama de Fase T/J vs Γ/J , onde Δ e Γ/J possuem a seguinte relação: $\Delta = 0.002(\Gamma/J)^2$. Fonte: Figuras adaptadas de [16, p. 064201-7, p. 064201-8].

divergem a respeito do significado de T^* . Por essas razões, pode-se pensar em outras abordagens que possam reproduzir qualitativamente os resultados experimentais, e com isso contribuir para o esclarecimento a respeito do problema do composto $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$. Com isso em mente, o presente trabalho propõe uma análise da susceptibilidade não linear, assim como de outras grandezas de interesse à descrição de tal sistema, através do uso do modelo fermiônico com ambos campos transversos e longitudinais aleatórios. O Hamiltoniano é composto por quatro contribuições distintas: vidro de spin, campo transversal aleatório, campo longitudinal aleatório e campo longitudinal fixo. A seguir, o capítulo 3 contém a exposição do modelo teórico utilizado no presente trabalho, bem como quais as técnicas analíticas e numéricas empregadas para o seu tratamento.

3 METODOLOGIA

3.1 Modelo Vidro de Spin de Ising Fermiônico com Campos Transverso e Longitudinal Aleatórios

No Modelo Vidro de Spin Fermiônico os spins são escritos como uma combinação bilinear de operadores fermiônicos. Este modelo prevê quatro estados distintos por sítio, dois deles não magnéticos ($|00\rangle$ e $|\uparrow\downarrow\rangle$) e dois magnéticos ($|\uparrow 0\rangle$ e $|\downarrow 0\rangle$), estados conhecidos como não interagentes e interagentes, respectivamente. Nos estados a dupla ocupação segue o princípio de exclusão de Pauli. No Modelo Vidro de Spin de Ising Fermiônico com ambos os campos transverso e longitudinal aleatórios, o Hamiltoniano do modelo é definido como:

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

O primeiro termo do Hamiltoniano acima refere-se a interação entre os sítios, onde J_{ij} é a variável aleatória de interação entre os sítios i e j . O segundo e terceiro termos são correspondentes ao campo transverso aleatório Γ_i , e ao campo longitudinal aleatório h_i , respectivamente. O operador de spin \hat{S} é escrito como uma função bilinear dos operadores de criação e aniquilação. Os operadores de spin na equação 3.1 são definidos como:

$$\begin{aligned} \hat{S}_i^z &= \frac{1}{2} [n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}], \\ \hat{S}_i^x &= \frac{1}{2} [c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}]. \end{aligned} \quad (3.2)$$

O operador número de ocupação é $\hat{n}_i = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$, $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) são os operadores de criação (aniquilação), com $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow indicando as projeções de spin. No modelo, Γ_i e J_{ij} , h_i são variáveis aleatórias com distribuição de probabilidade trimodal e gaussianas [32], respectivamente, as quais são dadas por:

$$P(\Gamma_i) = p\delta(\Gamma_i) + \frac{1-p}{2} [\delta(\Gamma_i - \Gamma) + \delta(\Gamma_i + \Gamma)], \quad (3.3)$$

$$P(J_{ij}) = \left[\frac{N}{32\pi J^2} \right]^{1/2} \exp \left[-\frac{N}{32J^2} (J_{ij} - 4J_0/N)^2 \right], \quad (3.4)$$

e

$$P(h_i) = \left[\frac{1}{32\pi \Delta^2} \right]^{1/2} \exp \left[-\frac{1}{32\Delta^2} (h_i - 4H_l)^2 \right], \quad (3.5)$$

em que J_0 está relacionado com a interação ferromagnética e H_l refere-se ao campo longitudinal fixo. O parâmetro p define a fração de spins que estão sob a influência do campo transverso [32]. A obtenção da função de partição generalizada para um sistema de muitos corpos pode ser vista em detalhes no apêndice A, em que para o caso do nosso modelo ela

é dada por:

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

A ação $A \{y_j\}$ da equação acima é definida pela seguinte equação:

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

O modelo fermiônico prevê quatro estados distintos por sítios, dois interagentes e dois não interagentes. Por este motivo, duas abordagens distintas são consideradas, as quais são conhecidas como $2S$ e $4S$ [24]. No caso $2S$, os estados não interagentes são descartados, restando apenas os estados magnéticos $|\uparrow 0\rangle$ e $|\downarrow 0\rangle$, com $s = 2$ e $y_j = ix_j$ na equação 3.6. Uma das consequências da utilização da abordagem $2S$ é que ela permite uma comparação direta com os resultados obtidos através do formalismo clássico do modelo SK [6]. Na abordagem $4S$, os estados magnéticos são dados por $|\uparrow 0\rangle$ e $|\downarrow 0\rangle$ e os não magnéticos por $|00\rangle$ e $|\downarrow\uparrow\rangle$, para este caso na equação 3.6 $s = 4$ e $y_i = \bar{\beta}\mu$. As consequências da utilização do caso $4S$ é poder considerar efeitos relacionados ao número médio de ocupação n . Nas equações 3.6 e 3.7, ϕ^* e ϕ são as variáveis de Grassmann, que estão relacionadas com os operadores a^\dagger e a , de criação e aniquilação, respectivamente [33]. As variáveis s e y_i são introduzidas nas equações 3.6 e 3.7 para representar de forma generalizada a função de partição e assumem valores distintos de acordo com a abordagem utilizada ($2S$ ou $4S$). Na equação 3.7, temos que $H(\phi_{i\sigma}^*(\tau), \phi_{i\sigma}(\tau))$ é o Hamiltoniano resultante e pode ser separado em contribuições distintas, correspondentes ao vidro de spin, campo transversal aleatório e campo longitudinal aleatório. Desta forma:

$$H(\phi_{i\sigma}^*(\tau), \phi_{i\sigma}(\tau)) = H_{VS} + H_{\Gamma_i} + H_{h_i}. \quad (3.8)$$

Os termos do lado direito da equação 3.8 são dados por:

$$\begin{aligned} H_{VS} &= -\frac{1}{4} \sum_{ij} J_{ij} \sum_{\sigma\sigma'} \sigma\sigma' \phi_{i\sigma}^*(\tau) \phi_{i\sigma}(\tau) \phi_{j\sigma'}^*(\tau) \phi_{j\sigma'}(\tau), \\ H_{\Gamma_i} &= -\sum_{i\sigma} \Gamma_i \phi_{i\sigma}^*(\tau) \phi_{i-\sigma}(\tau), \\ H_{h_i} &= -\frac{1}{2} \sum_{i\sigma} h_i \sigma \phi_{i\sigma}^*(\tau) \phi_{i\sigma}(\tau). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Após a utilização das frequências de Matsubara (ver apêndice D.1.1 para detalhes), a ação A_{y_i} foi separada em contribuições distintas: um termo A_{Γ_i} , o qual contém os termos relacionados a y_i e ao campo transversal aleatório, um termo A_{h_i} relacionado com o campo longitudinal aleatório, e por último um termo A_{vs} relacionado com a componente

vidro de spin, os quais são definidos a seguir:

$$A_{\Gamma_i}(\{\Gamma_i\}) = \sum_j \sum_n \underline{\phi}_j^\dagger(\omega_n) \gamma_j^{-1}(\{\Gamma_i\}) \underline{\phi}_j(\omega_n), \quad (3.10)$$

com $\gamma_j^{-1}(\{\Gamma_i\}) = (i\omega_n + y_j) I + \bar{\beta} \Gamma_i \underline{\sigma}^x$.

$$A_{h_i}(\{h_i\}) = \frac{1}{2} \sum_i \bar{\beta} h_i \sum_\omega \underline{\phi}_i^\dagger(\omega) \underline{\sigma}^z \underline{\phi}_i(\omega), \quad (3.11)$$

$$A_{vs} = \sum_{\omega'} \sum_{ij} \bar{\beta} J_{ij} S_i^z(\omega') S_j^z(-\omega'), \quad (3.12)$$

onde $S_i^z(\omega') = \frac{1}{2} \sum_\omega \underline{\phi}_i^\dagger(\omega + \omega') \underline{\sigma}^z \underline{\phi}_i(\omega)$, com $\omega = (2m+1)\pi$ e $\omega' = 2m\pi$ ($m = 0, \pm 1, \dots$) que são as frequências de Matsubara, $\underline{\sigma}^z$ e $\underline{\sigma}^x$ são as matrizes de Pauli e as matrizes $\underline{\phi}_j^\dagger(\omega) = [\phi_{j\uparrow}^*(\omega) \quad \phi_{j\downarrow}^*(\omega)]$ e $\underline{\phi}_j(\omega) = (\underline{\phi}_j^\dagger(\omega))^\dagger$. A aproximação estática é realizada, isso significa que $\omega' = 0$. Sendo assim, o termo de ação referente ao vidro de spin torna-se:

$$A_{vs}^{est} = \sum_{ij} \bar{\beta} J_{ij} S_i^z(0) S_j^z(0), \quad (3.13)$$

com

$$\begin{aligned} S_i^z(0) &= \frac{1}{2} \sum_q \underline{\phi}_i^\dagger(\omega_q) \underline{\sigma}^z \underline{\phi}_i(\omega_q), \\ S_j^z(0) &= \frac{1}{2} \sum_r \underline{\phi}_j^\dagger(\omega_r) \underline{\sigma}^z \underline{\phi}_j(\omega_r). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Assim como, explicado na seção 2.4.3, do capítulo 2, não há como obtermos as médias configuracionais das grandezas físicas diretamente a partir da equação 2.43, devido a forma que a integral da equação 2.44 é dada. Por este motivo, o método das réplicas é utilizado, desta forma o $\langle \ln Z \rangle$ é escrito como:

$$\langle \ln Z \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\langle \langle \langle Z^n \rangle \rangle \rangle_{J, \Gamma, h} - 1}{Nn}. \quad (3.15)$$

Desta forma, a energia livre média f por sítio no formalismo das réplicas, será:

$$\bar{\beta} f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{N} \frac{\langle \langle \langle Z^n \rangle \rangle \rangle_{J, \Gamma, h} - 1}{n}, \quad (3.16)$$

onde

$$\begin{aligned} \langle\langle\langle Z^n(\{\Gamma_i\}, h_i) \rangle\rangle\rangle_{J, \Gamma, h} &= \left\langle\left\langle \int \prod_{ij} P(J_{ij}) dJ_{ij} \int \prod_{\alpha} D(\phi_{\alpha}^{\dagger} \phi_{\alpha}) e^{\frac{(s-2)}{2} N \bar{\beta} \mu_{\alpha}} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \prod_j \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{j\alpha} e^{-y_{j\alpha}} e^{A_{\alpha j}^0 \{y_j, \Gamma_i, h_i\}} \right\rangle\right\rangle_{\Gamma_i, h_i}, \end{aligned} \quad (3.17)$$

com:

$$\begin{aligned} A_{\alpha j}^0 \{y_i, \Gamma_i, h_i\} &= \sum_{\alpha j} \sum_n \Psi_{\alpha j}^{\dagger}(\omega_n) \gamma^{-1}(\{\Gamma_i\}) \Psi_{\alpha j}(\omega_n) \\ &\quad + \sum_{\alpha} \sum_{ij} \bar{\beta} J_{ij} S_{\alpha i}^z(0) S_{\alpha j}^z(0) + A_{h_i}^0. \end{aligned} \quad (3.18)$$

O índice das réplicas $\alpha = 1, 2, \dots, n$. A média sobre J_{ij} é calculada considerando a distribuição Gaussiana da equação 3.4 e utilizando a teoria de campo médio os somatórios de dois sítios são reescritos para um único sítio, resultando em

$$\begin{aligned} \langle\langle\langle Z^n(\{\Gamma_i\}) \rangle\rangle\rangle_{J, \Gamma} &= \left\langle\left\langle \int \prod_{\alpha} D(\phi_{\alpha}^{\dagger} \phi_{\alpha}) e^{\frac{(s-2)}{2} N \bar{\beta} \mu_{\alpha}} \prod_i \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{i\alpha} e^{-y_{i\alpha}} e^{\sum_{\alpha i} A_{\alpha i}^0(\{\Gamma_i\})} \right. \right. \\ &\quad \times \exp \left[\frac{8\bar{\beta}^2 J^2}{N} \sum_{\alpha} \left(\sum_i (S_{i\alpha}^z)^2 \right) + \frac{16\bar{\beta}^2 J^2}{N} \sum_{\alpha\beta} \left(\sum_i S_{\alpha i}^z S_{\beta i}^z \right)^2 \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{2\bar{\beta} J_0}{N} \sum_i \left(\sum_{\alpha} S_{\alpha i}^z \right)^2 + \bar{\beta} \sum_{\alpha, i} h_i S_{\alpha i}^z \right] \right\rangle\right\rangle_{\Gamma_i, h_i}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

onde:

$$A_{\alpha i}^0(\{\Gamma_i\}) = \sum_{\alpha i} \sum_n \Psi_{\alpha i}^{\dagger}(\omega_n) \gamma^{-1}(\{\Gamma_i\}) \Psi_{\alpha i}(\omega_n). \quad (3.20)$$

Usa-se $S_{\alpha i}^z(0) = S_{\alpha i}^z$, por simplicidade.

A transformação de Hubbard-Stratonovich é utilizada, para a linearização dos termos quadrados (ver apêndice D.1.2 para mais detalhes). Desta forma, através desta transformação os campos auxiliares m_{α} , q_{α} e $q_{\alpha\beta}$ são introduzidos, resultando em:

$$\langle\langle\langle Z^n \rangle\rangle\rangle_{J, \Gamma_i, h_i} = e^{\frac{(s-2)}{2} \bar{\beta} \mu} \left\langle \mathcal{N} \int \prod_{\alpha} dq_{\alpha} \int \prod_{\alpha} dm_{\alpha} \int \prod_{(\alpha\beta)} dq_{\alpha\beta} \exp [N \Omega_n(\{\Gamma_i\})] \right\rangle_{\Gamma_i}, \quad (3.21)$$

com $\mathcal{N} = (\bar{\beta} J \sqrt{N/2\pi})^{n(n+1)/2}$. Na aproximação estática, temos:

$$\Omega_n(\{\Gamma_i\}) = -(\bar{\beta} J)^2 \left(\sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} q_{\alpha}^2 \right) - \frac{\bar{\beta} J_0}{2} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + \langle \ln \Lambda_{\alpha}(\{\Gamma_i\}) \rangle_{\Gamma_i}, \quad (3.22)$$

$$\Lambda_\alpha(\{\Gamma_i\}) = \prod_\alpha \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_\alpha e^{-y_\alpha} \int D(\phi_\alpha^\dagger \phi_\alpha) \exp H_{eff}, \quad (3.23)$$

onde

$$H_{eff} = \sum_\alpha A_{0\Gamma_i}^\alpha + 4 \left[\frac{\bar{\beta}^2 \Delta^2}{2} \sum_{(\alpha,\beta)} S_\alpha^z S_\beta^z + \frac{\bar{\beta} J_0}{2} \sum_\alpha m_\alpha S_\alpha^z + \frac{\bar{\beta} H_l}{2} \sum_\alpha S_\alpha^z \right. \\ \left. + (\bar{\beta} J)^2 \left[\sum_\alpha q_\alpha (S_\alpha^z)^2 + 2 \sum_{(\alpha,\beta)} q_{\alpha\beta} S_\alpha^z S_\beta^z \right] \right]. \quad (3.24)$$

Pode-se notar que as i somas são explicitadas. Pode ser notado que nesse ponto a média sobre h_i usando a distribuição da equação 3.5 foi realizada. Como resultado, é verificado o aparecimento da largura Δ (ver equação 3.24). Em adição, a integral contida na equação 3.21 é calculada através do método *Steepest Descent*, conhecido como método do ponto de sela, onde q_α e $q_{\alpha\beta}$ são escolhidos de forma a extremizar o argumento Λ_α da exponencial da equação 3.21, tal que:

$$q_\alpha = \frac{1}{(\bar{\beta} J)^2} \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \ln \Lambda_\alpha = 4 \langle \langle (S_\alpha^z)^2 \rangle \rangle_{\Gamma_i}, \\ q_{\alpha\beta} = \frac{1}{2(\bar{\beta} J)^2} \frac{\partial}{\partial q_{\alpha\beta}} \ln \Lambda_\alpha = 4 \langle \langle (S_\alpha^z S_\beta^z) \rangle \rangle_{\Gamma_i}, \\ m_\alpha = \frac{2}{(\bar{\beta} J_0)^2} \frac{\partial}{\partial m_\alpha} \ln \Lambda_\alpha = 2 \langle \langle (S_\alpha^z) \rangle \rangle_{\Gamma_i}. \quad (3.25)$$

Reescrevendo os somatórios das réplicas da equação 3.20 para uma única réplica, teremos:

$$\sum_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} S_\alpha^z S_\beta^z = \frac{1}{2} q \left[\left(\sum_\alpha S_\alpha^z \right)^2 - \sum_\alpha (S_\alpha^z)^2 \right], \\ \sum_\alpha q_\alpha (S_\alpha^z)^2 = \bar{q} \sum_\alpha (S_\alpha^z)^2. \quad (3.26)$$

Desta forma, o Hamiltoniano efetivo torna-se:

$$H_{eff} = \sum_\alpha A_{\Gamma_i}^\alpha + 4(\bar{\beta} J)^2 (\bar{q} - q) \sum_\alpha (S_\alpha^z)^2 + 2(\bar{\beta} \Delta)^2 \left(\sum_\alpha S_\alpha^z \right)^2 \\ + 4(\bar{\beta} J)^2 q \left(\sum_\alpha S_\alpha^z \right)^2 + 2\bar{\beta} J_0 \sum_\alpha m_\alpha S_\alpha^z + 2\bar{\beta} H_l \sum_\alpha S_\alpha^z. \quad (3.27)$$

Novamente a transformação de Hubbard-Stratonovich é utilizada para linearizar os termos

quadrados, de forma que obtêm-se:

$$\begin{aligned}
\Lambda_\alpha(\{\Gamma_i\}) &= \prod_\alpha \int e^{\frac{(s-2)\bar{\beta}\mu_\alpha}{2}} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_\alpha e^{-y_\alpha} \int \frac{dz}{2\pi} e^{-\frac{z}{2}} \frac{d\xi_\alpha}{2\pi} e^{-\frac{\sum_\alpha \xi_\alpha^2}{2}} \int D(\phi_\alpha^\dagger \phi_\alpha) \\
&\times \exp \left\{ \sum_\alpha \left[A_\alpha^0(\{\Gamma_i\}) + 2\bar{\beta}J\sqrt{2(\bar{q}-q)}\xi_\alpha S_\alpha^z + 2\bar{\beta}J\sqrt{2q+(\Delta/J)^2}zS_\alpha^z \right] \right\} \\
&\times \exp \left\{ \sum_\alpha \left[2\bar{\beta}J_0 \sum_\alpha m_\alpha S_\alpha^z + 2\bar{\beta}H_l \sum_\alpha S_\alpha^z \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{3.28}$$

A partir deste ponto a seguinte notação será utilizada:

$$\begin{aligned}
\int Dx &= \int \frac{dx}{2\pi} e^{-\frac{x^2}{2}}, \\
\int D\xi_\alpha &= \int \frac{d\xi_\alpha}{2\pi} e^{-\frac{\sum_\alpha \xi_\alpha^2}{2}}.
\end{aligned} \tag{3.29}$$

Nas expressões acima, as variáveis x e ξ_α , são genéricas. Deve ser lembrando que S_α^z é definido na equação 3.14. Resolvendo a integral de $\Lambda(\{\Gamma_i\})$, teremos:

$$\Lambda_i(\Gamma_i) = \int Dz \left\{ \int D\xi 2e^{\frac{(s-2)\bar{\beta}\mu}{2}} \left[\frac{s-2}{2} \cosh(\bar{\beta}\mu) + \cosh \sqrt{\Xi(z,\xi, \Gamma_i)} \right] \right\}^n. \tag{3.30}$$

Considerando a solução com simetria de réplicas (apêndice C) e assumindo os limites $N \rightarrow \infty$ e $n \rightarrow 0$, a energia livre será:

$$\begin{aligned}
\Omega &= \frac{\bar{\beta}J^2}{2} [\bar{q}^2 - q^2] - \frac{(s-2)}{2}\mu + \frac{J_0}{2}m^2 - \frac{1}{\bar{\beta}} \ln 2 \\
&- \left\langle \frac{1}{\bar{\beta}} \int Dz \ln \left[\frac{s-2}{2} \cosh(\bar{\beta}\mu) + \int D\xi \cosh(\sqrt{\Xi(z,\xi, \Gamma_i)}) \right] \right\rangle_{\Gamma_i}.
\end{aligned} \tag{3.31}$$

Na equação acima, quando $s = 2$ a abordagem $2S$ está sendo utilizada, e para $s = 4$ a abordagem $4S$. Calculando a média sobre Γ_i , obtêm-se:

$$\begin{aligned}
\Omega &= \frac{\bar{\beta}J^2}{2} [\bar{q}^2 - q^2] - \frac{(s-2)}{2}\mu + \frac{J_0}{2}m^2 - \frac{1}{\bar{\beta}} \ln 2 \\
&- p \frac{1}{\bar{\beta}} \int Dz \ln \left[\frac{(s-2)}{2} \cosh(\bar{\beta}\mu) + \int D\xi \cosh(h(z,\xi)) \right] \\
&- (1-p) \frac{1}{\bar{\beta}} \int Dz \ln \left[\frac{(s-2)}{2} \cosh(\bar{\beta}\mu) + \int D\xi \cosh(\sqrt{\Xi(z,\xi)}) \right],
\end{aligned} \tag{3.32}$$

onde:

$$\begin{aligned}
K(z) &= \frac{(s-2)}{2} \cosh(\bar{\beta}\mu) + \int D\xi \cosh(\sqrt{\Xi(z,\xi)}), \\
h(z,\xi) &= \bar{\beta}J\sqrt{2q + (\Delta/J)^2}z + \bar{\beta}J\sqrt{2(\bar{q}-q)}\xi + \bar{\beta}(J_0m + H_l), \\
\Xi(z,\xi) &= h^2(z,\xi) + (\bar{\beta}\Gamma)^2.
\end{aligned} \tag{3.33}$$

No presente trabalho, a solução com simetria de réplicas é proposta, onde $p = 0$ e $\mu = 0$ na abordagem $2S$ e $p = \cosh(\bar{\beta}\mu)$ na abordagem $4S$. Neste caso, as equação para os parâmetros de ordem são dadas por:

$$q = p \int Dz \left[\frac{\int Dw \sinh[h(z,\xi)]}{K(z)} \right]^2 + (1-p) \int Dz \left[\frac{\int Dw h(z,w) \sinh \sqrt{\Xi(z,\xi)}}{K(z)\sqrt{\Xi(z,\xi)}} \right]^2, \tag{3.34}$$

$$\begin{aligned}
\bar{q} &= p \int Dz \left[\frac{1}{K(z)} \int Dw \cosh[h(z,\xi)] \right] \\
&+ (1-p) \int Dz \left[\frac{1}{K(z)} \int Dw \left\{ \frac{h(z,w)^2 \cosh \sqrt{\Xi(z,\xi)}}{\Xi(z,\xi)} + \frac{(\bar{\beta}\Gamma)^2 \sinh \sqrt{\Xi(z,\xi)}}{\Xi(z,\xi)^{3/2}} \right\} \right],
\end{aligned} \tag{3.35}$$

$$m = p \int Dz \frac{\int Dw \sinh[h(z,\xi)]}{K(z)} + (1-p) \int Dz \frac{\int Dw h(z,w) \sinh \sqrt{\Xi(z,\xi)}}{K(z)\sqrt{\Xi(z,\xi)}}. \tag{3.36}$$

Nas equações acima, temos que:

$$\Xi(z,\xi) = h^2(z,\xi) + (\bar{\beta}\Gamma)^2. \tag{3.37}$$

Em particular, no sistema físico em questão, as susceptibilidades magnéticas linear (χ_1) e não linear (χ_3) são quantidades de grande relevância, dadas pelos coeficientes da expansão da magnetização m em relação a pequenos campos longitudinais H_l , tal que:

$$m = \chi_1 H_l - \chi_3 H_l^3 - \dots, \tag{3.38}$$

onde:

$$\chi_1 = \left. \frac{\partial m}{\partial H_l} \right|_{H_l \rightarrow 0}, \tag{3.39}$$

$$\chi_3 = - \left. \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 m}{\partial H_l^3} \right|_{H_l \rightarrow 0}. \tag{3.40}$$

A obtenção das equações analíticas para as susceptibilidades magnéticas linear e não linear podem ser vistas com detalhes no apêndice B. A linha de Almeida-Thouless, a qual descreve a região de validade da solução com simetria de réplicas é dada por λ_{AT}

e é descrita por:

$$\lambda_{AT} = 1 - 2\bar{\beta}^2 J^2 \int Dz \left\langle [\varphi_2(z) - \varphi_1^2(z)]^2 \right\rangle_{\Gamma_i}, \quad (3.41)$$

com

$$\varphi_n(z) = \left[\int D\xi \frac{\partial^n}{\partial \bar{h}^n} \left(\cosh \sqrt{\bar{\Xi}(z, \xi)} \right) \right] / \bar{K}(z), \quad (3.42)$$

onde:

$$\begin{aligned} \bar{\Xi}(z, \xi) &= \bar{h}^2(z, \xi) + \bar{\beta}^2 \Gamma_i^2 \\ \bar{h}(z, \xi) &= \bar{\beta} J (\sqrt{2q} + (\Delta/J)^2 z + \sqrt{\bar{q} - q\xi}) \\ \bar{K}(z) &= \frac{s-2}{2} \cosh \bar{\beta} \mu + \int D\xi \cosh \sqrt{\bar{\Xi}(z, \xi)}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

3.2 Cálculos Numéricos

As soluções numéricas para o conjunto de equações dos parâmetros de ordem (POs) são obtidas por meio de implementação de algoritmo em linguagem Fortran. Trata-se de um conjunto de sistemas não lineares na forma:

$$\begin{cases} F_1(x_1, x_2, x_3) = 0 \\ F_2(x_1, x_2, x_3) = 0 \\ F_3(x_1, x_2, x_3) = 0, \end{cases} \quad (3.44)$$

com notação vetorial $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \int \int \mathbf{f}(\mathbf{x}, y, z) dy dz = 0$. Nestes, para cálculo dos valores de \mathbf{x} (POs) que satisfazem a equação 3.44, o método de Newton-Raphson é empregado. Para resolução das integrais numéricas contidas nas funções da equação 3.44, utiliza-se a quadratura Gaussiana. A partir do cálculo numérico dos POs, resultados na forma de diagramas de fase são mostrados. Outras quantidades termodinâmicas também podem ser analisadas. Em particular, no sistema físico em questão, são quantidades de grande relevância os coeficientes da expansão da magnetização m em relação a pequenos campos longitudinais H_l dada na equação 3.38. E as susceptibilidades magnéticas linear e não linear são dadas pelas equações 3.39 e 3.40, respectivamente. Salienta-se novamente a importância de tais grandezas na caracterização do ordenamento VS. Para obtenção dos χ_1 e χ_3 utiliza-se derivação numérica. Nesse caso, é empregado o método de diferenças finitas para o cálculo das derivadas de primeira e terceira ordem. Alternativamente, para efeitos de comparação, os resultados numéricos para $\Delta/J = 0,00$ e $\Gamma/J = 0,00$ foram comparados com os resultados analíticos (ver apêndice B).

Na tabela 3.1 temos a relação dos símbolos com o parâmetro relacionado. Parâmetros como Γ , Δ , p e T são considerados parâmetros de ajustes, estes serão os parâmetros que vão ter seus valores variados durante a realização dos cálculos numéricos.

Tabela 3.1 - Parâmetros de ajuste para os cálculos numéricos

Símbolo	Parâmetros
Γ/J	Campo Transverso.
Δ/J	Campo Longitudinal Aleatório.
T/J	Temperatura.
p	Fração de spins sobre a influência de Γ/J .
q	Parâmetro de ordem Vidro de Spin.
λ_{AT}	Linha de Almeida-Thouless.
χ_1	Susceptibilidade magnética linear.
χ_3	Susceptibilidade magnética não linear.

Neste caso as susceptibilidades χ_1 e χ_3 , e os parâmetros q e λ_{AT} , são os parâmetros de interesse. Estes são os parâmetros cujo seus comportamentos serão obtidos através dos cálculos numéricos.

4 RESULTADOS

Através da resolução numérica, dos parâmetros de ordem, as susceptibilidades magnéticas e a linha λ_{AT} são obtidas dentro do modelo 2S. Como consequência, o comportamento de tais quantidades é analisado e os diagramas de fase paramagnética/vidro spin (PM/VS) são construídos. Em particular, os parâmetros de ajuste são: a temperatura T/J , o campo aleatório Δ/J , o campo transverso Γ/J e a fração de spin sob influência do campo transverso p . Os parâmetros de interesse são as susceptibilidades magnéticas χ_1 e χ_3 , o parâmetro de ordem da fase vidro de spin q e a linha de Almeida-Thouless λ_{AT} .

A transição PM/VS pode ser demarcada de duas formas para campo aleatório nulo, em que para $q = 0,00$, o sistema encontra-se em uma fase PM e para $q > 0,00$ uma fase VS. A outra forma de demarcar a transição vidro de spin é através de λ_{AT} . Diversos trabalhos mostram que na temperatura de transição de fase $\lambda_{AT} = 0,00$, além de indicar a transição de fase a linha de Almeida-Thouless indica também o início da quebra da solução com simetria de réplicas [18, 24, 26]. É salientado que nos cálculos numéricos, $J_0 = 0,00$ o que implica em $m = 0,00$ na ausência de campo magnético longitudinal H_l . Para melhor entendimento dos resultados obtidos, estes serão divididos em duas seções. Resultados para $p = 0,00$ e resultados para $p > 0,00$, onde p é a fração de spins sobre a influência do campo transverso. Para $p = 0,00$, os spins estão sob total influência do campo transverso Γ/J , e efeitos quânticos podem ser observados. No caso em que $p = 1,00$, os spins não estão sob a influência de Γ/J , não havendo assim efeitos de natureza quântica. O grande foco da análise dos resultados deste trabalho está em observar o que ocorre com os parâmetros de ordem, linha λ_{AT} e com as susceptibilidades magnéticas no regime intermediário de p , ou seja $0,00 < p < 1,00$.

4.1 Resultados para $p = 0,00$.

Todos os resultados contidos nesta seção são para $p = 0,00$, o que significa que os spins estão sob total influência de Γ/J . Essa abordagem está dentro do limite quântico. Desta forma, os resultados obtidos para $p = 0,00$ podem ser qualitativamente comparados com os obtidos no trabalho da referência [16]. A figura 4.1 traz o comportamento de q e λ_{AT} . Tais parâmetros são utilizados para a demarcação da transição de fase VS/PM. A transição de fase VS ocorre para o valor de temperatura T_f na qual o parâmetro de ordem q deixa de ser zero. Pode-se observar, através das figuras 4.1 (a) e 4.1 (b), que a transição só pode ser demarcada através de q quando $\Delta/J = 0,00$, já que para $\Delta/J > 0,00$ tal parâmetro é induzido e nunca vai a zero. Observa-se também na figura 4.1 que para ambos os casos $\Gamma/J = 0,00$ e $\Gamma/J = 1,25$ para $\Delta/J = 0,00$ e $p = 0,00$, a temperatura de transição, marcada pelo parâmetro de ordem q , coincide com o valor de temperatura na qual $\lambda_{AT} = 0,00$. No caso em que $\Delta/J > 0,00$, o parâmetro q é induzido, o que significa

que ele não vai a zero. Desta forma, a linha λ_{AT} é utilizada para marcar a transição de fase. Em particular, $\lambda_{AT} = 0,00$ em T_f . É salientado que na abordagem com simetria de réplicas, a validade da solução é indicada por valores positivos de λ_{AT} . Neste caso, a solução com simetria de réplicas é instável dentro da fase vidro de spin, onde $\lambda_{AT} < 0,00$. Como consequência, λ_{AT} acaba se tornando um parâmetro para localização de T_f .

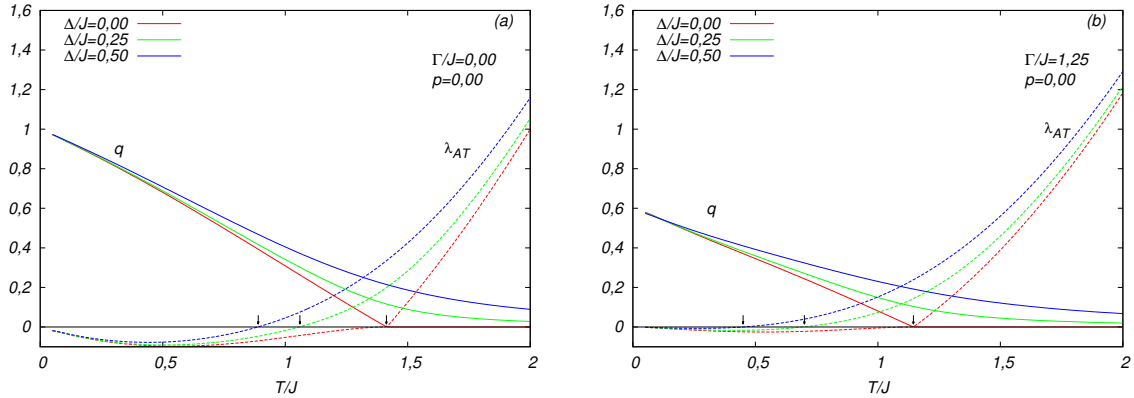


Figura 4.1 - Parâmetro de ordem q e linha de Almeida-Thouless λ_{AT} , como funções da temperatura. Linhas cheia e tracejada, respectivamente, para $p = 0,00$, em (a) para $\Gamma/J = 0,00$ e em (b) para $\Gamma/J = 1,25$, para diversos valores de Δ/J . Linhas: vermelhas para $\Delta/J = 0,00$; verdes para $\Delta/J = 0,25$ e azuis para $\Delta/J = 0,50$.

As susceptibilidades magnéticas linear χ_1 e não linear χ_3 são grandezas de fundamental importância, já que elas possuem comportamentos característicos os quais indicam a presença da fase vidro de spin. Tais grandezas físicas são obtidas através da expansão da magnetização como pode ser visto nas equações 3.38, 3.39 e 3.40. Na figura 4.2 (a) tem-se o comportamento do χ_1 como função da temperatura, para $p = 0,00$, $\Gamma/J = 0,00$, e para dois valores distintos de Δ/J . Para $\Gamma/J = 0,00$ e $\Delta/J = 0,00$ temos uma temperatura de transição de fase de $T_f = 1,41J$. No caso em que $\Delta/J = 0,50$, o pico na susceptibilidade magnética linear é substituído por um máximo arredondado. Na figura 4.2 (b) temos o comportamento de χ_1 vs T para $\Gamma/J = 1,25$ para $p = 0,00$ e dois valores distintos de Δ/J . Para $\Delta/J = 0,00$ nota-se o pico em χ_1 em uma $T_f = 1,14J$. Quando $\Delta/J = 0,50$ podemos observar que χ_1 tem sua forma alterada. De maneira geral, podemos observar nas figuras 4.2 (a) e 4.2 (b) que χ_1 apresenta o pico na temperatura de transição de fase T_f para $\Delta/J = 0,00$, o que é característico dos vidros de spin. Observa-se também que o aumento de Γ/J causa uma diminuição na temperatura de transição de fase. Conjuntamente, é verificado que o aumento de Δ/J causa uma mudança na forma de χ_1 , onde o pico para $\Delta/J = 0,00$ é substituído por um máximo arredondado para $\Delta/J = 0,50$. Pode-se notar também que este máximo arredondado para $\Delta/J = 0,50$ diminui de intensidade com o aumento de Γ/J .

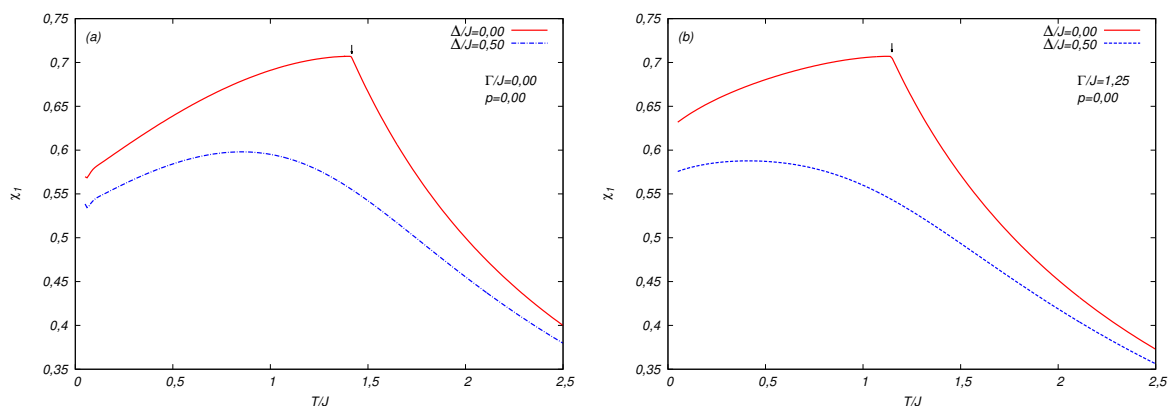


Figura 4.2 - Susceptibilidade magnética linear como função da temperatura, para $\Delta/J = 0,00$ e $\Delta/J = 0,25$, linhas vermelha cheia e azul tracejada, respectivamente. Em (a) $\Gamma/J = 0,00$ e em (b) $\Gamma/J = 1,25$. Em ambos os casos a temperatura de transição encontra-se no pico de χ_1 para $\Delta/J = 0,00$ e é indicada pela flecha.

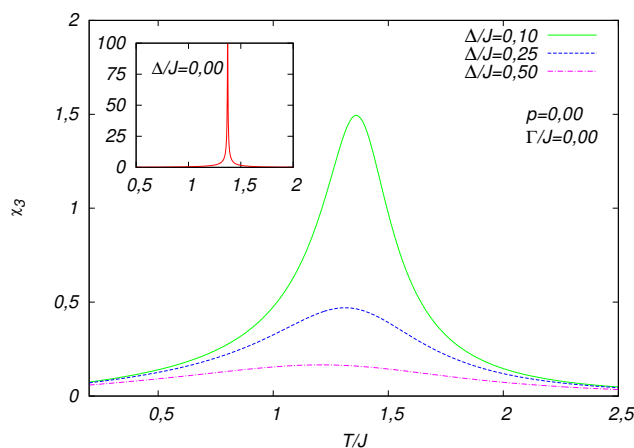


Figura 4.3 - Susceptibilidade magnética não linear como função da temperatura para $\Gamma/J = 0,00$ e $p = 0,00$, para $\Delta/J = 0,10$ (linha verde sólida); $0,25$ (linha azul pontilhada); $0,50$ (linha rosa tracejada) e na janela para $\Delta/J = 0,00$ (linha vermelha sólida).

Na figura 4.3 pode-se observar o comportamento da susceptibilidade magnética não linear como um função da temperatura, para $\Gamma/J = 0,00$ e $p = 0,00$, e valores distintos de Δ/J . Na inserção contida na figura 4.3 observa-se o comportamento de χ_3 para campos transverso e aleatório nulos ($\Gamma/J = 0,00$ e $\Delta/J = 0,00$, respectivamente), em que a linha sólida vermelha mostra clara divergência de χ_3 em T_f . Porém, quando $\Delta/J \neq 0,00$ podemos observar que o formato de χ_3 é alterado, e a divergência em χ_3 obtida quando $\Delta/J = 0,00$ é substituída por um máximo arredondado. Nota-se também que o aumento de Δ/J implica na diminuição da intensidade do máximo em χ_3 . Agora, na

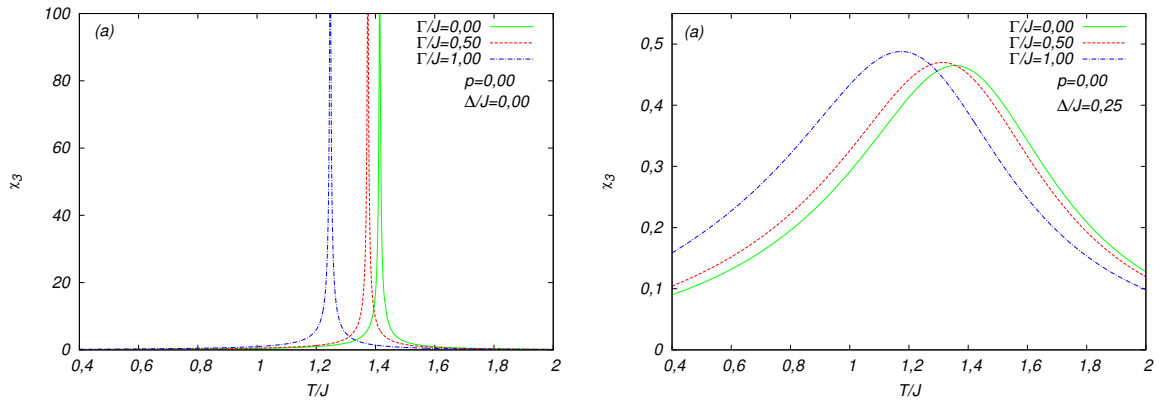


Figura 4.4 - Susceptibilidade magnética não linear *vs* temperatura, para $p = 0,00$. Em (a) para $\Delta/J = 0,00$ e em (b) $\Delta/J = 0,25$. Em ambos os casos nas linhas sólidas verdes tem-se $\Gamma/J = 0,00$, tracejadas vermelhas $\Gamma/J = 0,50$ e pontilhada/tracejada azuis $\Gamma/J = 1,00$.

figura 4.4 temos a susceptibilidade não linear como função da temperatura, para $p = 0,00$ e valores distintos de Γ/J . Em ambas figuras 4.4 (a) e 4.4 (b), as linhas sólidas verdes indicam os resultados para $\Gamma/J = 0,00$, as tracejadas vermelhas para $\Gamma/J = 0,50$ e as pontilhadas/tracejadas azuis para $\Gamma/J = 1,00$. Na figura 4.4 (a) podemos observar o comportamento de χ_3 para $\Delta/J = 0,00$, onde χ_3 apresenta uma divergência, indicando uma transição de fase e marcando T_f . Tal divergência persiste indiferentemente do valor atribuído a Γ/J , o que mostra mais uma vez que a variação de Γ/J não altera a forma de χ_3 . Porém, o aumento de Γ/J causa uma diminuição na temperatura de transição de fase. Já na figura 4.4 (b) temos o comportamento de χ_3 para $\Delta/J = 0,25$. Neste, observa-se que a forma de χ_3 é a de um máximo arredondado. Pode-se notar também que o aumento de Γ/J ocasiona um aumento na intensidade do máximo, assim como a diminuição da temperatura onde o máximo é encontrado. Particularmente, Γ/J varia a amplitude de χ_3 somente quando $\Delta/J > 0,00$.

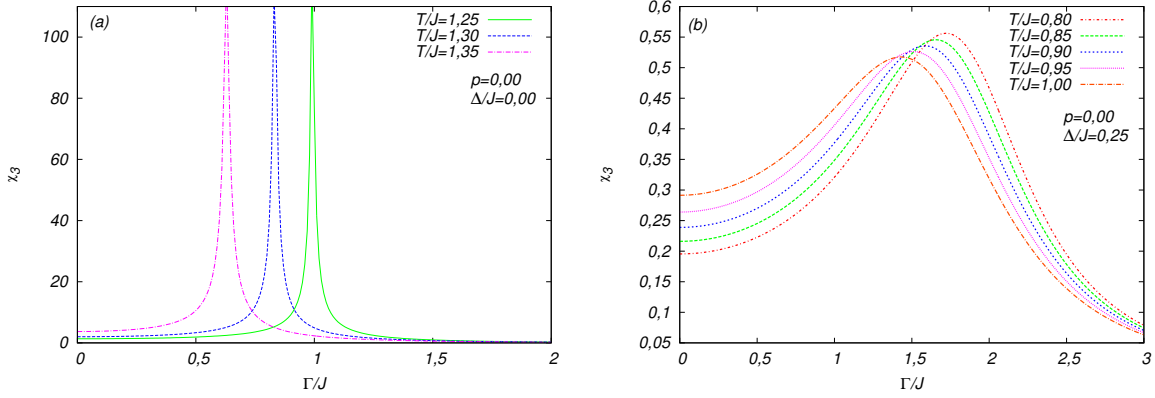


Figura 4.5 - Susceptibilidade magnética não linear *vs* Γ/J para valores distintos de T/J . Em (a) para $\Delta/J = 0,00$ e $p = 0,00$ e em (b) $\Delta/J = 0,25$ e $p = 0,00$.

Nas figuras 4.6, temos o comportamento da susceptibilidade não linear como uma função do campo transverso, para o caso em que $p = 0,00$. Na figura 4.6 (a) temos o comportamento de χ_3 *vs* Γ/J para três valores de temperatura distintas, e para $\Delta/J = 0,00$. Pode-se notar que quando $\Delta/J = 0,00$ a susceptibilidade não linear apresenta uma divergência para um determinado valor de Γ/J , o qual é denominado campo transverso crítico, para o qual a transição de fase VS/PM ocorre. Ainda na figura 4.6 (a) podemos observar que o aumento da temperatura implica em uma diminuição do Γ/J crítico, para o qual a transição VS/PM ocorre. Na figura 4.6 (b), o valor do campo aleatório é alterado, sendo $\Delta/J = 0,25$, o que resulta na mudança da forma de χ_3 . Pode-se notar ainda, que o aumento da temperatura resulta na diminuição da intensidade do máximo arredondado de χ_3 , assim como na diminuição do valor de Γ/J , no qual o máximo se encontra.

De forma geral o que concluímos desta seção é que a forma das susceptibilidades magnéticas é alterada apenas quando $\Delta \neq 0,00$. Nota-se também que para $\Delta/J = 0,00$ o aumento de Γ/J implica na diminuição da temperatura onde localiza-se o pico de χ_1 , bem como a divergência de χ_3 . Para os resultados em que $\Delta/J \neq 0,00$ nota-se que as formas de χ_1 e χ_3 sofrem alteração. Nestes casos o aumento de Γ/J implica na diminuição da intensidade dos máximos de χ_1 e χ_3 bem como na diminuição da temperatura onde estes máximos se localizam.

4.2 Resultados para $p > 0,00$.

Nesta seção, os resultados são obtidos para $p > 0,00$. Em grande parte destes, trazemos o comparativo entre os resultados para $p = 0,00$ e $p > 0,00$. Para os resultados em que $p = 1,00$, temos que os spins não estão sob influência de Γ/J , esse limite pode ser comparado com uma abordagem semi-clássica. Sendo assim, os resultados obtidos para $p = 1,00$ podem ser comparados de forma qualitativa com aqueles obtidos no trabalho da

referência [14]. O diferencial do atual trabalho está na análise de valores intermediários de p , onde $0,00 < p < 1,00$. Salienta-se que as referências [16] e [14] analisaram resultados que podem ser mapeados aos limites onde $p = 0,00$ e $p = 1,00$, respectivamente.

Na figura 4.6 (a), verifica-se que para $\Gamma/J = 0,00$, a localização do pico e consequentemente T_f não dependem de p , uma vez que há sobreposição entre linha cheia ($p = 0,00$) e pontilhada ($p = 0,50$). Em adição, a inserção mostra que Δ/J altera a forma de χ_1 . Porém, na comparação entre linha cheia e pontilhada, é visto novamente que valores distintos de p produzem resultado idêntico para χ_1 , mesmo quando $\Delta/J > 0,00$. Em linhas gerais, quando $\Gamma/J = 0,00$, pode ser verificado que p não é capaz de realizar nenhuma alteração no comportamento de χ_1 mesmo para $\Delta > 0,00$. Este resultado está relacionado com a escolha das distribuições de probabilidades para os campos aleatórios, como pode ser visto nas equação de 3.3 a 3.5, assim como na equação 3.33. Na figura 4.6 (b), verifica-se que para $\Gamma/J = 1,25$, T_f possui uma dependência com p . No comparativo entre as figuras 4.6, (a) e (b), pode ser visto também uma dependência do T_f em relação a Γ/J mesmo para $p = 0,00$. Por outro lado, não há mudança no χ_1 quanto a sua forma. Este ainda apresenta um pico mesmo a partir da variação de p e Γ/J .

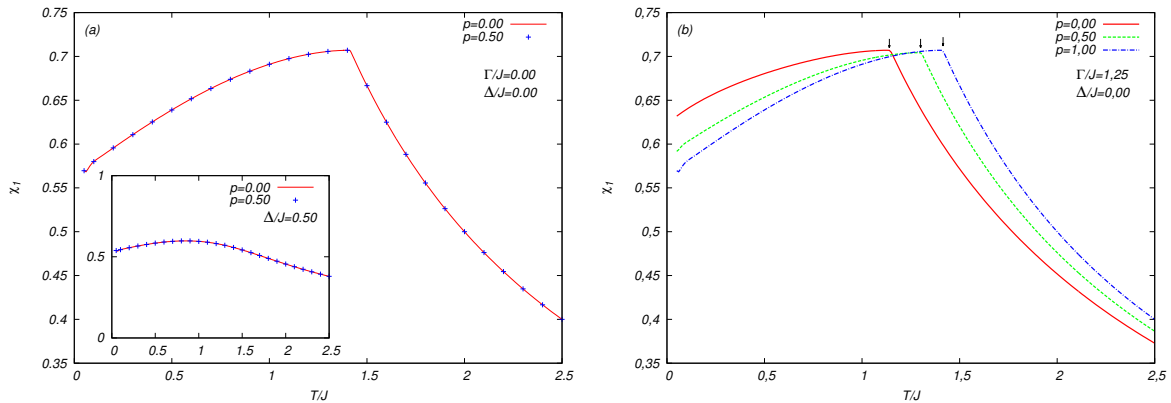


Figura 4.6 - Susceptibilidade magnética linear como função da temperatura, para $\Delta/J = 0,00$. Em (a) para $\Gamma/J = 0,00$ onde a linha cheia vermelha equivale a $p = 0,00$ e o símbolo (+) a $p = 0,50$; na janela observa-se χ_1 vs T para para $\Gamma/J = 0,00$ onde a linha cheia vermelha equivale a $p = 0,00$ e o símbolo (+) a $p = 0,50$. Em (b), $\Gamma/J = 1,25$, a linha vermelha sólida equivale a $p = 0,00$, verde tracejada a $p = 0,50$ e a linha azul pontilhada/tracejada a $p = 1,00$. Em ambos os gráficos as temperaturas de transição de fase para cada caso é indicada pela seta.

Contudo, a susceptibilidade magnética linear apresenta uma mudança drástica em sua forma com aplicação de Δ/J , como pode ser observado na figura 4.7. Nesse caso, o pico em χ_1 dá lugar a um máximo, em comparação com a figura 4.7. Em adição, nota-se a dependência de T que indica o máximo com p quando $\Gamma/J > 0,00$.

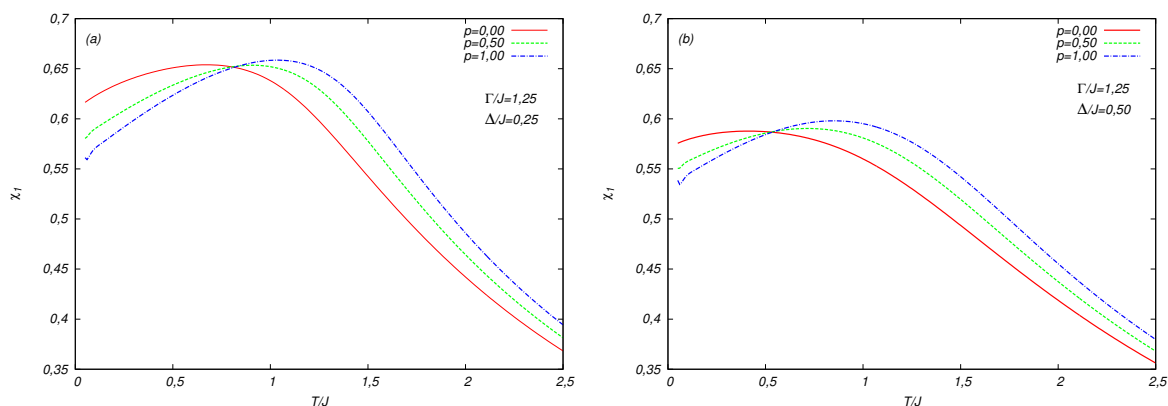


Figura 4.7 - Susceptibilidade magnética linear *vs* temperatura, para $\Gamma/J = 1,25$. Em (a) para $\Delta/J = 0,25$ e em (b) $\Delta/J = 0,50$, em ambos os casos nas linhas sólidas vermelhas equivalem a $p = 0,00$, tracejada verdes a $p = 0,50$ e pontilhada/tracejadas azuis a $p = 1,00$.

Na figura 4.8, observa-se o comportamento da susceptibilidade magnética não linear para $\Delta/J = 0,00$, $\Gamma/J = 0,00$, $p = 0,00$ e $p = 0,50$ em (a) e $\Delta/J = 0,00$, $\Gamma/J = 1,25$, $p = 0,00$, $p = 0,50$ e $p = 1,00$ em (b). Pode-se observar que nos dois casos, $\Gamma/J = 0,00$ e $\Gamma/J = 1,25$, χ_3 apresenta divergência na temperatura de transição de fase T_f . Porém, quando $\Gamma = 0,00$ e $\Delta/J = 0,00$, o valor da temperatura para o qual ocorre a transição é o mesmo para qualquer valor de p . No entanto, quando $\Gamma/J > 0,00$ e $\Delta/J = 0,00$, observa-se a dependência de T_f com p .

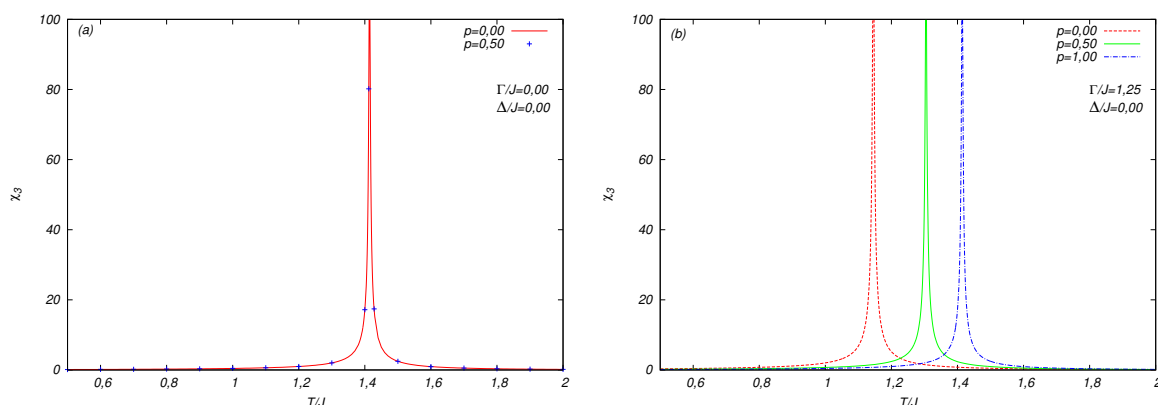


Figura 4.8 - Susceptibilidade magnética não linear como função da temperatura, para $\Delta/J = 0,00$. Em (a) para $\Gamma/J = 0,00$ onde a linha cheia vermelha equivale a $p = 0,00$ e o símbolo (+) em azul a $p = 0,50$. Em (b), $\Gamma/J = 1,25$, linha vermelha tracejada equivale a $p = 0,00$, verde sólida a $p = 0,50$ e a linha azul pontilhada/tracejada a $p = 1,00$.

Para $\Delta/J > 0,00$, conforme figura 4.9, pode ser visto que a divergência em χ_3 dá lugar a uma máxima arredondado. Este máximo arredondado encontra-se a uma

temperatura T^* , menor que a temperatura da divergência em χ_3 vista na figura 4.8, quando $\Delta/J = 0,00$. Conforme figura 4.9, pode-se notar que, para ambos $\Delta/J = 0,25$ e $\Delta/J = 0,50$, o aumento de p eleva a temperatura do máximo e ocasiona uma diminuição na intensidade do máximo de χ_3 . Pode-se salientar que este máximo não localiza a transição de fase, conforme já discutido nas referências [14] e [16].

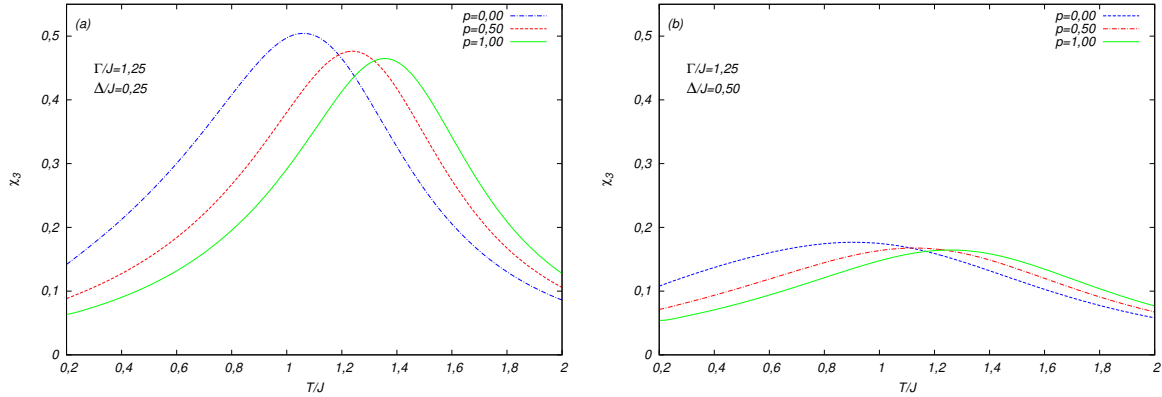


Figura 4.9 - Susceptibilidade magnética não linear *vs* temperatura, para $\Gamma/J = 1,25$. Em (a) para $\Delta/J = 0,25$ e em (b) $\Delta/J = 0,50$, em ambos os casos nas linhas azuis tem-se $p = 0,00$, vermelhas $p = 0,50$ e verdes $p = 1,00$.

A figura 4.10 mostra o comportamento da susceptibilidade magnética não linear *vs* Γ/J para valores distintos do parâmetro p . Na figura 4.10 (a) temos $\Delta/J = 0,00$ e uma temperatura de $T/J = 1,30$. Como visto até o presente momento, para $\Delta/J = 0,00$ a susceptibilidade não linear apresenta divergência em um Γ/J crítico de transição. Podemos observar também que o Γ/J crítico possui uma dependência com o parâmetro p . Particularmente, o aumento de p resulta em um aumento do Γ/J crítico. No caso da figura 4.10 (b), temos $\Delta/J = 0,25$ e $T/J = 0,90$. Como esperado, a forma da susceptibilidade não linear é alterada para $\Delta/J \neq 0,00$ para $p \neq 0,00$, assim como no caso em que $p = 0,00$. Neste caso, assim como nos resultados anteriores, a relação de dependência entre p e Γ/J se mantém. Logo, o aumento de p ocasiona um aumento no valor de Γ/J onde o máximo de χ_3 é localizado, bem como uma diminuição na intensidade desse máximo.

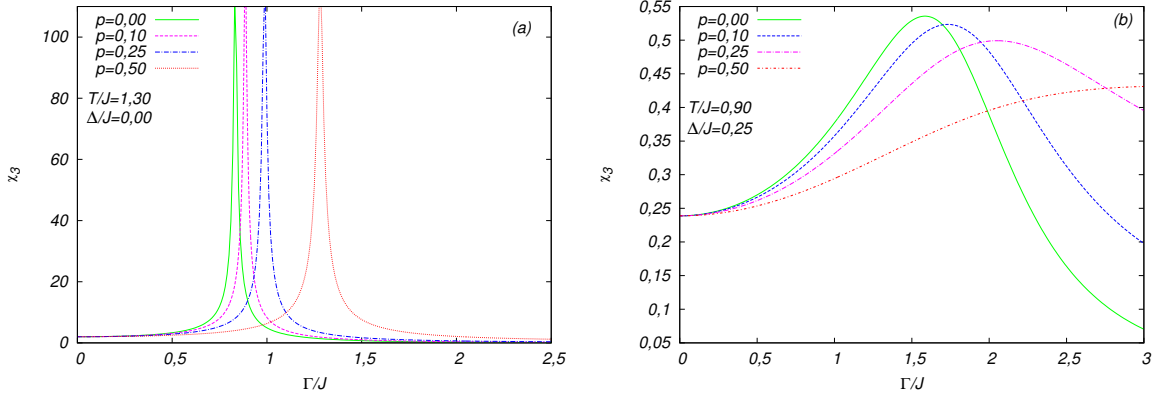


Figura 4.10 - Susceptibilidade magnética não linear $vs \Gamma/J$ para valores distintos do parâmetro p . Em (a) para $\Delta/J = 0,00$ e $T/J = 1,30$ e em (b) $\Delta/J = 0,25$ e $T/J = 0,90$.

Através do comportamento do parâmetro de ordem q e da linha λ_{AT} , os diagramas de fase $T/J vs \Gamma/J$ e $T/J vs \Delta/J$, com o objetivo de analisar os efeitos de Δ/J , Γ/J e p na temperatura de transição de fase, são contruídos. Nos diagramas, as linhas indicam a transição da fase Vidro de Spin para a fase Paramagnética (VS/PM).

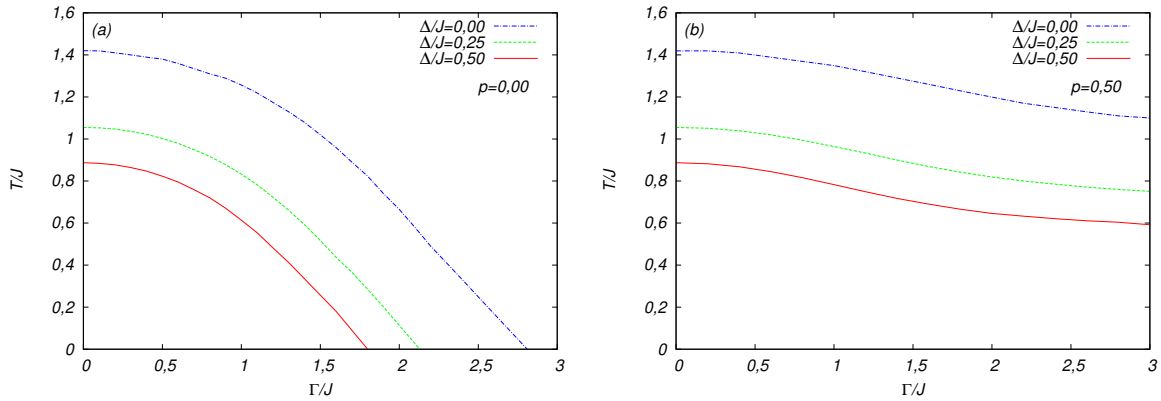


Figura 4.11 - Diagrama de fase $T/J vs \Gamma/J$ para: (a) $p = 0,00$ e (b) $p = 0,50$. Em ambos os casos as linhas vermelhas correspondem a $\Delta/J = 0,00$, verdes a $\Delta/J = 0,25$ e azuis a $\Delta/J = 0,50$. Nestes casos, as linhas indicam uma transição VS/PM com o aumento de T/J e Γ/J .

Na figura 4.11 (a) temos o diagrama de fases $T/J vs \Gamma/J$ para $p = 0,00$ e diferentes valores de Δ/J . Para $\Delta/J = 0,00$, pode ser visto que o aumento de Γ/J diminui T_f até a ocorrência de uma transição de fase a temperatura nula ($T = 0,00$), ponto este conhecido como ponto crítico quântico (PCQ) [24]. Em adição, é observado que o aumento de Δ/J diminui T_f , fazendo com que a área da região vidro de spin diminua. Por outro lado, ainda é obtida uma transição de fase em $T = 0,00$ com aumento

de Γ/J para $\Delta/J > 0,00$. Desta maneira, não há a ocorrência de uma transição de fase com temperatura nula. Já na figura 4.11 (b), é mostrado o diagrama de fases T/J vs Γ/J para $p = 0,50$ para vários Δ/J . Neste resultado, verifica-se que T_f não apresenta uma forte dependência em relação a Γ/J , quando comparado ao caso $p = 0,00$. Como consequência, para o intervalo calculado, não é possível verificar a existência do PCQ. Em adição, o aumento de Δ/J diminui o T_f . Porém, nesta situação, a fraca dependência de T_f em relação a Γ/J ainda é mantida, não sendo verificado um PCQ para o intervalo calculado.

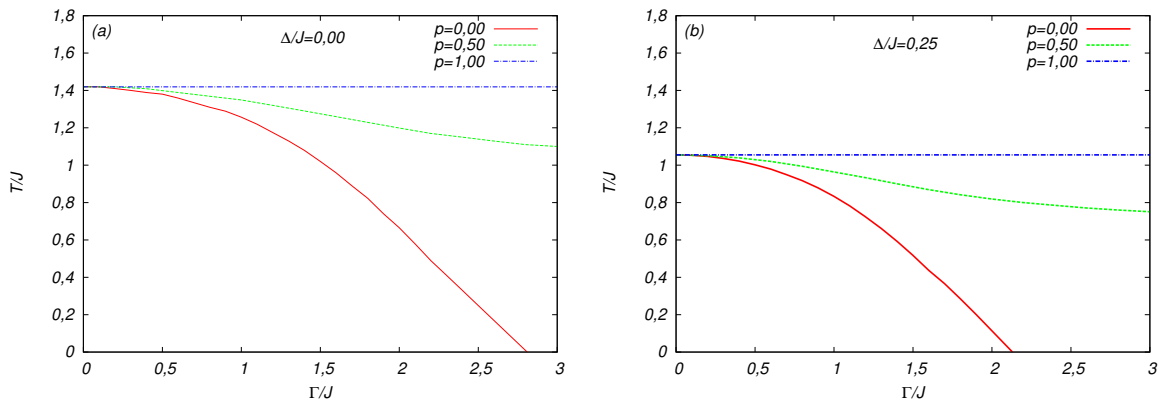


Figura 4.12 - Diagrama de fase T vs Γ/J para: (a) $\Delta/J = 0,00$ e (b) $\Delta/J = 0,25$. Em ambos os gráficos as linhas vermelhas correspondem a $p = 0,00$, verdes a $p = 0,50$ e azuis a $p = 1,00$. Nas figuras acima as linhas indicam uma transição VS/PM, com o aumento de T/J e Γ/J

Na figura 4.12, diagramas de fase T/J vs Γ/J para Δ/J fixo e valores distintos de p são mostrados. Na figura 4.12 (a), em que $\Delta/J = 0,00$, o efeito de p sobre T_f pode ser visto em mais detalhes. Em particular, é destacado que para $p = 0,00$, pode-se interpretar que todos os sítios estão sob influência do Γ/J . Por outro lado, $p = 0,50$ implica em influência parcial do Γ/J sobre a transição. Finalmente, $p = 1,00$ significa que não há influência do Γ/J sobre T_f , ou seja, a transição ocorre para um mesmo T independente de Γ/J . Na figura 4.12 (b) é mostrado que o aumento de Δ/J diminui T_f , mas o efeito do p sobre T_f é similar a aquele visto para o caso $\Delta/J = 0,00$.

Na figura 4.13, o diagrama de fases T/J vs Δ/J para $p = 0,00$ e $\Gamma/J = 0,00$ é mostrado. O objetivo deste resultado é mostrar que Δ/J diminui o T_f . Contudo, pode ser observado que T_f se torna mais fracamente dependente de Δ/J a medida que este parâmetro aumenta.

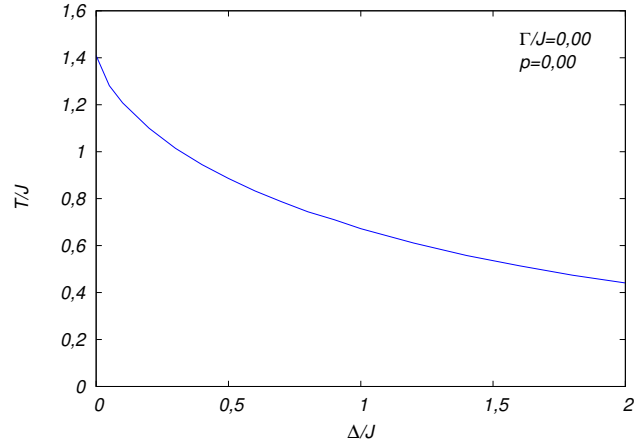


Figura 4.13 - Diagrama de fase T/J vs Δ/J para $\Gamma/J = 0,00$ e $p = 0,00$.

Até o momento vimos quais os mecanismos que causam a mudança na forma da susceptibilidade não linear. Porém, um ponto muito importante deste trabalho é a análise dos comportamentos das temperaturas de transição de fase T_f (de transição de fase) e T^* (máximo do χ_3). Na figura 4.14, temos os comportamentos de λ_{AT} e χ_3 , através dos quais são demarcados os valores T_f e T^* , neste caso para $\Gamma/J = 1,20$, $p = 0,00$ e $\Delta/J = 0,25$. Particularmente na figura 4.14 (a) temos o comportamento do parâmetro de ordem q e da linha λ_{AT} , estes dois parâmetros são utilizados na demarcação de T_f . A transição VS/PM ocorre na temperatura em que o parâmetro q deixa de ser zero, ou na temperatura em que $\lambda_{AT} = 0,00$. No caso da figura 4.14 (a) a transição é marcada através de λ_{AT} , como indicado pela seta no gráfico. A demarcação da transição através de λ_{AT} ocorre quando $\Delta/J \neq 0,00$, porque nestes casos Δ/J induz o parâmetro q , de modo que o parâmetro q não possui valor nulo para nenhuma região de T/J . Sendo assim, através de $\lambda_{AT} = 0,00$, temos que $T_f = 0,72J$. Na figura 4.14 (b), temos o comportamento da susceptibilidade não linear, onde o máximo localiza-se em $T^* = 1,09J$. A partir da varredura destes parâmetros para diversos valores de Γ/J , o diagrama de fases, para T_f e T^* pode ser construído.

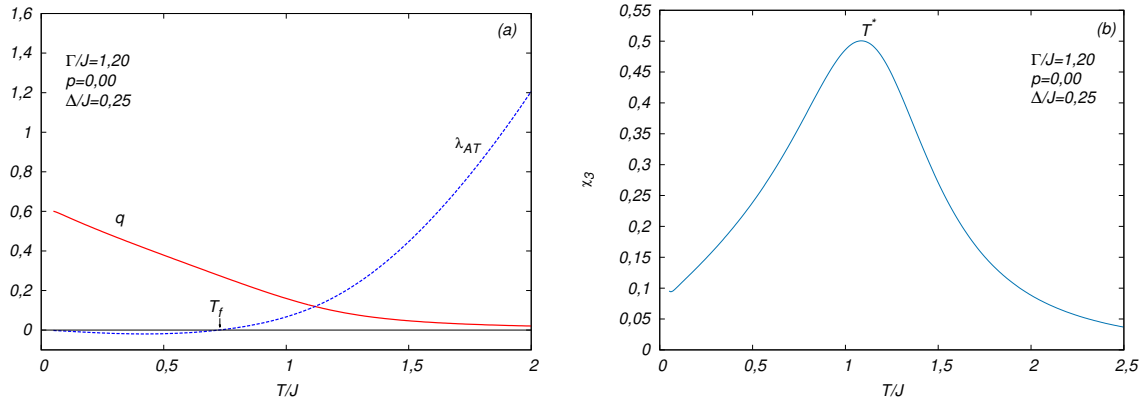


Figura 4.14 - Em (a) Parâmetros q e λ_{AT} vs T/J , no qual a temperatura de transição de fase T_f é indicada pela seta. Em (b) χ_3 vs T/J , onde o máximo em χ_3 localiza a temperatura T^* . Em ambos os casos para $\Gamma/J = 1,20$, $p = 0,00$ e $\Delta/J = 0,25$

Na figura 4.15 temos os diagramas de fase T/J vs Γ/J para p igual a 0,00 e 0,50. Nesse resultado, a linha sólida vermelha demarca o T_f e a linha tracejada azul marca o T^* . Em ambos os gráficos da figuras 4.15 o campo aleatório $\Delta/J = 0,25$. No caso da figura 4.15 (a), temos o diagrama para $p = 0,00$. Neste caso, podemos observar que tanto para T_f , quando para T^* , o aumento do campo transversal leva o sistema a um PCQ. Na figura 4.15 (b), temos o diagrama para $p = 0,50$, nota-se que o aumento de Γ/J não leva o sistema a um PCQ. Portanto, para $p > 0,00$, sugere-se que as flutuações quânticas não são suficientes para levar o sistema à uma transição de fase a temperatura nula.

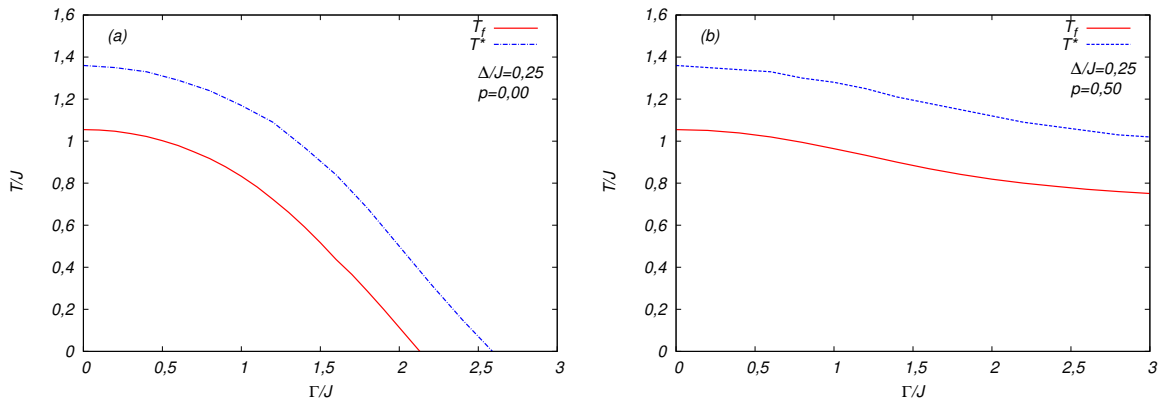


Figura 4.15 - Diagrama de fase T_f/J vs Γ/J (linha sólida vermelha) e T^*/J vs Γ/J (linha tracejada azul), para $\Delta/J = 0,25$. Em (a) para $p = 0,00$ e em (b) para $p = 0,50$.

Podemos observar que os resultados obtidos neste trabalho podem ser comparados qualitativamente com os obtidos nas referências [14] e [16], nos limites para $p = 1,00$

e $p = 0,00$, respectivamente. Mais importante, trazemos resultados novos quando se trata de valores intermediários de p , bem como novos detalhes que dizem respeito a relação entre Δ/J e Γ/J . Particularmente, os resultados mostraram que a aplicação somente do campo transversal aleatório não produz mudança nas formas de χ_1 e χ_3 para $\Delta/J = 0,00$, o que é condizente com os resultados das referências [14] e [16]. Essencialmente, χ_1 e χ_3 tem suas formas alteradas apenas com $\Delta/J \neq 0,00$. Por outro lado, os ajustes de p e Γ/J implicam nas alterações nas intensidades de χ_1 e χ_3 quando na presença de campo aleatório longitudinal. Em adição, o parâmetro p possui uma relação entre a temperatura de transição de fase e o campo transversal crítico de transição. Podemos verificar que o aumento do p resulta no acréscimo da temperatura de transição de fase, bem como no aumento de Γ/J crítico. Em relação as transições de fase, verificamos uma transição de fase vidro de spin-paramagnética através da existência da linha λ_{AT} , a qual é localizada abaixo da temperatura T^* onde se localiza o máximo do χ_3 . Em relação a figura 4.15, indicamos que a linha demarcada através de T^* não marca uma verdadeira transição de fase, e sim uma singularidade dentro da fase paramagnética, conhecida como fase de Griffiths [14,16].

Como foi discutido no capítulo 2, seção 2.5, há uma controvérsia, tanto teórica quanto experimental, relacionada com as fases magnéticas e com o comportamento de algumas grandezas físicas do composto de $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$, quando sobre a presença de um campo magnético transversal [11–17, 23, 31, 34]. Dentro deste contexto, três pontos importantes relacionados a essa controvérsia foram destacados na seção 2.5.

Em um primeiro momento, temos a mudança no comportamento da susceptibilidade magnética não linear. Esta quantidade apresenta uma divergência indicando uma transição de fase vidro de spin, em uma temperatura T_f , na ausência de campo transversal aplicado. Quando na presença do campo transversal, a divergência é substituída por um máximo arredondado, o qual se localiza em uma temperatura T^* . Essa temperatura T^* é menor que a temperatura T_f , sem campo transversal. A partir dos nossos resultados, pudemos concluir que tal mudança no comportamento de χ_3 ocorre apenas quando há a ação do campo aleatório longitudinal, $\Delta/J > 0,00$. Tal comportamento ocorre tanto no limite semi-clássico como no quântico, onde $p = 1,00$ e $p = 0,00$, respectivamente. Estes resultados, estão em concordância com alguns autores [11, 13–16, 23, 31], os quais afirmam que o campo transversal induz campos aleatórios dentro do material, gerando esta mudança no comportamento de χ_3 . Outra questão levantada na seção 2.5 é qual o significado da temperatura T^* . Assim como nas referências [14] e [16], observamos que esta temperatura não é uma temperatura de transição de fase. Na verdade, ela configura alterações nas correlações da fase paramagnética, indicando assim uma fase de Griffiths [14, 16]. Essa variação nas correlações foi observada para os limites de $p = 0,00$ e $p = 1,00$.

Uma outra questão importante apresentada na seção 2.5, é a relação entre a temperatura e o campo transversal, no diagrama de fases do composto de $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$.

Neste caso, o aumento do campo transversal ocasiona uma diminuição da temperatura de transição de fase, T_f . Esta diminuição de T_f com o aumento do campo transversal leva o sistema a um ponto crítico quântico, no qual há transição de fase a temperatura nula. Através das nossas análises observamos que o aparecimento do PCQ está diretamente relacionado com o limite quântico, no qual $p = 0,00$. Neste limite, todos os spins estão sob a influência do campo transversal. Nos casos, em que $p > 0,00$, limites intermediários e semi-clássico ($p = 1,00$) não há a obtenção do PCQ. Porém, em todos os casos $p = 0,00$, $p > 0,00$ e $p = 1,00$ o modelo proposto neste trabalho conseguiu demarcar as transições de fase VS/PM, mostrando assim que há transição vidro de spin.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Como visto no capítulo 2 seção 2.2, a fase magnética vidro de spin possui alguns comportamentos característicos que foram observadas experimentalmente, como pico e divergência na susceptibilidade magnética linear e não linear, respectivamente. Observa-se também uma remanência para $T < T_f$ [1, 3]. De forma geral, duas componentes são necessárias para que um sistema apresente a fase vidro de spin: aleatoriedade nas interações de spin e frustração [1]. Desta forma, ao longo dos anos diversos modelos teóricos com diferentes abordagens foram propostos com o objetivo de tentar entender a fase vidro de spin, como pode ser visto ainda no capítulo 2, seção 2.4. Na seção 2.4.3 discorreremos a respeito do modelo vidro de spin de Ising SK, o qual é um modelo muito referenciado quando trata-se de problemas vidro de spin dentro de uma abordagem clássica. Porém, com o passar dos anos, novos sistemas apresentaram a fase vidro de spin. Sendo assim, outras questões a respeito deste problema começaram a ser analisadas. A partir de novas abordagens, diversos fenômenos foram estudados, como a relação entre transições de fase e potencial químico [28], bem como efeitos relacionados a flutuações quânticas [24] e transições de fase a temperatura nula [23]. Desta forma, novos modelos foram propostos como o modelo Vidro de Spin de Ising Fermiônico, descrito na seção 2.4.4 do capítulo 2, para o estudo destes fenômenos.

Pode ser enfatizado que diversos sistemas apresentam a fase vidro de spin [1, 3]. Porém, nas últimas décadas o composto de $LiHo_xY_{1-x}F_4$ tem sido o objeto central de inúmeras discussões. Essencialmente, tal composto apresenta certos comportamentos divergentes, quando sob ação de campo magnético transversal [12, 15, 31]. Como vimos ao longo deste trabalho, a fase vidro de spin é demarcada através da presença de comportamentos característicos de algumas grandezas físicas, como por exemplo o comportamento das susceptibilidades magnéticas linear e não linear [1, 3]. Para campo transversal nulo, o composto de $LiHo_xY_{1-x}F_4$ apresenta uma fase vidro de spin, onde a temperatura de transição de fase T_f é indicada através da divergência na susceptibilidade não linear. Porém, quando o campo transversal não é nulo, a divergência na susceptibilidade não linear é substituída por um máximo arredondado, este máximo localiza-se em uma temperatura T^* , a qual é menor que a temperatura de transição de fase quando o campo transversal é nulo, ou seja $T^* < T_f$ [11]. Outro fenômeno que surge no composto de $LiHo_xY_{1-x}F_4$, relacionado ao campo transversal, ocorre quando o aumento deste leva o sistema a uma transição de fase a temperatura nula, indicando um ponto crítico quântico (PCQ) [11]. Alguns trabalhos se destacaram na tentativa de descrição teórica do composto de $LiHo_xY_{1-x}F_4$ com aplicação de campo transversal, como pode ser visto de forma resumida na seção 2.5 do capítulo 2. Estes propuseram abordagens semi-clássica e quântica para a descrição deste sistema.

Nos trabalhos citados, em particular nas referências [15] e [16], e a fim de explicar a mudança no comportamento da susceptibilidade não linear no composto $LiHo_xY_{1-x}F_4$, sugerem uma indução de campos aleatórios longitudinais por meio da aplicação de campos transversos nesses sistemas. Por outro lado, a mudança no comportamento de χ_3 levantou dúvidas acerca da transição de fase. Como consequência, podemos dividir os resultados em dois grupos: os que propuseram uma descrição onde há transição de fase vidro de spin na presença de campo aleatório, como é o caso das referências [14] e [16], e em um segundo grupo as referências [31] e [15], os quais na abordagem proposta, não obtiveram uma transição de fase vidro de spin no composto de $LiHo_xY_{1-x}F_4$ quando na presença de campo aleatório. Ainda que as abordagens [15] e [16] indiquem claramente a presença da linha λ_{AT} e portanto da transição de fase na presença de campos aleatórios, questões relacionadas a aleatoriedade e a presença do máximo em χ_3 ainda permanecem em aberto.

Portanto, para procurar elucidar as questões acima mencionadas, no presente trabalho o modelo vidro de spin de Ising fermiônico com ambos os campos transversos e longitudinal aleatórios foi utilizado. Esta abordagem permite investigar profundamente a questão da aleatoriedade. Neste caso, o Hamiltoniano possui quatro termos distintos referentes, ao vidro de spin, campo transversos aleatório, campo longitudinal aleatório e campo longitudinal fixo. O tratamento analítico deste Hamiltoniano começa a partir da função de partição para sistemas com muitos corpos. As técnicas para a obtenção desta função de partição encontram-se especificadas ao longo do anexo A. A abordagem atual tem como base a referência [16], a qual apresentou resultados teóricos qualitativamente satisfatórios quando comparados aos resultados experimentais para o composto $LiHo_xY_{1-x}F_4$. Um dos objetivos da utilização de ambos os termos de campos transversos e longitudinal aleatórios era a verificação em detalhes dos efeitos do campo aleatório transversos sobre a transição de fase e o comportamento da susceptibilidade não linear. Destaca-se, portanto, uma análise detalhada dos efeitos dos parâmetros Δ/J , Γ/J e p sobre a transição de fase e as susceptibilidades a partir dos resultados obtidos. Em adição, diagramas de fase também foram construídos.

Com o objetivo de analisarmos com maior clareza os resultados obtidos, estes foram divididos em duas seções. Resultados para $p = 0,00$ e $p > 0,00$, onde o parâmetro p é a fração de spins sob a influência do campo transversos. Para o caso onde $p = 0,00$, nota-se que o aumento de Γ/J diminui a temperatura de transição de fase vidro de spin-paramagnética, assim como indicam as referências [14] e [16]. Podemos observar também que o aumento contínuo de Γ/J leva o sistema a um ponto crítico quântico (PCQ), como discutido em [23]. Ao longo da seção 4.1 do capítulo 4, podemos observar que as susceptibilidades magnéticas linear e não linear não sofrem alteração em suas formas com o ajuste de Γ/J para p e Δ/J nulos. Sendo assim, mesmo com a variação de Γ/J , χ_1 apresenta um pico em T_f , da mesma forma χ_3 apresenta divergência em T_f . Por outro lado, pode-

se observar também que para $p = 0,00$ e $\Delta/J > 0,00$ tais quantidades termodinâmicas mudam sua forma, e o pico em χ_1 e a divergência em χ_3 são substituídos por máximos arredondados. Tais resultados estão de acordo com as referências [31], [15] e [16], as quais indicam que a alteração nas formas de χ_1 e χ_3 se dão somente por causa da presença de campos aleatórios, já que a alteração no campo transversal não causa tal mudança na forma das susceptibilidades.

Tratando-se da segunda seção de resultados, seção 4.2 do capítulo 4, onde a fração de spins sob a influência do campo transversal é variada, podemos concluir de forma geral que há uma dependência entre p e Γ/J , quando $\Gamma/J > 0,00$ no que diz respeito a localização da divergência do χ_3 e portanto do T_f . Nota-se através dos gráficos das susceptibilidades como funções de T/J (ou Γ/J) para um Δ/J fixo, que o aumento de p ocasiona um aumento na temperatura de transição de fase T_f (ou no Γ/J crítico de transição). Contudo, pode-se observar também que o pico e a divergência nas susceptibilidades linear e não linear, respectivamente, só tem suas formas alteradas no caso em que $\Delta/J > 0,00$, mesmo quando $p > 0,00$. Através dos resultados, podemos concluir que além de alterar a forma das susceptibilidades, o aumento de Δ/J para um p fixo implica em uma diminuição na intensidade dos máximos, que substituem o pico em χ_1 e a divergência em χ_3 quando $\Delta/J = 0,00$. Em relação a susceptibilidade não linear podemos ressaltar também, que no caso em que Δ/J e T/J são fixos, o aumento de p gera um aumento no valor de Γ/J onde se localiza o máximo e uma diminuição na intensidade de χ_3 . Já quando $p > 0,00$ o aumento de Γ/J não leva o sistema a um PCQ.

Uma questão persistente ao longo da motivação deste trabalho bem como nas referências aqui utilizadas, é o significado da temperatura T^* do máximo da susceptibilidade não linear. Para tentar esclarecer essa questão, um diagrama T/J vs Γ/J para $\Delta/J = 0,25$ foi construído, no qual duas linhas distintas estão demarcadas. Uma das linhas corresponde aos valores de T_f , demarcados através do parâmetro q ou da linha λ_{AT} . A outra linha corresponde aos valores onde os máximos de χ_3 estão localizados. Através dos resultados e das discussões referentes ao modelo e aos métodos de demarcação de fase, conclui-se que a linha indicada por T^* não é uma transição de fase real, como ocorre no caso da linha construída através de T_f , essa conclusão concorda com os resultados obtidos nas referências [14] e [16].

De um apanhado geral dos diagramas, conclui-se que o aumento de p destrói o ponto crítico quântico, e que o aumento de Δ/J gera uma diminuição nas temperaturas de transição de fase, o que ocasiona uma diminuição na região correspondente a fase vidro de spin. Contudo, sabemos que o parâmetro p controla a fração de spins sob influência do Γ/J . Desta forma, quando $p = 1,00$ significa ausência de Γ/J e de efeitos quânticos, sendo assim podemos considerar esse como um limite semi-clássico, e os resultados obtidos neste limite podem ser comparados qualitativamente com os da referência [14]. Por outro lado,

quando $p = 0,00$ significa total influência do Γ/J sobre o sistema, sendo então considerado o limite quântico, tais resultados podem ser equiparados com os da referência [16]. Em regimes intermediários, uma rica análise foi obtida. Verifica-se a não existência de PCQ, bem como observa-se que o ajuste simultâneo de p e Γ/J não produz alterações nas formas de χ_1 e χ_3 quando na ausência de Δ/J . Por outro lado, salienta-se que p e Γ/J influenciam a intensidade dos máximos quando na presença de Δ/J . Em relação as temperaturas T_f e T^* , conclui-se que T onde é localizada a divergência em χ_3 é uma temperatura de transição de fase. Por outro lado, T^* pode indicar uma fase de Griffiths, como sugerem as referências [14] e [16]. Em relação aos diagramas de fase, o aumento de Γ/J produz um PCQ apenas quando $p = 0,00$ independente do Δ/J . Por outro lado o aumento de Δ/J implica na diminuição da região vidro de spin, independente do valor de p . O parâmetro p , por sua vez permite que o modelo alterne entre os limites semi-clássico e quântico.

Para finalizar, os resultados obtidos podem ser então comparados dentro dos seus respectivos limites com os trabalhos [14] e [16], bem como comparados qualitativamente com aqueles obtidos experimentalmente para o composto de $LiHo_xY_{1-x}F_4$ [11,23]. Sendo assim, temos que os resultados obtidos nos limites semi-clássico e quântico estão de acordo com os vistos nas referências previamente citadas. Em contrapartida, mostramos uma série de novos resultados, relacionados com os valores intermediários de p . Em relação aos campos aleatórios transverso e longitudinal, vimos que quando $\Gamma/J \neq 0,00$, o aumento de p implica em uma mudança nos valores de temperatura nos quais os máximos, picos e divergências das susceptibilidades são encontrados, indicando uma clara relação entre p e o campo transverso, para $\Gamma/J \neq 0,00$. Porém, as formas de χ_1 e χ_3 não são alteradas para $\Delta/J = 0,00$, mesmo com a variação de p e Γ/J . Vale ressaltar que no presente trabalho os campos aleatórios transverso e longitudinal são ajustados de forma independente, diferentemente da referência [16]. Desta forma, conclui-se através dos resultados que, dentro da abordagem proposta, apenas o campo aleatório longitudinal é o responsável pelas mudanças nas formas das susceptibilidades. Essencialmente, sem considerar uma relação na forma $\Delta = \Delta(\Gamma,p)$ as formas de χ_1 e χ_3 se mantêm inalteradas quando $\Delta/J = 0,00$, mesmo que os valores atribuídos a p e Γ/J sejam modificados.

A APÊNDICE A - MODELO VIDRO DE SPIN SHERRINGTON E KIRKPATRICK (SK)

Neste apêndice vamos explicar as técnicas utilizadas por Sherrington e Kirkpatrick no tratamento analítico do Modelo Vidro de Spin de Ising proposto por eles [4,6,25]. O Hamiltoniano do Modelo SK é dado por:

$$H = - \sum_{i<j} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i. \quad (\text{A.1})$$

Neste caso, a introdução de aleatoriedade no Modelo de Ising ocorre pela substituição de uma interação de troca fixa entre os sítios J , por uma variável de interação de troca J_{ij} aleatória, que segue uma distribuição de probabilidade Gaussiana:

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} e^{-\frac{N}{2J^2} (J_{ij} - \frac{J_0}{N})^2}. \quad (\text{A.2})$$

Devido a forma do Hamiltoniano, surgem dificuldades no cálculo do $\langle \ln Z \rangle$, bem como das médias configuracionais das grandezas físicas, como a energia livre $\langle \ln Z \rangle = -\bar{\beta} \langle f \rangle$. O $\langle \ln Z \rangle$ é dado por:

$$\langle \ln Z \rangle = \int P(J_{ij}) dJ_{ij} \ln Z,$$

onde $Z = \text{Tr} e^{-\beta H}$, contudo a integral do $\langle \ln Z \rangle$ se torna problemática devido ao termo $\ln \text{Tr} e^{-\beta H}$. Por este motivo, o método das réplicas é utilizado. Este é um artifício matemático para conseguir integrar sobre J_{ij} . Nesta abordagem, o $\langle \ln Z \rangle$ é escrito como:

$$\langle \ln Z \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\langle Z^n \rangle - 1}{n}.$$

A função de partição no método das réplicas é dado por:

$$\begin{aligned} \langle \ln Z^n \rangle = & \int \left(\prod_{i<j} dJ_{ij} \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} e^{-\frac{N}{2J^2} (J_{ij} - \frac{J_0}{N})^2} \right) \\ & \times \text{Tr} \exp \left(\beta \sum_{i<j} J_{ij} \sum_{\alpha=1}^n S_i^\alpha S_j^\alpha + \beta h \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^n S_i^\alpha \right). \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Primeiramente, é resolvida a integral em J_{ij} através das integrais Gaussianas tabeladas [4]. Em seguida, os somatórios de dois sítios para um único sítio i são reescritos.

Por fim, é considerado $N \rightarrow \infty$, tal que:

$$\langle Z^n \rangle = e^{\left(\frac{\beta^2 J^2 N n}{4}\right)} \times Tr \exp \left\{ \left[\frac{\beta^2 J^2}{2N} \sum_{\alpha < \beta} \left(\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta \right)^2 + \frac{\beta J_0}{2N} \sum_\alpha \left(\sum_i S_i^\alpha \right)^2 + \beta h \sum_{i,\alpha} S_i^\alpha \right] \right\}. \quad (\text{A.4})$$

A linearização dos termos quadráticos será feita através de uma identidade matemática, conhecida como transformação de Hubbard-Stratonovich [4], dada por:

$$e^{\frac{ax^2}{2}} = \sqrt{\frac{aN}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\left[\frac{-Nam^2}{2} + \sqrt{Nam}x\right]} dm.$$

Os termos quadráticos $(\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta)^2$ e $(\sum_i S_i^\alpha)^2$ serão relacionados com os parâmetros auxiliares $q_{\alpha\beta}$ e m_α , respectivamente. A partir da linearização, e com a utilização do método ponto de sela para cálculo das integrais em m e q no limite $N \rightarrow \infty$, teremos então:

$$\langle Z^n \rangle \approx 1 + Nn \left(\frac{-\bar{\beta}^2 J^2}{4n} \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{\bar{\beta} J_0}{2n} \sum_\alpha m_\alpha^2 + \frac{1}{n} \ln Tre^L + \frac{1}{4} \beta^2 J^2 \right), \quad (\text{A.5})$$

$$-\bar{\beta} \langle f \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \left(\frac{-\bar{\beta}^2 J^2}{4n} \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{\bar{\beta} J_0}{2n} \sum_\alpha m_\alpha^2 + \frac{\bar{\beta}^2 J^2}{4} + \frac{\ln Tre^L}{n} \right). \quad (\text{A.6})$$

A Energia Livre será extremizada em relação aos parâmetros auxiliares $q_{\alpha\beta}$ e m_α . A correlações para $q_{\alpha\beta}$ é

$$q_{\alpha\beta} = \frac{Tre^L S^\alpha S^\beta}{Tre^L} = \langle S^\alpha S^\beta \rangle_L, \quad (\text{A.7})$$

e o parâmetro m_α é dado pela correlação

$$m_\alpha = \frac{Tre^L S^\alpha}{Tre^L} = \langle S^\alpha \rangle_L. \quad (\text{A.8})$$

Vale ressaltar que para todos os casos L é o Hamiltoniano Efetivo. Os parâmetros auxiliares $q_{\alpha\beta}$ e m_α que surgem devido a aproximação utilizada são na verdade os parâmetros de ordem deste modelo. Esta conclusão é obtida através do resultado do tratamento analítico e da comparação com as equações para os parâmetros de ordem do Modelo de Ising (campo médio e alcance infinito).

A utilização do método de simetria de réplicas implica que $q_{\alpha\beta}$ e m_α tenham

dependência explícita nos índices de réplicas α e β para que a energia livre e os parâmetros de ordem possam ser calculados. A dependência desses índices não deve afetar a física do sistema, pois as réplicas foram introduzidas artificialmente por conveniência do cálculo da média configuracional. Desta forma é assumida solução com a simetria de réplicas onde $q_{\alpha\beta} = q$ e $m_\alpha = m$. A partir desta condição, a solução com simetria de réplicas será obtida. Neste caso, calculando o traço da equação A.6, e linearizando os termos ao quadrado que resultaram do cálculo do traço, teremos a energia livre

$$-\bar{\beta}\langle f \rangle = \frac{\bar{\beta}^2 J^2}{4n} [-n(n-1)q^2] - \frac{\bar{\beta} J_0}{2n} nm^2 + \frac{1}{n} \ln \left[1 + n \int_{-\infty}^{\infty} DZ \ln 2 \cosh \bar{\beta} \bar{H}(z) - \frac{\bar{\beta}^2 J^2}{2} qn \right] + \frac{\bar{\beta}^2 J^2}{4}. \quad (\text{A.9})$$

Tomando o limite $n \rightarrow 0$ e utilizando $\frac{1}{n} \ln[1 + An] = \frac{1}{n} An = A$, teremos:

$$-\bar{\beta}\langle f \rangle = \frac{\bar{\beta}^2 J^2}{4} (1-q)^2 - \frac{\bar{\beta} J_0}{2} m^2 + \int_{-\infty}^{\infty} DZ \ln 2 \cosh \bar{\beta} \bar{H}(z). \quad (\text{A.10})$$

A obtenção dos parâmetros de ordem ocorre através da extremização da equação da Energia Livre em relação ao parâmetro de interesse, q e m . Desta forma

$$m = \int_{-\infty}^{\infty} DZ \tanh \bar{\beta} \bar{H}(z), \quad (\text{A.11})$$

$$q = \int DZ \tanh^2 \bar{\beta} \bar{H}(z), \quad (\text{A.12})$$

com $\bar{H}(z) = J\sqrt{q}z + J_0 m + h$.

B APÊNDICE B - EXPANSÃO DA MAGNETIZAÇÃO E OBTENÇÃO DAS SUSCEPTIBILIDADES MAGNÉTICAS

Como pode ser visto no capítulo 2, seção 2.2, as susceptibilidades magnéticas, linear e não linear são grandezas de grande importância na caracterização da fase vidro de spin. Teoricamente tais grandezas são obtidas através da expansão da magnetização:

$$m = \chi_1 h + \chi_3 h^3 + \dots \quad (\text{B.1})$$

onde:

$$\chi_1 = \left. \frac{\partial m}{\partial H_l} \right|_{H_l \rightarrow 0}, \quad (\text{B.2})$$

$$\chi_3 = - \left. \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 m}{\partial H_l^3} \right|_{H_l \rightarrow 0}. \quad (\text{B.3})$$

Nas equações acima, χ_1 e χ_3 são as susceptibilidades magnéticas linear e não linear, respectivamente [1].

Para o caso do modelo Fermiônico (Modelo 2S) para Δ e Γ nulos em que $\bar{q} = 1$, e considerando um campo externo pequeno h , a magnetização m e o parâmetro de ordem vidro de spin q podem ser expandidos na fase PM, como:

$$\begin{aligned} q(h) &= 0q_0 + 0q_1 h + q_2 h^2 + 0q_3 h^3; \\ m(h) &= \chi_1 h + \chi_3 h^3 \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Substituindo a equação B.4 em:

$$m = \int Dz \tanh(\bar{\beta}(J_1 z \sqrt{q(h)} + J_0 M(h) + h)) \quad (\text{B.5})$$

com $J_1 = J\sqrt{2}$. Depois expandindo o lado direito da equação B.5, obtêm-se:

$$\chi_1 = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial f_1(m, q)}{\partial h} = \bar{\beta} J_0 \chi_1 + \bar{\beta} \quad (\text{B.6})$$

$$\begin{aligned} \chi_3 &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial^3 f_1(m, q)}{\partial h^3} \\ &= \frac{-3\bar{\beta} J_0 \chi_3 + \bar{\beta}^3 J_0^3 \chi_1^3 + 3\bar{\beta}^3 J_0^2 \chi_1^2 + (3\bar{\beta}^3 q_2 J_1^2 + 3\bar{\beta}^3) J_0 \chi_1 + 3\bar{\beta}^3 q_2 J_1^2 + \bar{\beta}^3}{3}. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Sendo assim:

$$\chi_1 = \frac{\bar{\beta}}{1 - \bar{\beta} J_0}, \quad (\text{B.8})$$

e também:

$$\chi_3 = -\frac{1}{3} \frac{\bar{\beta}^3 J_0^3 \chi_1^3 + 3\bar{\beta}^3 J_0^2 \chi_1^2 + (3\bar{\beta}^3 J_1^2 q_2 + 3\bar{\beta}^3) J_0 \chi_1 + 3\bar{\beta}^3 J_1^2 q_2 + \bar{\beta}^3}{1 - \bar{\beta} J_0}. \quad (\text{B.9})$$

Temos que:

$$q = \int Dz \tanh^2(\bar{\beta}(J_1 z \sqrt{q(h)} + J_0 M(h) + h)). \quad (\text{B.10})$$

Expandindo o lado direito da equação B.10, o seguinte termo pode ser obtido:

$$q_2 = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial^2 f_2(m, q)}{\partial h^2} = \bar{\beta}^2 J_0^2 \chi_1^2 + 2\bar{\beta}^2 J_0 \chi_1 + \bar{\beta}^2 + \bar{\beta}^2 J_1^2 q_2, \quad (\text{B.11})$$

com:

$$q_2 = \frac{\bar{\beta}^2 J_0^2 \chi_1^2 + 2\bar{\beta}^2 J_0 \chi_1 + \bar{\beta}^2}{1 - (\bar{\beta} J_1)^2} = \frac{(\bar{\beta} J_0 \chi_1 + \bar{\beta})^2}{1 - (\bar{\beta} J_1)^2}. \quad (\text{B.12})$$

Desta forma:

$$\chi_3 = -\frac{1}{3} \frac{(\bar{\beta} J_0 \chi_1 + \bar{\beta})^3 + 3\bar{\beta}^2 (\bar{\beta} J_0 \chi_1 + \bar{\beta}) J_1^2 q_2}{1 - \bar{\beta} J_0}. \quad (\text{B.13})$$

Com $\chi_1 = \bar{\beta} J_0 \chi_1 + \bar{\beta}$, χ_3 e q_2 dados por:

$$\chi_3 = -\frac{1}{3} \frac{\chi_1^3 + 3\chi_1 (\bar{\beta} J_1)^2 q_2}{1 - \bar{\beta} J_0}, \quad (\text{B.14})$$

$$q_2 = \frac{\chi_1^2}{1 - (\bar{\beta} J_1)^2}. \quad (\text{B.15})$$

Substituindo a equação B.15 em B.14, teremos que:

$$\chi_3 = -\frac{\chi_1^3}{3(1 - \bar{\beta} J_0)} \frac{1 + 2(\bar{\beta} J_1)^2}{1 - (\bar{\beta} J_1)^2} = -\frac{\chi_1^4}{3\bar{\beta}} \frac{1 + 2(\bar{\beta} J_1)^2}{1 - (\bar{\beta} J_1)^2}. \quad (\text{B.16})$$

A susceptibilidade vidro de spin pode ser medida através da seguinte relação com χ_3 :

$$\chi_3 = \bar{\beta} \left(\chi_{vs} - \frac{2}{3} \bar{\beta}^2 \right). \quad (\text{B.17})$$

C APÊNDICE C - ESTABILIDADE DA SOLUÇÃO COM SIMETRIA DE RÉPLICAS

Em uma primeira aproximação, é empregada a solução com simetria de réplicas. Neste aproximação, a representação matricial do parâmetro de ordem $q_{\alpha\beta}$ é dada por:

$$\begin{pmatrix} q_{\alpha\alpha} & q_{\alpha\beta} & \cdots & q_{\alpha\beta} \\ q_{\alpha\beta} & q_{\alpha\alpha} & \cdots & q_{\alpha\beta} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{\alpha\beta} & q_{\alpha\beta} & \cdots & q_{\alpha\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & \cdots & q_{1n} \\ q_{21} & q_{22} & \cdots & q_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{n1} & q_{n2} & \cdots & q_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{q} & q & \cdots & q \\ q & \bar{q} & \cdots & q \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q & q & \cdots & \bar{q} \end{pmatrix}.$$

Ainda que a escolha desta parametrização resulte em bons resultados no que diz respeito a localização da transição de fase, a solução com simetria de réplicas produz valores negativos para a entropia em temperaturas muito baixas. Tal efeito sugere uma instabilidade na solução com simetria de réplicas. Por este motivo, torna-se importante encontrar a região onde a solução com simetria de réplicas é válida [26, 34]. Para isso, pequenos desvios são feitos ao redor da solução com simetria de réplica (ver equação (3.22)). Essencialmente, os pontos estacionários da equação (3.22) são perturbados pelas quantidades $(\xi_\alpha, \eta_{\alpha\beta})$. Consequentemente, o desvio $\Delta_n(\xi_\alpha, \eta_{\alpha\beta}) = \Omega_n(p_\alpha, q_{\alpha\beta}) - \Omega_n(p_\alpha + 2\xi_\alpha, q_{\alpha\beta} + \eta_{\alpha\beta})$ é obtido pela expansão de Δ_n até segunda ordem em $(\xi_\alpha, \eta_{\alpha\beta})$:

$$\Delta_n = \sum_{\alpha, \beta} G_{\alpha, \beta} \xi_\alpha \xi_\beta + 2 \sum_{\alpha, (\beta\nu)} G_{\alpha, \beta\nu} \xi_\alpha \eta_{\beta\nu} + \sum_{(\alpha\zeta), (\gamma\nu)} G_{\alpha\zeta, \gamma\nu} \eta_{\alpha\zeta} \eta_{\gamma\nu}, \quad (\text{C.1})$$

em que

$$G_{\alpha, \beta} = \frac{\delta_{\alpha, \beta}}{\beta^2 J^2} - 16 \langle \langle S_\alpha^z S_\alpha^z S_\beta^z S_\beta^z \rangle \rangle + 16 \langle \langle S_\alpha^z S_\alpha^z \rangle \rangle \langle \langle S_\beta^z S_\beta^z \rangle \rangle = (A - B) \delta_{\alpha, \beta} + B; \quad (\text{C.2})$$

$$G_{\alpha, \beta\nu} = -16 \langle \langle S_\alpha^z S_\alpha^z S_\beta^z S_\nu^z \rangle \rangle + 16 \langle \langle S_\alpha^z S_\alpha^z \rangle \rangle \langle \langle S_\beta^z S_\nu^z \rangle \rangle = \begin{cases} C & \text{se } \alpha = \beta \text{ ou } \nu \\ D & \text{se } \alpha \neq \beta \text{ e } \nu; \end{cases} \quad (\text{C.3})$$

$$G_{\alpha\zeta, \gamma\nu} = \frac{\delta_{\alpha\zeta, \gamma\nu}}{2\beta^2 J^2} - 16 \langle \langle S_\alpha^z S_\zeta^z S_\gamma^z S_\nu^z \rangle \rangle + 16 \langle \langle S_\alpha^z S_\zeta^z \rangle \rangle \langle \langle S_\gamma^z S_\nu^z \rangle \rangle = \begin{cases} P & \text{se } \alpha\zeta = \gamma\nu \\ Q & \text{se } \alpha = \gamma (\zeta \neq \nu). \\ R. & \end{cases} \quad (\text{C.4})$$

Os autovalores associados com a Matriz Hessiana estão de acordo com aqueles obtidos nas referências [26, 34]. No limite $n \rightarrow 0$, são três os autovalores distintos:

$$\lambda_\pm = [A - B + (P - 4Q + 3R) \pm \sqrt{U}]/2 \quad (\text{C.5})$$

e

$$\lambda_{AT} = P - 2Q + R, \quad (\text{C.6})$$

onde

$$U = [(A - B) - (P - 4Q + 3R)]^2 - 8(C - D)^2. \quad (\text{C.7})$$

Como resultado

$$P - 4Q + 3R = \frac{1}{2\beta^2 J^2} - \int Dz \langle [\varphi_2^2(z) - 4\varphi_2(z)\varphi_1^2(z) + 3\varphi_1^4(z)] \rangle, \quad (\text{C.8})$$

$$P - 2Q + R = \frac{1}{2\beta^2 J^2} - \int Dz \langle [\varphi_2(z) - \varphi_1^2(z)]^2 \rangle, \quad (\text{C.9})$$

$$A - B = \frac{1}{\beta^2 J^2} - \int Dz \langle [\varphi_4(z) - \varphi_2^2(z)] \rangle, \quad (\text{C.10})$$

$$C - D = \int Dz \langle [\varphi_2(z)\varphi_1^2(z) - \varphi_3(z)\varphi_1(z)] \rangle, \quad (\text{C.11})$$

em

$$\varphi_n(z) = \left[\int D\xi \frac{\partial^n}{\partial \bar{h}^n} \left(\cosh \sqrt{\bar{\Xi}(z, \xi)} \right) \right] / \bar{K}(z), \quad (\text{C.12})$$

$\bar{\Xi}(z, \xi) = \bar{h}^2(z, \xi) + \beta^2 \Gamma_i^2$ com $\bar{h}(z, \xi) = \beta J (\sqrt{2q + (\Delta/J)^2} z + \sqrt{2(p-q)} \xi)$, e

$$\bar{K}(z) = \frac{s-2}{2} \cosh \beta \mu + \int D\xi \cosh \sqrt{\bar{\Xi}(z, \xi)}. \quad (\text{C.13})$$

Basicamente, a solução estável ocorre quando os autovalores λ_{\pm} e λ_{AT} são todos positivos. No modelo fermiônico, a condição de estabilidade não é satisfeita para λ_{AT} em determinada região de T/J . Por este motivo, o limite da estabilidade será indicada a partir da linha de Almeida-Thouless [26, 34].

D APÊNDICE D - MODELO VIDRO DE SPIN FERMIÔNICO

D.1 Modelo Vidro de Spin Fermiônico com Campos Transverso e Longitudi- nal Aleatórios

Este apêndice contém material complementar, referente ao tratamento analítico do Modelo Vidro de Spin Fermiônico, tanto ao que diz respeito a revisão encontrada no Capítulo (2), seção (2.4.4). Quanto no Capítulo (3), este contendo a metodologia utilizada.

D.1.1 Frequências de Matsubara

A ação na Equação (3.7) pode ser separada em contribuições distintas, separa-se A_{y_i} em um termo A_{Γ_i} , o qual contém os termos relacionados a y_i e ao campo transverso aleatório, um termo A_{h_i} relacionado com o campo longitudinal aleatório, e por último um termo A_{v_s} relacionada com a componente vidro de spin. A componente relacionada com o campo transverso aleatório é dada por:

$$A_{\Gamma_i} = \int_0^\beta d\tau \sum_{j\sigma} \left[\phi_{j\sigma}^*(\tau) \left(-\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{y_j}{\beta} \right) \phi_{j\sigma}(\tau) + \Gamma_i \phi_{j\sigma}^*(\tau) \phi_{j-\sigma}(\tau) \right] \quad (\text{D.1})$$

A componente relacionada com o vidro de spin será:

$$A_{v_s} = \frac{1}{4} \sum_{ij} J_{ij} \sum_{\sigma\sigma'} \sigma\sigma' \phi_{i\sigma}^*(\tau) \phi_{i\sigma}(\tau) \phi_{j\sigma'}^*(\tau) \phi_{j\sigma'}(\tau). \quad (\text{D.2})$$

Da transformada de Fourier:

$$\begin{aligned} \phi_{j\sigma}^*(\tau) &= \sum_{\omega_n} e^{\frac{i\omega_n\tau}{\beta}} \phi_{j\sigma}(\omega_n) \\ \phi_{j\sigma}(\tau) &= \sum_{\omega_m} e^{-\frac{i\omega_m\tau}{\beta}} \phi_{j\sigma}(\omega_m) \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

A Equação (D.1), A_{Γ_i} torna-se [18, 24]:

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

De maneira similar, A_{vs} é então descrito em função das frequências de Matsubara, tem-se então:

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

Utilizando

$$\Omega_\gamma = \omega_p - \omega_q \quad ; \quad \Omega_\nu = \omega_r - \omega_s, \quad (\text{D.5})$$

obtem-se

$$A_{vs} = \sum_{\gamma q, \nu r} \int_0^\beta d\tau \exp\left(\frac{i\Omega_\gamma\tau}{\beta} - \frac{i\Omega_\nu\tau}{\beta}\right) \times \left\{ \frac{1}{4} \sum_{ij} J_{ij} \sum_{\sigma\sigma'} \sigma\sigma' \phi_{i\sigma}^*(\Omega_\gamma + \omega_q) \phi_{i\sigma}(\omega_q) \phi_{j\sigma'}^*(\omega_r - \Omega_\nu) \phi_{j\sigma'}(\omega_r) \right\}. \quad (\text{D.6})$$

As integrais nas Equações (D.4) e (D.6) são resolvidas através da utilização da seguinte identidade:

$$\int_{-L}^L \exp\left(\frac{in\pi x}{L} - \frac{im\pi x}{L}\right) dx = \begin{cases} 0 & \text{se } m \neq n \\ 2L & \text{se } m = n. \end{cases} \quad (\text{D.7})$$

Desta forma, $A_{\Gamma_i}(\{\Gamma_i\})$ torna-se:

$$A_{\Gamma_i}(\{\Gamma_i\}) = \sum_{j\sigma} \sum_n [\phi_{j\sigma}^*(\omega_n) (i\omega_n + y_j) \phi_{j\sigma}(\omega_n) + \phi_{j\sigma}^*(\omega_n) \beta \Gamma_i \phi_{j-\sigma}(\omega_n)]. \quad (\text{D.8})$$

A Equação (D.8) pode ser escrita em forma matricial

$$A_{\Gamma_i}(\{\Gamma_i\}) = \sum_{j,n} \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}^*(\omega_n) & \phi_{j\downarrow}^*(\omega_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} i\omega_n + y_j & \beta \Gamma_i \\ \beta \Gamma_i & i\omega_n + y_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}(\omega_n) \\ \phi_{j\downarrow}(\omega_n) \end{bmatrix}, \quad (\text{D.9})$$

onde os spinores da matriz contida em (D.9) são dados por

$$\underline{\phi}_j^\dagger(\omega_n) = \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}^*(\omega_n) & \phi_{j\downarrow}^*(\omega_n) \end{bmatrix} \quad ; \quad \underline{\phi}_j(\omega_n) = \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}(\omega_n) \\ \phi_{j\downarrow}(\omega_n) \end{bmatrix}. \quad (\text{D.10})$$

Sendo assim, $A_{\Gamma_i}(\{\Gamma_i\})$ pode ser escrito como:

$$A_{\Gamma_i}(\{\Gamma_i\}) = \sum_j \sum_n \phi_j^\dagger(\omega_n) \gamma_j^{-1} \phi_j(\omega_n). \quad (\text{D.11})$$

As matrizes de Pauli são utilizadas na representação de $\gamma_j^{-1}(\{\Gamma_i\})$ e A_{vs} , de forma que:

$$\underline{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \underline{\sigma}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} ; \quad \underline{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\text{D.12})$$

onde $\gamma_j^{-1}(\{\Gamma_i\})$ é dado por

$$\gamma_j^{-1}(\{\Gamma_i\}) = (i\omega_n + y_j) I + \beta \Gamma_i \underline{\sigma}^x, \quad (\text{D.13})$$

com I sendo a matriz identidade. Então A_{vs} será

$$A_{vs} = \sum_{ij} \beta J_{ij} \sum_{\gamma} \frac{1}{2} \sum_{\sigma q} \sigma \phi_{i\sigma}^*(\Omega_{\gamma} + \omega_q) \phi_{i\sigma}(\omega_q) \frac{1}{2} \sum_{\sigma' r} \sigma' \phi_{j\sigma'}^*(\omega_r - \Omega_{\gamma}) \phi_{j\sigma'}(\omega_r), \quad (\text{D.14})$$

em que σ indica as projeções de spin, $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow . Usando

$$\begin{aligned} S_i^z(\Omega_{\gamma}) &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma q} \sigma \phi_{i\sigma}^*(\Omega_{\gamma} + \omega_q) \phi_{i\sigma}(\omega_q), \\ S_j^z(-\Omega_{\gamma}) &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma' r} \sigma' \phi_{j\sigma'}^*(\omega_r - \Omega_{\gamma}) \phi_{j\sigma'}(\omega_r), \end{aligned} \quad (\text{D.15})$$

pode-se reescrever A_{vs} como

$$A_{vs} = \sum_{\gamma} \sum_{ij} \beta J_{ij} S_i^z(\Omega_{\gamma}) S_j^z(-\Omega_{\gamma}). \quad (\text{D.16})$$

Os operadores de spin $S_i^z(\Omega_{\gamma})$ e $S_j^z(-\Omega_{\gamma})$ possuem a seguinte forma matricial

$$S_i^z(\Omega_{\gamma}) = \begin{bmatrix} \phi_{i\uparrow}^*(\Omega_{\gamma} + \omega_q) & \phi_{i\downarrow}^*(\Omega_{\gamma} + \omega_q) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{i\uparrow}(\omega_q) \\ \phi_{i\downarrow}(\omega_q) \end{bmatrix}, \quad (\text{D.17})$$

e

$$S_j^z(-\Omega_{\gamma}) = \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}^*(\omega_r - \Omega_{\gamma}) & \phi_{j\downarrow}^*(\omega_r - \Omega_{\gamma}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}(\omega_r) \\ \phi_{j\downarrow}(\omega_r) \end{bmatrix}. \quad (\text{D.18})$$

Utilizando a notação das matrizes de spinores e Pauli, $S_i^z(\Omega_{\gamma})$ e $S_j^z(-\Omega_{\gamma})$ tornam-se:

$$S_i^z(\Omega) = \frac{1}{2} \sum_q \phi_i^\dagger(\omega_q + \Omega) \underline{\sigma}^z \phi_i(\omega_q), \quad S_j^z(-\Omega) = \frac{1}{2} \sum_r \phi_j^\dagger(\omega_r - \Omega) \underline{\sigma}^z \phi_j(\omega_r) \quad (\text{D.19})$$

onde ω e Ω são funções periódicas e antiperiódicas, definidas por $\omega_m = (2m)\pi$ e $\Omega_n = (2n+1)\pi$, respectivamente. Na aproximação estática, as flutuações de tempo nas correlações spin-spin são negligenciadas. Portanto, o termo $\Omega_\gamma = 0$, resultando em:

$$A_{vs}^{est} = \sum_{ij} \beta J_{ij} S_i^z(0) S_j^z(0). \quad (\text{D.20})$$

Salienta-se que A_{vs}^{est} é a componente vidro de spin estática. Desta forma, utilizando as frequências de Matsubara, o formalismo de Grassman e a transformada de Fourier, a ação torna-se:

$$A\{\mu\} = \sum_j \sum_n \underline{\phi}_j^\dagger(\omega_n) \gamma_j^{-1}(\{\Gamma_i\}) \underline{\phi}_j(\omega_n) + \sum_{ij} \beta J_{ij} S_i^z(0) S_j^z(0). \quad (\text{D.21})$$

D.1.2 Transformação de Hubbard-Stratonovich

Quando a aproximação de campo médio é utilizada, os somatórios em dois sítios são reescritos para um único sítio resultando na equação 3.19. Desta forma dois termos de somatórios ao quadro surgem, a linearização destes termos é realizada através da Transformação de Hubbard-Stratonovich, a qual é descrita por:

$$\frac{\sqrt{a}}{\sqrt{\pi}} e^{\frac{b^2}{4a}} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-az^2+bz} dz,$$

onde z é o campo auxiliar. Desta maneira utilizando a identidade acima, nas exponenciais que contém os somatórios ao quadrado da Equação (3.19), obtém-se as seguintes expressões:

$$\begin{aligned} \exp \left[\frac{8(\beta J)^2}{N} \sum_{\alpha} \left(\sum_j (S_{j\alpha}^z)^2 \right)^2 \right] &= \sqrt{\frac{N(\beta J)^2}{2\pi}} \int \prod_{\alpha} dq_{\alpha} \\ &\times \exp \left(\frac{-N(\beta J)^2}{2} \sum_{\alpha} q_{\alpha}^2 + 4(\beta J)^2 \sum_{j\alpha} q_{\alpha} (S_{j\alpha}^z)^2 \right), \end{aligned} \quad (\text{D.22})$$

$$\begin{aligned} \exp \left[\frac{16(\beta J)^2}{N} \sum_{\alpha\beta} \left(\sum_j S_{j\alpha}^z S_{j\beta}^z \right)^2 \right] &= \sqrt{\frac{N(\beta J)^2/2}{2\pi}} \int \prod_{(\alpha\beta)} dq_{\alpha\beta} \\ &\times \exp \left(-N(\beta J)^2 \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta}^2 + 8(\beta J)^2 \sum_{j\alpha\beta} q_{\alpha\beta} S_{j\alpha}^z S_{j\beta}^z \right). \end{aligned} \quad (\text{D.23})$$

$$\exp \left[2 \frac{\beta J_0}{N} \left(\sum_{\alpha} S_{\alpha i}^z \right)^2 \right] = \sqrt{\frac{N \beta J_0}{2\pi}} \int \prod_{(\alpha)} dm_{\alpha} \exp \left(\frac{-N \beta J_0}{2} m_{\alpha}^2 + \beta J_0 m_{\alpha} \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} \right). \quad (\text{D.24})$$

Através da utilização da transformada de Hubbard-Stratonovich os campos auxiliares m_{α} , q_{α} e $q_{\alpha\beta}$ são introduzidos.

A ANEXO A - TRATAMENTO DE SISTEMAS COM MUITOS CORPOS

A.1 Segunda Quantização

Na mecânica quântica a primeira quantização trata de problemas descritos em termos dos operadores posição e momento. Já a integral de caminho de Feynmann é uma integral em todas as direções, onde as coordenadas são operadores no formalismo Hamiltoniano. No caso da segunda quantização, podem-se tratar problemas de muitos corpos através de teorias de campos. Neste caso, são utilizados dois operadores: o de criação e o de aniquilação de partículas [33].

A.1.1 Operadores de Criação e Aniquilação

Quando trata-se de sistema de muitos corpos, a utilização de operadores de criação e aniquilação é uma abordagem adequada para a descrição de estados de muitas partículas e do operador de muitos corpos. Os operadores de criação e aniquilação geram todo o espaço desejado através da ação em um único estado [33]. Sendo assim, para cada estado de partícula única $|\lambda\rangle$, define-se um operador de criação a_λ^\dagger . Este operador criação pode criar partículas do tipo bósons ou férmions, e atua em qualquer estado de simetria ou antissimetria $|\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle$ referente ao espaço criado [33]. Deste modo temos:

$$a_\lambda^\dagger |\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle = |\lambda \lambda_1 \dots \lambda_N\rangle. \quad (\text{A.1})$$

Utilizando uma base ortonormal $\{|\lambda_i\rangle\}$, teremos:

$$a_\lambda^\dagger |\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle = \sqrt{n_\lambda + 1} |\lambda \lambda_1 \dots \lambda_N\rangle. \quad (\text{A.2})$$

O número médio de ocupação do estado $|\lambda\rangle$ em $|\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle$ é dado por n_λ . As equações (A.1) e (A.2), não diferenciam o tipo de partícula que está sendo tratada, ou seja não diferenciam férmions de bósons. Os símbolos a e a^\dagger denotam os operadores de aniquilação e criação, respectivamente. O operador a_λ^\dagger adiciona uma partícula no estado $|\lambda\rangle$ no estado em que opera, e simetriza ou antissimetriza o novo estado. Os estados simetrizados estão relacionados com os bósons, e os antissimetrizados com os férmions [33].

Ao contrário de um estado de muitas partículas, na abordagem de operadores de criação e aniquilação, um estado com zero partículas é construído, o qual é denotado por $|0\rangle$, e é conhecido como estado de vácuo [33]. A atuação do operador criação no estado de vácuo cria partículas no estado $|\lambda\rangle$. Desta forma

$$a_\lambda^\dagger |0\rangle = |\lambda\rangle. \quad (\text{A.3})$$

O espaço de Fock é usado para descrever um estado com um número de variáveis ou partículas desconhecidos. Como estamos falando de sistemas de muitos corpos ele é de extrema utilidade. A criação de uma base $|\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle$ ou $|\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle$ no espaço de Fock é feita através da ação repetida do operador criação no vácuo $|0\rangle$, e é descrita respectivamente por:

$$\begin{aligned} |\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle &= a_{\lambda_1}^\dagger a_{\lambda_2}^\dagger \dots a_{\lambda_N}^\dagger |0\rangle \\ |\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle &= \frac{1}{\prod_\lambda n_\lambda!} a_{\lambda_1}^\dagger a_{\lambda_2}^\dagger \dots a_{\lambda_N}^\dagger |0\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Desta forma, o operador criação gera todo o espaço de Fock [33]. As propriedades de simetria e antissimetria do estado de muitos corpos geram relações de comutação e anticomutação entre os operadores de criação. Dado um estado $|\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle$ e um estado qualquer de partícula única $|\lambda\rangle$ e $|\mu\rangle$, teremos:

$$a_\lambda^\dagger a_\mu^\dagger |\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle = |\lambda \mu \lambda_1 \dots \lambda_N\rangle = \varsigma a_\lambda^\dagger a_\mu^\dagger |\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle. \quad (\text{A.5})$$

As propriedades de permutação de estados são utilizadas, e ς será igual a $+1$ para bósons e -1 para férmions [33]. A equação acima é válida para qualquer estado, e os operadores de criação satisfazem a seguinte equação:

$$a_\lambda^\dagger a_\mu^\dagger - \varsigma a_\mu^\dagger a_\lambda^\dagger = 0. \quad (\text{A.6})$$

A relação de comutação para os operadores de criação é dada por:

$$[a_\lambda^\dagger, a_\mu^\dagger]_\varsigma = [a_\lambda^\dagger a_\mu^\dagger] = a_\lambda^\dagger a_\mu^\dagger - \varsigma a_\mu^\dagger a_\lambda^\dagger = 0. \quad (\text{A.7})$$

A relação de comutação para os operadores de aniquilação é equivalente a dos operadores de criação e é dada por

$$[a_\lambda, a_\mu]_{-\varsigma} = [a_\lambda a_\mu] = a_\lambda a_\mu - a_\mu a_\lambda = 0. \quad (\text{A.8})$$

A ação do operador aniquilação a_λ é obtida avaliando seu elemento matricial entre dois estados arbitrários, através do adjunto da equação (A.1), sendo assim

$$\{\alpha_1 \dots \alpha_m | a_\lambda | \beta_1 \dots \beta_n \rangle = \{ \lambda \alpha_1 \dots \alpha_m | \beta_1 \dots \beta_n \}. \quad (\text{A.9})$$

no caso do operador aniquilação, quando este atua no vácuo ele não produz partícula alguma, de forma que:

$$\begin{aligned} a_\lambda |0\rangle &= 0, \\ \langle 0 | a_\lambda^\dagger &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

As relações de comutação entre os operadores de criação e aniquilação, para dois

estados $|\lambda\rangle$ e $|\mu\rangle$ de uma base ortonormal $\{|\alpha\rangle\}$, são dadas por

$$\begin{aligned} a_\lambda a_\mu^\dagger |\alpha_1 \dots \alpha_n\rangle &= \delta_{\lambda\mu} |\mu \alpha_1 \dots \alpha_n\rangle + \sum_{i=1}^n \varsigma^i \delta_{\lambda\alpha_i} |\alpha_1 \dots \hat{\alpha}_i \dots \alpha_n\rangle, \\ a_\mu^\dagger a_\lambda |\mu \alpha_1 \dots \alpha_n\rangle &= \sum_{i=1}^n \varsigma^{i-1} \delta_{\lambda\alpha_i} |\alpha_1 \dots \hat{\alpha}_i \dots \alpha_n\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Os operadores de criação e aniquilação satisfazem a seguinte equação

$$[a_\lambda, a_\mu^\dagger]_{-\varsigma} = a_\lambda a_\mu^\dagger - \varsigma a_\mu^\dagger a_\lambda = \delta_{\lambda\mu}. \quad (\text{A.12})$$

Neste caso, a relação de comutação é dada para bósons por $[a_\lambda, a_\mu^\dagger]_- = \delta_{\lambda\mu}$ e a relação de anticomutação para férmions é $[a_\lambda, a_\mu^\dagger]_+ = \delta_{\lambda\mu}$ [33].

Além dos operadores de aniquilação e criação gerarem todo o espaço desejado (Hilbert, Fock, Estados Coerentes, etc.), pode-se introduzir um novo operador, o operador numérico \hat{n}_α , o qual é utilizado para representar um operador em uma base diagonal. Assim, um novo operador pode ser escrito em termos dos operadores de criação e aniquilação em uma base diagonal, e depois essa base diagonal pode ser transformada em uma base geral [33], tal que

$$\hat{n} = a_\alpha^\dagger a_\alpha. \quad (\text{A.13})$$

A ação do operador \hat{n}_α em um estado $|\phi\rangle$ é a de contar quantas partículas estão em um estados $|\alpha\rangle$ e em um estado $|\phi\rangle$:

$$\begin{aligned} \hat{n}_\alpha |\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle &= a_\alpha^\dagger a_\alpha |\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle, \\ &= \left(\sum_{i=1}^N \delta_{\alpha\alpha_i} \right) |\alpha_1 \dots \hat{\alpha}_i \dots \alpha_N\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Na equação acima, o somatório $\sum_{i=1}^N \delta_{\alpha\alpha_i}$ nos dá o número de partículas no estado $|\alpha\rangle$ em $|\alpha_1 \dots \hat{\alpha}_i \dots \alpha_N\rangle$. Desta forma, o operador \hat{N} fornece o número total de partículas em um dado estado, onde

$$\hat{N} = \sum_{\alpha} \hat{n}_\alpha = \sum_{\alpha} a_\alpha^\dagger a_\alpha. \quad (\text{A.15})$$

Apresenta-se nesta seção uma pequena revisão dos operadores de criação e aniquilação, para mais detalhes a respeito deste formalismo ver a referência [33]. O formalismo de tais operadores serão utilizados no caso do presente trabalho na realização da descrição quântica e estatística do modelo teórico utilizado. A diferença é que nesta seção apresenta-se uma abordagem geral de tais operadores, sem uma definição definitiva do espaço em que os operadores estão atuando ou gerando. No caso do Modelo Vidro de Spin Fermiônico o Espaço dos Estados Coerentes é o espaço utilizado.

A.1.2 Espaço dos Estados Coerentes

Uma base muito utilizada, principalmente no tratamento de sistemas com muitos corpos, é a base dos estados coerentes. Essa base é análoga a base dos autoestados da posição na mecânica quântica usual. A base dos estados coerentes não é uma base ortonormal, porém ela abrange todo o espaço de Fock. O espaço de Fock é usado para descrever um estado com um número de variáveis ou partículas desconhecidos, o qual pode ser totalmente criado a partir dos operadores de criação e aniquilação de partículas. Em adição, os estados de posição $|\vec{r}\rangle$ são definidos como autoestados de \hat{r} , e os estados coerentes são definidos como autoestados dos operadores de aniquilação [33]. Se um vetor genérico $|\phi\rangle$ é definido no espaço de Fock, pode-se expandir este vetor como:

$$|\phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_n} \phi_{\alpha_1 \dots \alpha_n} |\alpha_1 \dots \alpha_n\rangle. \quad (\text{A.16})$$

O vetor $|\phi\rangle$ possui componente com um número mínimo de partículas, e se o operador criação for aplicado sobre $|\phi\rangle$, o número mínimo de partículas em $|\phi\rangle$ será aumentado em 1. Assim, os estados resultantes não podem ser um múltiplo do estado original. Desta forma, um operador de criação não pode ter um autoestado. Todavia, se o operador de aniquilação for aplicado em $|\phi\rangle$, teremos a diminuição de uma partícula do número máximo de partículas em $|\phi\rangle$. Pelo fato de $|\phi\rangle$ poder conter componentes com todos os números de partículas, nada impede de $|\phi\rangle$ ser um autoestado [33]. A construção de um autoestado $|\phi\rangle$ do operador de aniquilação, é descrita por:

$$a_{\alpha}|\phi\rangle = \phi_{\alpha}|\phi\rangle. \quad (\text{A.17})$$

Quando mais de um operador de aniquilação atua sobre um estado coerente, diferenças importantes entre férmions e bósons surgem. Desta forma, as relações de comutação e anticomutação resultam em relações correspondentes para os autovalores:

$$[\phi_{\alpha}, \phi_{\beta}]_{-s} = 0. \quad (\text{A.18})$$

A diferença é que no caso em que as partículas são bósons os autovalores comutam. Logo, a ação do operador de aniquilação sobre $|\phi\rangle$ pode ser calculada diretamente. Porém, no caso em que as partículas são férmions os autovalores não comutam, ou seja são anticomutantes. Neste último caso, a introdução do número anticomutador, conhecido como variáveis de Grassmann se faz necessária, devido a anticomutação dos autovalores [33].

A.1.3 Álgebra de Grassmann

Na construção dos estados coerentes para os férmions é necessário a introdução do número anticomutador. Isso ocorre devido a não comutatividade dos autoestados do operador de aniquilação para os férmions. A álgebra que trata deste número anticomutador é chamada de álgebra de Grassmann [33]. Tal álgebra é definida por um conjunto de geradores, ξ_α , com $\alpha = 1, \dots, n$, em que os geradores são anticomutantes de forma que:

$$\xi_\alpha \xi_\beta + \xi_\beta \xi_\alpha = 0, \quad (\text{A.19})$$

onde

$$\xi_\alpha^2 = 0. \quad (\text{A.20})$$

A base na álgebra de Grassmann é composta por todos os produtos distintos dos geradores. Logo, um número nesta álgebra é uma combinação linear com coeficientes complexos do número $\{1, \xi_{\alpha_1}, \xi_{\alpha_2}, \dots, \xi_{\alpha_1} \xi_{\alpha_2} \dots \xi_{\alpha_n}\}$, com índices ordenados $\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_n$. A dimensão é dada por 2^n , e n é o número dos geradores. Os elementos da base são produzidos através de duas possibilidades de incluir um gerador, o qual pode assumir valores 0 ou 1, para cada um dos n geradores. A matriz que representa o número de Grassmann possui uma dimensão $2^n \times 2^n$ [33]. Dado um conjunto de geradores dado por $n = 2p$, ξ_α é um gerador, e teremos um operador conjugado dado por ξ_α^* . Sendo assim, tem-se as propriedades referentes aos geradores conjugados:

$$\begin{aligned} (\xi_\alpha)^* &= \xi_\alpha^*, \\ (\xi_\alpha^*)^* &= \xi_\alpha. \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Se λ for um número complexo

$$(\lambda \xi_\alpha)^* = \lambda^* \xi_\alpha^*. \quad (\text{A.22})$$

Para qualquer produto de geradores

$$(\xi_{\alpha_1} \dots \xi_{\alpha_n})^* = \xi_{\alpha_n}^* \xi_{\alpha_{n-1}}^* \dots \xi_{\alpha_1}^*. \quad (\text{A.23})$$

Considerando a álgebra de Grassmann para dois geradores, os quais são denotados por ξ e ξ^* , onde a álgebra será gerada por quatro números $\{1, \xi, \xi^*, \xi^* \xi\}$ [33]. Desta forma, teremos que uma função qualquer que será uma função linear, devido a propriedade (A.20), e assim

$$f(\xi) = f_0 + f_1 \xi. \quad (\text{A.24})$$

A equação acima é a representação de uma função de onda nos estados coerentes. A representação de um operador nos estados coerentes, através da álgebra de Grassmann

será uma função de ξ^* e ξ , dada por:

$$A(\xi^*, \xi) = a_0 + a_1\xi + \bar{a}_1\xi^* + a_{12}\xi^*\xi. \quad (\text{A.25})$$

A derivada de uma função variável de Grassmann é definida de forma similar as das funções complexas ordinárias [33]. Porém, para que o operador derivada $\frac{\partial}{\partial \xi}$ atue em ξ , a variável ξ deve ser anticomutada até que seja adjacente a $\frac{\partial}{\partial \xi}$. Consequentemente

$$\frac{\partial}{\partial \xi}(\xi^*\xi) = \frac{\partial}{\partial \xi}(-\xi\xi^*) = -\xi^*, \quad (\text{A.26})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi}A(\xi^*, \xi) &= a_1 - a_{12}\xi^*, \\ \frac{\partial}{\partial \xi^*}A(\xi^*, \xi) &= \bar{a}_1 - a_{12}\xi, \\ \frac{\partial}{\partial \xi^*}\frac{\partial}{\partial \xi}A(\xi^*, \xi) &= -a_{12} = -\frac{\partial}{\partial \xi}\frac{\partial}{\partial \xi^*}A(\xi^*, \xi). \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

É importante ressaltar que na última igualdade acima os operadores $\frac{\partial}{\partial \xi^*}$ e $\frac{\partial}{\partial \xi}$ anticomutam. Neste caso, as integrais não são semelhantes as somas de Riemann, sendo assim é necessário definir as integrais sobre as variáveis de Grassmann. Nesta, a integral de uma forma diferencial exata é zero. Logo, a integral de 1 é 0, uma vez que 1 é o derivado de ξ . De forma geral, teremos:

$$\begin{aligned} \int d\xi 1 &= 0, \\ \int d\xi \xi &= 1. \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

Verificamos, de maneira similar, para o caso do adjunto:

$$\begin{aligned} \int d\xi^* 1 &= 0, \\ \int d\xi^* \xi^* &= 1. \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

Porém, ao contrário de uma integral de Riemann em que dx é uma variável real infinitesimal, $d\xi$ não é um número de Grassmann [33]. Utilizando a definição contida na equação (A.24), e utilizando as regras que definem as integrais de Grassmann, obtem-se:

$$\int d\xi f(\xi) = f_1. \quad (\text{A.30})$$

Utilizando a equação (A.25), tem-se que:

$$\begin{aligned}
\int d\xi A(\xi^*, \xi) &= \int d\xi (a_0 + a_1 \xi + \bar{a}_1 \xi^* + a_{12} \xi^* \xi) = a_1 - a_{12} \xi^*, \\
\int d\xi^* A(\xi^*, \xi) &= \bar{a}_1 + a_{12} \xi, \\
\int d\xi^* d\xi A(\xi^*, \xi) &= -a_{12} = - \int d\xi d\xi^* A(\xi^*, \xi).
\end{aligned} \tag{A.31}$$

As convenções utilizadas na descrição das integrais de Grassmann têm como consequência resultados semelhantes com os obtidos através do formalismo das integrações complexas [33]. Considerando a seguinte definição para uma função δ de Grassmann:

$$\begin{aligned}
\delta(\xi, \xi') &= \int d\eta e^{-\eta(\xi - \xi')}, \\
&= \int d\eta (1 - \eta(\xi - \xi')), \\
&= -(\xi - \xi').
\end{aligned} \tag{A.32}$$

Com a intenção de verificar se essa definição tem o comportamento desejado e usando a equação (A.24), obtêm-se

$$\begin{aligned}
\int d\xi' \delta(\xi, \xi') f(\xi') &= - \int d\xi' (\xi - \xi') (f_0 + f_1 \xi'), \\
&= f_0 + f_1 \xi, \\
&= f(\xi),
\end{aligned} \tag{A.33}$$

para qualquer função $f(\xi)$. O produto escalar da função de Grassmann é dado por:

$$\langle f|g \rangle = \int d\xi^* d\xi e^{-\xi^* \xi} f^*(\xi) g(\xi^*). \tag{A.34}$$

A função $f(\xi)$ está definida na equação (A.24), de forma similar: $g(\xi) = g_0 + g_1 \xi$. A partir da equação (A.34), pode-se ver que:

$$\begin{aligned}
\langle f|g \rangle &= \int d\xi^* d\xi (1 - \xi^* \xi) (f_0^* + f_1^* \xi) (g_0 + g_1 \xi^*), \\
&= - \int d\xi^* d\xi \xi^* \xi f_0^* g_0 + \int d\xi^* d\xi \xi \xi^* f_1^* g_1, \\
&= f_0^* g_0 + f_1^* g_1.
\end{aligned} \tag{A.35}$$

O formalismo de Grassmann é extremamente necessário para a utilização dos estados coerentes para férmions [33], já que dentro do tratamento de férmions há operadores que não comutam.

A.1.4 Estados Coerentes Para Férmons

A álgebra de Grassmann \mathcal{G} associa cada gerador ξ_α com um operador de aniquilação a_α , e cada gerador ξ_α^* com um operador de criação a_α^\dagger [33]. O espaço de Fock generalizado é construído a partir de um conjunto de combinações lineares dos estados do espaço de Fock para férmions (\mathcal{F}) com coeficientes na álgebra de Grassmann \mathcal{G} [33]. Um vetor $|\psi\rangle$ qualquer pertencente ao espaço de Fock, pode ser expandido da seguinte forma

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha} \chi_{\alpha} |\phi_{\alpha}\rangle. \quad (\text{A.36})$$

O número de Grassmann é dado por χ_{α} e $|\phi\rangle$ é um vetor no espaço de Fock. Para tratar expressões que são combinações das variáveis de Grassmann e dos operadores de criação e aniquilação, deve-se definir uma relação de comutação específica entre ξ 's e a 's [33]. Desta forma:

$$\begin{aligned} [\tilde{\xi}, \tilde{a}]_+ &= 0, \\ (\tilde{\xi}\tilde{a})^\dagger &= \tilde{a}^\dagger \xi^*. \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

A variável $\tilde{\xi}$ denota as variáveis de Grassmann em $\{\xi_\alpha, \xi_\alpha^*\}$ e \tilde{a} é um operador qualquer em $\{a_\alpha^\dagger, a_\alpha\}$ [33]. Um estado coerente para férmions $|\xi\rangle$ é definido por:

$$|\xi\rangle = e^{-\sum_{\alpha} \xi_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger}} |0\rangle = \prod_{\alpha} (1 - \xi_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger}) |0\rangle. \quad (\text{A.38})$$

Embora o formalismo dos estados coerentes pertençam ao espaço generalizado de Fock e não ao espaço de Fock dos férmions \mathcal{F} , qualquer estado físico de férmions pode ser descrito em termos dos estados coerentes. Os estados coerentes definidos na equação (A.37) são os autoestados dos operadores de aniquilação [33]. Para o caso de um único estado $|\alpha\rangle$, a relação de anticomutação de $a_\alpha, a_\alpha^\dagger$ e ξ_α , resulta em:

$$\begin{aligned} a_\alpha (1 - \xi_\alpha a_\alpha^\dagger) &= +\xi_\alpha |0\rangle, \\ &= \xi_\alpha (1 - \xi_\alpha a_\alpha^\dagger) |0\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

Utilizando as equações (A.33) e (A.38), assim como o fato de que a_α e ξ_α comutam com a combinação $\xi_\beta a_\beta^\dagger$ para $\beta \neq \alpha$, a condição do autovalor será:

$$\begin{aligned} a_\alpha |\xi\rangle &= a_\alpha \prod_{\beta} (1 - \xi_\beta a_\beta^\dagger) |0\rangle, \\ &= \xi_\alpha |\xi\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

De forma similar, o adjunto do estado coerente é dado por

$$\langle \xi | = \langle 0 | \exp \left\{ - \sum_{\alpha} a_{\alpha} \xi_{\alpha}^* \right\} = \langle 0 | \exp \left\{ \sum_{\alpha} \xi_{\alpha}^* a_{\alpha} \right\}, \quad (\text{A.41})$$

o qual é uma autofunção de a_{α}^{\dagger} : $\langle \xi | a_{\alpha}^{\dagger} = \langle \xi | \xi_{\alpha}^*$ [33]. A ação de a_{α}^{\dagger} sobre um estado coerente é descrita por

$$\begin{aligned} a_{\alpha}^{\dagger} | \xi \rangle &= a_{\alpha}^{\dagger} (1 - \xi_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger}) \prod_{\beta \neq \alpha} (1 - \xi_{\beta} a_{\beta}^{\dagger}) | 0 \rangle, \\ &= - \frac{\partial}{\partial \xi_{\alpha}} | \xi \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

Analogamente, temos:

$$\langle \xi | a_{\alpha} = + \frac{\partial}{\partial \xi_{\alpha}^*} \langle \xi |. \quad (\text{A.43})$$

A sobreposição de dois estados coerentes é dada por:

$$\begin{aligned} \langle \xi | \xi' \rangle &= \langle 0 | \prod_{\alpha} (1 - \xi_{\alpha}^* a_{\alpha}) (1 - \xi_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger}) | 0 \rangle, \\ &= \prod_{\alpha} (1 + \xi_{\alpha}^* \xi_{\alpha}) = \exp \left\{ \sum_{\alpha} \xi_{\alpha}^* \xi_{\alpha} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.44})$$

A relação de fechamento pode ser escrita como um operador A , dado por:

$$A = \int \prod_{\alpha} d\xi_{\alpha}^* d\xi_{\alpha} \exp \left\{ - \sum_{\alpha} \xi_{\alpha}^* \xi_{\alpha} \right\} | \xi \rangle \langle \xi |. \quad (\text{A.45})$$

Para provar a equação acima é necessário provar que para qualquer vetor da base do espaço de Fock, teremos:

$$\langle \alpha_1 \dots \alpha_n | A | \beta_1 \dots \beta_m \rangle = \langle \alpha_1 \dots \alpha_n | \beta_1 \dots \beta_m \rangle. \quad (\text{A.46})$$

Da propriedade do autovalor dos estados coerentes, equação (A.39), obtêm-se:

$$\langle \alpha_1 \dots \alpha_n | \xi \rangle = \xi_{\alpha_n} \dots \xi_{\alpha_1}. \quad (\text{A.47})$$

O mesmo ocorre de forma análoga para o adjunto [33]. Assim

$$\langle \alpha_1 \dots \alpha_n | A | \beta_1 \dots \beta_n \rangle = \int \prod_{\alpha} d\xi_{\alpha}^* d\xi_{\alpha} \prod_{\alpha} (1 + \xi_{\alpha}^* \xi_{\alpha}) \xi_{\alpha_n} \dots \xi_{\alpha_1} \xi_{\beta_1}^* \dots \xi_{\beta_n}^*. \quad (\text{A.48})$$

Os elementos da matriz $\langle \xi | \psi_j \rangle$ e $\langle \psi_i | \xi \rangle$ para um dado estado $|\psi_i\rangle$, tanto no espaço de Fock quanto no espaço dos estados coerentes, contém números de Grassmann

que originam-se da relação de anticomutação dada por (ver [33])

$$\langle \psi_i | \xi \rangle \langle \xi | \psi_j \rangle = \langle -\xi | \psi_j \rangle \langle \psi_i | \xi \rangle. \quad (\text{A.49})$$

Caso uma base completa de estados $\{|n\rangle\}$ seja definida dentro do espaço de Fock, o traço de um operador A , será:

$$\begin{aligned} \text{Tr } A &= \sum_n \langle n | A | n \rangle, \\ &= \int \prod_{\alpha} d\xi_{\alpha}^* d\xi_{\alpha} \exp \left[- \sum_{\alpha} \xi_{\alpha}^* \xi_{\alpha} \right] \sum_n \langle n | \xi \rangle \langle \xi | A | n \rangle, \\ &= \int \prod_{\alpha} d\xi_{\alpha}^* d\xi_{\alpha} \exp \left[- \sum_{\alpha} \xi_{\alpha}^* \xi_{\alpha} \right] \langle -\xi | A \sum_n | n \rangle \langle n | | \xi \rangle, \\ &= \int \prod_{\alpha} d\xi_{\alpha}^* d\xi_{\alpha} \exp \left[- \sum_{\alpha} \xi_{\alpha}^* \xi_{\alpha} \right] \langle -\xi | A | \xi \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.50})$$

Contudo, um estado coerente de Grassmann pode ser definido como

$$|\psi\rangle = \int \prod_{\alpha} d\xi_{\alpha}^* d\xi_{\alpha} \exp \left[- \sum_{\alpha} \xi_{\alpha}^* \xi_{\alpha} \right] \psi(\xi^*) | \xi \rangle, \quad (\text{A.51})$$

em que

$$\langle \xi | \psi \rangle = \psi(\xi^*). \quad (\text{A.52})$$

Os operadores de criação e aniquilação satisfazem

$$\begin{aligned} \langle \xi | a_{\alpha} | \psi \rangle &= \frac{\partial}{\partial \xi_{\alpha}^*} \psi(\xi^*), \\ \langle \xi | a_{\alpha}^{\dagger} | \psi \rangle &= \xi_{\alpha}^* \psi(\xi^*). \end{aligned} \quad (\text{A.53})$$

Esta seção contém uma explanação a respeito de como tratar férmions dentro do espaço dos estados coerentes a partir da utilização da Álgebra de Grassmann (anexo A.1.3) [33].

A.1.5 Integrais Gaussianas

No decorrer da construção teórica que leva até a formulação da função de partição para muitos corpos, dentro do espaço dos estados coerentes, será avaliado frequentemente os elementos matriciais do operador de evolução. Para variáveis complexas ou de Grassmann, no caso das formas quadráticas destes elementos o formalismo das integrais Gaussianas será utilizado. Desta forma, esta seção serve de embasamento para a próxima.

Para integrais multi-dimensionais sobre variáveis reais a seguinte identidade é válida:

$$\int \frac{dx_1 \dots dx_n}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \exp \left[\frac{-1}{2} x_i A_{ij} x_j + x_i J_i \right] = [\det A]^{-\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{1}{2} J_i A_{ij}^{-1} J_j \right]. \quad (\text{A.54})$$

A matriz A é uma matriz positiva, simétrica e real. Essa identidade é estabelecida de forma direta, alterando variáveis para reduzi-la à forma diagonal e usando a integral gaussiana familiar, teremos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp [-ax^2] = \sqrt{\frac{\pi}{a}}. \quad (\text{A.55})$$

Utilizando as transformações $y_i = x_i - A_{ij}^{-1} J_j$ e $z_k = O_{ki}^{-1} y_i$, de modo que O é a transformação ortogonal que diagonaliza A , teremos:

$$\int \frac{dx_1 \dots dx_n}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \exp \left[\frac{-1}{2} x_i A_{ik} x_k + J_k x_k - \frac{1}{2} J_i A_{ik}^{-1} J_k \right] = \frac{(2\pi)^{\frac{n}{2}}}{[\det A]^{\frac{1}{2}}}. \quad (\text{A.56})$$

Observa-se que é essencial que A seja positiva, para que ocorra a convergência em uma integral Gaussiana. De forma similar, a identidade para integrais sobre pares de variáveis complexas conjugadas será:

$$\int \prod_{i=1}^n \frac{dx_i^* dx_i}{2\pi i} \exp [-x_i^* H_{ij} x_j + J_i^* x_i + J_i x_i^*] = [\det H]^{-1} e^{J_i^* H_{ij}^{-1} J_j}. \quad (\text{A.57})$$

Estabelecendo uma forma análoga para o caso das variáveis de Grassmann, teremos:

$$\int \prod_{i=1}^n d\eta_i^* d\eta_i \exp [-\eta_i^* H_{ij} \eta_j + \varsigma_i^* \eta_i + \varsigma_i \eta_i^*] = [\det H] e^{\varsigma_i^* H_{ij}^{-1} \varsigma_j}. \quad (\text{A.58})$$

O H é Hermitiano e $\{\eta_i, \eta_i^*, \varsigma_i, \varsigma_i^*\}$ são as variáveis de Grassmann. Para um par de variáveis conjugadas de Grassmann, a integral Gaussiana será:

$$\int d\xi^* d\xi e^{-\xi^* a \xi} = \int d\xi^* d\xi (1 - \xi^* a \xi) = a. \quad (\text{A.59})$$

Considerando a integral multi-dimensional de Grassmann da equação (A.58), obtêm-se o produto dos autovalores, e desta forma o $\det H$. Para poder transformar a equação (A.58) na forma diagonal, precisa-se derivar a lei de transformações lineares para as variáveis de Grassmann,

$$\int d\varsigma_1^* d\varsigma_1 \dots d\varsigma_n^* d\varsigma_n P(\varsigma^*, \varsigma) = \left| \frac{\partial(\eta^*, \eta)}{\partial(\varsigma^*, \varsigma)} \right| \int d\eta_1^* d\eta_1 \dots d\eta_n^* d\eta_n \times P(\varsigma^*(\eta^*, \eta), \varsigma(\eta^*, \eta)). \quad (\text{A.60})$$

Em tal lei de transformação o inverso do Jacobiano aparece no lugar do Jacobiano. Desta forma, a derivação é facilitada, tal que:

$$\begin{aligned} (\zeta_1^*, \zeta_2^* \dots \zeta_n^* \zeta_n \zeta_{n-1} \dots \zeta_1) &= (\tilde{\zeta}_1 \tilde{\zeta}_2 \dots \tilde{\zeta}_{2n}) \\ (\eta_1^* \eta_2^* \dots \eta_n^* \eta_n \eta_{n-1} \dots \eta_1) &= (\tilde{\eta}_1 \tilde{\eta}_2 \dots \tilde{\eta}_{2n}), \end{aligned} \quad (\text{A.61})$$

e escrevendo:

$$\tilde{\zeta}_i = M_{ij} \tilde{\eta}_j. \quad (\text{A.62})$$

As únicas contribuições que não desaparecem da equação (A.60) são as que vem do termo do polinômio que contém cada $\tilde{\zeta}_i$ como fator, as quais são descritas como $p \prod_{i=1}^{2n} \tilde{\zeta}_i$. Desta forma, o J será avaliado na seguinte equação:

$$\int d\zeta_1^* d\zeta_1 \dots d\zeta_n^* d\zeta_n p \prod_{i=1}^{2n} \tilde{\zeta}_i = J \int d\eta_1^* d\eta_1 \dots d\eta_n^* d\eta_n p \prod_{i=1}^{2n} \left(\sum_i M_{ij} \tilde{\eta}_j \right). \quad (\text{A.63})$$

O lado esquerdo resulta em $p(-1)^n$ e o lado direito observa-se que as únicas contribuições que não desaparecem surgem do termo $(2n)!$, para permutações distintas de P as variáveis $\{\eta\}$ são geradas pelo produto, sendo assim:

$$\begin{aligned} p(-1)^n &= J p \int d\eta_1^* d\eta_1 \dots d\eta_n^* d\eta_n \prod_{i=1}^{2n} \left(\sum_i M_{ij} \tilde{\eta}_j \right), \\ &= J p \det M (-1)^n. \end{aligned} \quad (\text{A.64})$$

Desta forma

$$J = (\det M)^{-1} = \left| \frac{\partial(\tilde{\eta})}{\partial(\tilde{\zeta})} \right| = \left| \frac{\partial(\eta^*, \eta)}{\partial(\zeta^*, \zeta)} \right|. \quad (\text{A.65})$$

A.1.6 Formulação das Integrais Funcionais

Para um melhor entendimento físico as integrais de caminho de Feynmann em tempo real são introduzidas. De toda forma, para que consigamos uma representação da função de partição é necessário realizar uma construção analítica para o tempo imaginário. Considerando um elemento de matriz do operador evolução para uma partícula que é governada pelo Hamiltoniano $H(\hat{p}, \hat{x})$:

$$U(x_f t_f, x_i t_i) = \left\langle x_f \left| e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_f - t_i)} \right| x_i \right\rangle, \quad (\text{A.66})$$

os elementos do operador evolução só podem ser calculados para intervalos de tempos infinitesimais, sendo calculados para qualquer grau de precisão desejado. Desta forma, as integrais de caminho de Feynmann são utilizadas para quebrar um intervalo finito em passos

infinitesimais. Deste modo, o operador evolução é avaliado passo a passo, se relacionando com os elementos de matriz de forma a obter o resultado do operador evolução para um intervalo finito. O intervalo de tempo é dividido em M passos iguais de tamanho ϵ :

$$\epsilon = \frac{t_f - t_i}{M}. \quad (\text{A.67})$$

Salienta-se que t_n é um tempo intermediário. Logo, $t_n = t_i + (n - 1)\epsilon$ e $\epsilon = \frac{t_n - t_i}{n}$. Adicionalmente $t_0 = t_i$, $t_M = t_f$, $x_0 = x_i$ e $x_M = x_f$, e inserindo a relação de fechamento, dada por $\int dx |x\rangle\langle x| = 1$, os elementos do operador evolução podem ser escritos por

$$\begin{aligned} U(x_f t_f, x_i t_i) &= \langle x_f | \left(e^{\frac{-i}{\hbar} \hat{H} \epsilon} \right)^M | x_i \rangle \\ &= \int \prod_{k=1}^{M-1} dx_k \langle x_f | \left(e^{\frac{-i}{\hbar} \hat{H} \epsilon} \right) | x_{M-1} \rangle \langle x_{M-1} | \left(e^{\frac{-i}{\hbar} \hat{H} \epsilon} \right) | x_{M-2} \rangle \langle x_{M-2} | \dots \\ &\quad \left(e^{\frac{-i}{\hbar} \hat{H} \epsilon} \right) | x_1 \rangle \langle x_1 | \left(e^{\frac{-i}{\hbar} \hat{H} \epsilon} \right) | x_i \rangle. \end{aligned}$$

A ideia principal é encontrar uma aproximação apropriada para os elementos da matriz do operador evolução temporal infinitesimal, onde esse operador pode ser escrito como:

$$\langle x_n | e^{-i \frac{\epsilon}{\hbar} H(\hat{p}, \hat{x})} | x_{n-1} \rangle = \int d^3 p_n \langle x_n | p_n \rangle \langle p_n | e^{-i \frac{\epsilon}{\hbar} H(\hat{p}, \hat{x})} | x_{n-1} \rangle. \quad (\text{A.68})$$

Define-se para operadores que são descritos em termos de \hat{p} e \hat{x} , um operador na forma normal. Isso ocorrerá quando todos os p' aparecerem a esquerda dos x , e o resultado dessa definição será um operador denotado como $: O(\hat{p}, \hat{x}) :$. No caso de partícula única, em um potencial V com o seguinte Hamiltoniano:

$$H_v(\hat{p}, \hat{x}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}). \quad (\text{A.69})$$

A forma normal será dada por

$$e^{\frac{-i\epsilon}{\hbar} H_v(\hat{p}, \hat{x})} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i\epsilon}{\hbar} \right)^n \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!(n-k)!} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} \right)^k + (V(\hat{x}))^{n-k}. \quad (\text{A.70})$$

Para o caso de uma partícula em um campo magnético o Hamiltoniano pode ser descrito através do vetor potencial $A(x)$ da seguinte maneira

$$\begin{aligned} H_A(\hat{p}, \hat{x}) &= \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\hat{x}) \right)^2, \\ &= \frac{1}{2m} \left(\vec{p}^2 - \frac{e\vec{p}}{c} \vec{A}(\hat{x}) - \frac{e}{c} \vec{A}(\hat{x}) \vec{p} + \left(\frac{e}{c} \right)^2 (A(\hat{x}))^2 \right). \end{aligned}$$

Para um $H(\hat{p}, \hat{x})$ qualquer, na forma normal

$$e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}H} =: e^{-i\frac{\epsilon H}{\hbar}} : + (-1) \left(\frac{\epsilon}{\hbar}\right)^2 \sum_{n=0} \left(-i\frac{\epsilon}{\hbar}\right)^n \left[\frac{H(\hat{p}, \hat{x})^{n+2} - : H(\hat{p}, \hat{x})^{n+2} :}{(n+2)!} \right]. \quad (\text{A.71})$$

Para o caso particular do Hamiltoniano $H_v(\hat{p}, \hat{x}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$, a correlação principal será:

$$\frac{-\epsilon^2}{2\hbar^2} \left[V, \frac{\hat{p}^2}{2m} \right] = \frac{-\epsilon^2}{4m\hbar^2} \left[i \left(\frac{\partial V(x)}{\partial x} \right) \hat{p} + \frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2} \right]. \quad (\text{A.72})$$

Desta forma, se o operador evolução infinitesimal é aproximado pelo operador evolução normal-ordenado, o erro é ϵ^2 vezes um operador que pode ser expresso em termo de múltiplos comutadores dos operadores compreendendo o Hamiltoniano. Logo, em contraste com outras aproximações as quais são válidas para a primeira ordem de ϵ , o operador evolução normal-ordenado pode ser usado na integral da equação (A.68), tal que

$$\langle x_n | : e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}H(\hat{p}, \hat{x})} : | x_{n-1} \rangle = \int \frac{d^3 p_n}{(2\pi\hbar)^3} e^{ip_n(x_n - x_{n-1})} e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}H(p_n, x_{n-1})}. \quad (\text{A.73})$$

Para o caso de uma partícula em um potencial, equação (A.69), a integral sobre p é uma integral Gaussiana, a qual resulta em:

$$\langle x_n | e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}H(\hat{p}, \hat{x})} | x_{n-1} \rangle = \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon \hbar} \right)^{\frac{3}{2}} e^{i\frac{\hbar}{2\epsilon} \left(\frac{m}{2\epsilon} (x_n - x_{n-1})^2 - \epsilon V(x_{n-1}) \right)} + O(\epsilon^2). \quad (\text{A.74})$$

Usando a equação (A.74) e a notação exposta na equação (A.67) os elementos da matriz do operador evolução da equação (A.1.6) podem ser escritos como:

$$U(x_f t_f, x_i t_i) = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^{M-1} dx_k \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon \hbar} \right)^{\frac{3M}{2}} e^{i\frac{\hbar}{\epsilon} \sum_{k=1}^M \left(\frac{m}{2} \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon} \right)^2 - V(x_{k-1}) \right)}. \quad (\text{A.75})$$

O conjunto de pontos $\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ define uma trajetória $x(t)$, que se inicia em $x(t_i) = x_i$ e termina em $x(t_f) = x_f$. Tal trajetória é composta de M pontos $x(t_k)$. Assim, nada implica que a trajetória seja contínua ou diferenciável. Como resultado, a soma de Riemann no expoente pode ser indicada de forma simbólica como

$$\epsilon \sum_{k=1}^M \frac{m}{2} \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon} \right)^2 \rightarrow \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{m}{2} \left[\frac{dx}{dt} \right]^2, \quad (\text{A.76})$$

com

$$\epsilon \sum_{k=1}^M V(x_{k-1}) \rightarrow \int_{t_i}^{t_f} dt V(x(t)). \quad (\text{A.77})$$

A integral de caminho de Feynmann quando $M \rightarrow \infty$ é dada por:

$$U(x_f t_f, x_i t_i) = \int_{(x_i, t_i)}^{(x_f, t_f)} D[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]}, \quad (\text{A.78})$$

onde

$$\int_{(x_i, t_i)}^{(x_f, t_f)} D[x(t)] = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^{M-1} dx_k \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon \hbar} \right)^{\frac{3M}{2}}. \quad (\text{A.79})$$

A equação acima representa a soma sobre todas as trajetórias, começando em uma posição x_i em um tempo t_i , e terminando em x_f em um t_f . A ação, dada por $S[x(t)]$, é:

$$S[x(t)] = \int_{t_i}^{t_f} dt L[x(t)], \quad (\text{A.80})$$

e o Lagrangiano $L[x(t)]$ é dado por:

$$L[x(t)] = \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x(t)). \quad (\text{A.81})$$

Como a integral de caminho é a representação exata do operador evolução, ela pode ser usada como ponto de partida na descrição da mecânica quântica. O princípio da superposição, para qualquer tempo pode ser escrito como:

$$U(x_i t_i, x_f t_f) = \int dx U(x_f t_f, xt) U(xt, x_i t_i). \quad (\text{A.82})$$

A equação acima pode ser expressa em termos da integral de caminho

$$\begin{aligned} \int_{(x_i, t_i)}^{(x_f, t_f)} D[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt' L[x(t')]} &= \int dx \int_{(xt)}^{(x_f t_f)} D[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} \int_t^{t_f} dt' L[x(t')]} \\ &\times \int_{(x_i t_i)}^{(x, t)} D[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t dt' L[x(t')]} \end{aligned} \quad (\text{A.83})$$

Uma aproximação estacionária pode ser feita para a integral de caminho da equação (A.78), quando $\hbar \rightarrow 0$. De forma geral, desde que a medida na equação (A.79) seja fracamente definida quando ϵ vai a zero, a integral funcional pode ser normalizada por soluções de problemas de referência analiticamente solúveis.

A integral funcional na equação (A.78) é chamada de forma Lagrangiana, e exige que o Hamiltoniano tenha uma dependência no momento quadrado, como o da equação (A.69). A forma Hamiltoniana da integral funcional é obtida pela substituição da equação (A.73) em (A.1.6) sem integral em p , na qual o elemento de matriz do operador evolução

tende a

$$U(x_f t_f, x_i t_i) \rightarrow \int_{(x_i t_i)}^{(x_f t_f)} D[x(t)] D[p(t)] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt [p(t) \frac{\partial}{\partial t} x(t) - H(p(t), x(t))]} \quad (\text{A.84})$$

As trajetórias $x(t)$ obedecem as mesmas condições de contorno que na forma Lagrangiana, e as trajetórias $p(t)$ não possuem condições de contorno.

A.1.6.1 Integral de Caminho do Tempo Imaginário e a Função de Partição

A função de partição para uma partícula única pode ser escrita como:

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} = \int dx \langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle. \quad (\text{A.85})$$

Tal expressão pode ser pensada como a soma sobre os elementos diagonais da matriz do operador evolução do tempo imaginário, o qual é descrito por:

$$U(x_f \tau_f, x_i \tau_i) = \langle x_f | e^{-(\tau_f - \tau_i) \frac{\hat{H}}{\hbar}} | x_i \rangle, \quad (\text{A.86})$$

onde $\tau_f - \tau_i = \beta \hbar$. É importante ressaltar que para uma única partícula trabalha-se com o ensemble canônico, e não há potencial químico. O fundamento de uma integral de caminho ou exponencial de tempo ordenado é a subdivisão dos intervalos em intervalos suficientemente pequenos, os comutadores dos operadores quânticos que aparecem no Hamiltoniano podem ser negligenciados. Sendo assim, o processo utilizado para o tempo real, pode ser repetido para o caso do tempo imaginário. Para o Hamiltoniano da equação (A.69), teremos:

$$\begin{aligned} U(x_f t_f, x_i t_i) &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^{M-1} d^3 x_k \prod_{k=1}^M \langle x_k | e^{-\frac{\epsilon}{\hbar} H(\hat{p}, \hat{x})} | x_{k-1} \rangle \\ &= \int_{(x_f, \tau_f)}^{(x_i, \tau_i)} D[x(\tau)] e^{\frac{-1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau H[x(\tau)]}, \end{aligned} \quad (\text{A.87})$$

em que $\epsilon = \frac{1}{M}(\tau_f - \tau_i)$. Desta forma, a integral de caminho imaginária, é a soma sobre as trajetórias que começando em $x_i \tau_i$ e terminando em $x_f \tau_f$, da exponencial de uma ação modificada na qual uma mudança no sinal do termo cinético produz o Hamiltoniano no lugar do Lagrangiano. Uma forma de mostrar como a Lagrangiana do tempo real se transforma no Hamiltoniano no caso do tempo imaginário é realizar a continuação do tratamento analítico da equação (A.78) para o tempo imaginário. Essa continuação analítica é conhecida como rotação de Wick, isso pode ser visto como uma rotação do contorno da integração no plano do tempo complexo, essa rotação é efetuada através da

variável de transformação

$$t = -i\tau. \quad (\text{A.88})$$

Desta forma

$$\frac{dx}{d\tau} = \frac{dt}{d\tau} \frac{dx}{dt} = -i \frac{dx}{dt}, \quad (\text{A.89})$$

e a ação, chamada de ação Euclidiana, será:

$$\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x(t)) \right] = \frac{-1}{\hbar} \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 - V(x(\tau)) \right]. \quad (\text{A.90})$$

Essencialmente, a energia cinética muda de sinal porque a derivada do tempo adquire um fator de i . O mesmo sinal reverso surge na equação clássica do movimento no tempo imaginário e a interpretação de uma partícula movendo-se em um potencial invertido posteriormenete fornecerá uma forma de enxergar soluções estacionárias para a integral, em regimes classicamente proibidos. Usando as equações (A.85) e (A.87) teremos que a função de partição será dada por:

$$Z = \int_{x(\beta\hbar)=x(0)} D[x(\tau)] \exp \left[\frac{-1}{\hbar} \int d\tau \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dx(\tau)}{d\tau} \right)^2 - V(x(\tau)) \right) \right]. \quad (\text{A.91})$$

A função de partição é a soma sobre todas as trajetórias periódicas de $\beta\hbar$. Contudo, a integral de caminho de Feynmann no tempo real ou imaginário pode ser diretamente estendida para sistemas de muitas partículas, por exemplo usando estados simétricos ou antissimétricos, para partículas que são bósons ou férmions, respectivamente. Então, a função de partição para um sistema de N-partículas será:

$$Z = \frac{1}{N!} \sum_p \zeta^p \int \prod_{i=1}^N dx_i(x_{p1} \dots x_{pN} | e^{-\beta H} | x_1 \dots x_n). \quad (\text{A.92})$$

No caso de uma variável simples, o intervalo de tempo β pode ser dividido em passos infinitesimais. Contudo, tem-se a escolha adicional de inserir a cada passo a relação de fechamento com o produto de estados, ou usar a simetria e antissimetria dos estados. O uso de produto de estados produz um resultado formal simples, que é completamente análogo a equação (A.87), para o caso de um Hamiltoniano na forma:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v(\hat{x}_i - \hat{x}_j), \quad (\text{A.93})$$

a função de partição será

$$Z = \frac{1}{N!} \sum_P \zeta^P \int_{x_1(\beta)=x_{P_1(0)}}^{x_N(\beta)=x_{P_N(0)}} D[x_1(\tau)] \dots D[x_N(\tau)] \times e^{-\int_0^\beta d\tau \left[\sum_{i=1}^N \frac{m}{2} \left(\frac{dx_i(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v(x_i(\tau) - x_j(\tau)) \right]} \quad (\text{A.94})$$

A.1.7 Integral Funcional dos Estados Coerentes

Para um Hamiltoniano expresso em segunda quantização, a representação das integrais funcionais para o operador evolução de muitos corpos pode ser obtida usando os estados coerentes, no lugar dos autovalores de posição e momento usados nas integrais de caminho de Feynman, como visto na seção anterior. Esta abordagem é utilizada no tratamento de sistemas de férmions. Os elementos da matriz do operador evolução, entre o estado coerente inicial $|\phi_i\rangle$, o qual será correspondente as componentes $\phi_{\alpha,i}$ e o estado final $\langle\phi_f|$, correspondente a $\phi_{\alpha,f}^*$. Ao dividir a integral em M intervalos, com tamanho de $\epsilon = \frac{t_f - t_i}{M}$, a relação de fechamento será:

$$1 = \frac{1}{\mathcal{N}} \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} e^{-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k}} |\phi_{\alpha,k}\rangle \langle\phi_{\alpha,k}|, \quad (\text{A.95})$$

até o k -ésimo passo, usando a notação de pontos iniciais e finais, como:

$$\begin{aligned} \phi_{\alpha,0} &\equiv \phi_{\alpha,i}, \\ \phi_{\alpha,M}^* &\equiv \phi_{\alpha,f}^*. \end{aligned} \quad (\text{A.96})$$

Para operadores em segunda quantização a forma apropriada do ordenamento normal é definida na seção (A.1.1), onde os operadores de criação ficam a esquerda dos de aniquilação. Assumindo que $H(a_{\alpha}^{\dagger}, a_{\alpha})$ é escrito na forma normal, como no caso das integrais de caminho, teremos:

$$e^{\epsilon H(a^{\dagger}a)} =: e^{\epsilon H(a^{\dagger}a)} : + O(\epsilon^2), \quad (\text{A.97})$$

o termo de ordem ϵ^2 é ϵ^2 vezes um operador finito, quando agindo sobre uma função de onda diferencial e normalizada $\psi(\phi_{\alpha}^*)$. Assim, os elementos do operador evolução podem ser escritos, como:

$$\begin{aligned} U(\phi_{\alpha,f}^* t_f; \phi_{\alpha,i} t_i) &= \lim_{M \rightarrow \infty} \langle\phi_f| e^{-\frac{i}{\hbar} H(t_f - t_i)} |\phi_i\rangle, \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^{M-1} \prod_{\alpha} \frac{1}{\mathcal{N}} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} e^{-\sum_{k=1}^{M-1} \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k}} \\ &\times e^{-\sum_{k=1}^{M-1} \left(\sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1} - \frac{i\epsilon}{\hbar} H(\phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1}) \right)}. \end{aligned} \quad (\text{A.98})$$

Nota-se que no caso de férmions, desde que não haja métrica na álgebra de Grassmann, todas as integrais indicadas na equação (A.98) são finitas. No tempo real, $e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar}H}$ é oscilatório e o fator $e^{\phi_{\alpha,k}^*\phi_{\alpha,k}}$ surge a partir da medida, e produz uma convergência. No caso do tempo imaginário, depende-se do fato físico de que o Hamiltoniano é direcionado a partir da parte inferior, o que implica que $H(\phi_{\alpha,k}^*\phi_{\alpha,k-1}) = \frac{\langle\phi_k|H|\phi_{k-1}\rangle}{\langle\phi_k|\phi_{k-1}\rangle}$ também é. Assim $e^{\phi_{\alpha,k}^*\phi_{\alpha,k-1}}$ é ligado e o fator gaussiano da medida converge. Introduzindo uma trajetória $\phi_\alpha(t)$ para representar o conjunto $\{\phi_{\alpha,1}\dots\phi_{\alpha,M}\}$, e as notações:

$$\phi_{\alpha,k}^* \frac{\phi_{\alpha,k} - \phi_{\alpha,k-1}}{\epsilon} \equiv \phi_\alpha^*(t) \frac{\partial}{\partial t} \phi_\alpha(t), \quad (\text{A.99})$$

e

$$H(\phi_{\alpha,k}^*; \phi_{\alpha,k-1}) \equiv H(\phi_\alpha^*(t), \phi_\alpha(t)), \quad (\text{A.100})$$

os expoentes da equação (A.98) podem ser escritos simbolicamente, como

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,M}^* \phi_{\alpha,M-1} - i \frac{\epsilon}{\hbar} H(\phi_{\alpha,M}^*; \phi_{\alpha,M-1}) \\ & + i\epsilon \sum_{k=1}^{M-1} \left[i \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \left(\frac{\phi_{\alpha,k} - \phi_{\alpha,k-1}}{\epsilon} \right) - \frac{1}{\hbar} H(\phi_{\alpha,k}^*; \phi_{\alpha,k-1}) \right] \\ & = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^*(t_f) \phi_{\alpha}(t_f) + \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt L(\phi_{\alpha}^*(t), \phi_{\alpha}(t)). \end{aligned} \quad (\text{A.101})$$

O operador Lagrangiano de Schroedinger é $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H$. A quantidade física correta é calculada através da realização da integral sobre a ação discreta. Em seguida, tomando o limite de $M \rightarrow \infty$, tem-se:

$$\begin{aligned} U(\phi_{\alpha,f}^* t_f; \phi_{\alpha,i} t_i) &= \int_{\phi_{\alpha}(t_i)=\phi_{\alpha,i}}^{\phi_{\alpha}^*(t_f)=\phi_{\alpha,f}^*} D[\phi_{\alpha}^*(t), \phi_{\alpha}(t)] e^{\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^*(t_f) \phi_{\alpha}(t_i)} \\ & \times e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt [\sum_{\alpha} i\hbar \phi_{\alpha}^*(t) \frac{\partial \phi_{\alpha}(t)}{\partial t} - H(\phi_{\alpha}^*(t), \phi_{\alpha}(t))]}, \end{aligned} \quad (\text{A.102})$$

sendo que

$$\int_{\phi_{\alpha}(t_i)}^{\phi_{\alpha}^*(t_f)} D[\phi_{\alpha}^*(t), \phi_{\alpha}(t)] = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^{M-1} \prod_{\alpha} \frac{1}{\mathcal{N}} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k}. \quad (\text{A.103})$$

Note que $\phi_{\alpha}^*(t_f)$ e $\phi_{\alpha}(t_i)$ são dados pelas condições de contorno, mas $\phi_{\alpha}(t_f)$ e $\phi_{\alpha}^*(t_i)$ correspondem as variáveis internas de integração, não sujeitas as condições de contorno. Uma diferença significativa entre as integrais funcionais dos estados coerentes (equação (A.102)) e as integrais de caminho de Feymann é a dependência sobre \hbar . No caso de Feymann, o termo $\frac{1}{\hbar}$ aparece como uma constante multiplicando um expoente inteiro, produzindo assim uma fase estacionária, sendo o caso clássico. No caso dos estados

coerentes, a ação contém \hbar dentro da Lagrangiana, o que produz um resultado distinto do caso clássico.

A.1.8 Função de Partição Para Sistema de Muitos Corpos

Na equação (A.94) a função de partição para um sistema de muitos corpos pode ser expresso em termos do traço de um operador evolução do tempo-imaginário. Usando o traço podemos escrever a função de partição dos estados coerentes, unificada para bósons e férmions para $\hbar = 1$, como:

$$\begin{aligned} Z &= Tr \exp \left[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N}) \right] \\ &= \int \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha}^* d\phi_{\alpha} \exp \left[-\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \phi_{\alpha} \right] \langle \varsigma\phi | \exp \left[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N}) \right] | \phi \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.104})$$

Quando a continuação da equação (A.85) para o tempo imaginário é substituída nesta expressão, o traço impõe condições de contorno periódicas ou antiperiódicas (não periódicas):

$$\begin{aligned} \phi_{\alpha,0} &= \phi_{\alpha} \\ \phi_{\alpha,M}^* &= \varsigma\phi_{\alpha}^*. \end{aligned} \quad (\text{A.105})$$

A equivalência das integrais de estados coerentes interiores e exteriores é enfatizada pela rotulação $\phi_{\alpha} = \varsigma\phi_{\alpha,M}$, tal que a função de partição resultante será:

$$Z = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} \frac{1}{N} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} \exp [-S(\phi^*, \phi)], \quad (\text{A.106})$$

onde

$$\begin{aligned} S(\phi^*, \phi) &= \epsilon \sum_{k=2}^M \left[\sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \left\{ \frac{(\phi_{\alpha,k} - \phi_{\alpha,k-1})}{\epsilon} - \mu\phi_{\alpha,k-1} \right\} + H(\phi_{\alpha,k}^*, \phi_{\alpha,k-1}) \right] \\ &+ \epsilon \left[\sum_{\alpha} \phi_{\alpha,1}^* \left\{ \frac{(\phi_{\alpha,1} - \varsigma\phi_{\alpha,M})}{\epsilon} - \mu\varsigma\phi_{\alpha,M} \right\} + H(\phi_{\alpha,1}^*, \varsigma\phi_{\alpha,M}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.107})$$

Com o uso da notação da trajetória, teremos:

$$\begin{aligned} Z &= \int_{\phi_{\alpha}(\beta) = \varsigma\phi_{\alpha}(0)} D(\phi_{\alpha}^*(\tau)\phi_{\alpha}(\tau)) \\ &\times \exp \left\{ -\int_0^{\beta} d\tau \left[\sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) \phi_{\alpha}(\tau) + H(\phi_{\alpha}^*(\tau), \phi_{\alpha}(\tau)) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.108})$$

Neste caso, as derivadas e integrais são definidas em termos da expressão discreta

da equação (A.102). A integração sobre variáveis complexas satisfazem as condições de contorno periódicas para o caso dos bósons e sobre variáveis de Grassmann satisfazem as condições de contorno antiperiódicas para o caso dos férmions.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] FISHER, K. H.; HERTZ, J. A. **Spin Glass**. 1. ed. Cambridge: Press Syndicate of the University of Cambridge, 1991. 399 p. 17, 18, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 45, 46, 79, 87
- [2] PUREUR, P. **Estado Sólido**. 2. ed. Porto Alegre/RS, BR: Instituto de Física UFRGS, 2010. 278 p. 17, 23, 24, 25
- [3] BINDER, K.; YOUNG, A. P. Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts and open questions. **Reviews of Modern Physics**, v. 58, p. 801–976, Out. 1986. 17, 18, 25, 26, 79
- [4] NISHIMORI, H. **Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing: An Introduction**. 1. ed. Oxford: Clarendon Press-Oxford, 2001. 252 p. 17, 25, 26, 38, 39, 40, 41, 44, 83, 84
- [5] EDWARDS, S. F.; ANDERSON, J. Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts and open questions. **Journal of Physics F: Metal Physics**, v. 5, p. 965–974, Fev. 1975. 17, 18, 43
- [6] SHERRINGTON, D.; KIRKPATRICK, S. Solvable Model of a Spin-Glass. **Physical Review Letters**, v. 35, p. 1792–1796, Dez. 1975. 17, 18, 43, 45, 56, 83
- [7] CANNELLA, V.; MYDOSH, J. A. Magnetic Ordering in Gold-Iron Alloys. **Physical Review B**, v. 6, p. 4220–4237, Dez. 1972. 18, 25, 28, 46
- [8] WENGER, L. E.; KEESOM, P. H. Magneti Ordering of $Au_{0.92}Fe_{0.08}$: A calorimetric investigation. **Physical Review B**, v. 11, p. 3497–3500, Maio 1975. 18, 25, 46
- [9] KEESOM, P. H.; WENGER, L. E. Calorimetric investigation of a spin glass alloy: CuMn. **Physical Review B**, v. 6, p. 4220–4237, Dez. 1976. 18, 46
- [10] SOUKOULIS, C.; LEVIN, K. Cluster mean-field model of the spin glasses: static properties. **Physical Review B**, v. 18, p. 1439–1445, Ago. 1978. 18, 19, 46
- [11] WU, W.; ELLMAN, B.; ROSENBAUM, T. F.; AEPPLI, G.; REICH, D. From Classical to Quantum Glass. **Physical Review Letters**, v. 67, p. 2076–2079, Out. 1991. 18, 20, 37, 50, 77, 79, 82
- [12] QUILLIAM, J. A.; MENG, S.; KYCIA, J. B. Experimental phase diagram and dynamics of a dilute dipolar-coupled Ising system. **Physical Review B**, v. 85, p.

184415, Out. 2012. 18, 20, 21, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 50, 77, 79

- [13] GINGRAS, M. J. P.; HENELIUS, P. Collective Phenomena in the $LiHo_xY_{1-x}F_4$ Quantum Ising Magnet: Recent Progress and Open Questions. **Journal of Physics: Conference Series**, v. 320, p. 012001, Mar. 2011. 18, 20, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 77
- [14] MORAIS, C.; ZIMMER, F. M.; LAZO, M. J.; MAGALHÃES, S. G.; NOBRE, F. D. Spin-glass phase transition and behavior of nonlinear susceptibility in the Sherrington-Kirkpatrick model with random fields. **Physical Review B**, v. 93, p. 224206, Jun. 2016. 18, 19, 20, 35, 50, 51, 52, 70, 72, 76, 77, 80, 81, 82
- [15] TABELI, S. M. A.; GINGRAS, M. J. P.; KAO Y.-J. AND STASIAK, P.; FORTIN, J.-Y. Induced Random Fields in the $LiHo_xY_{1-x}F_4$ Quantum Ising Magnet in a Transverse Magnetic Field. **Physical Review Letters**, v. 97, p. 237203, Dez. 2011. 18, 20, 50, 51, 52, 77, 79, 80, 81
- [16] MAGALHÃES, S.; MORAIS C. V. AND ZIMMER, F. M.; LAZO, M. J.; NOBRE, F. D. Nonlinear susceptibility of a quantum spin glass under uniform transverse and random longitudinal magnetic fields. **Physical Review B**, v. 95, p. 064201, Fev. 2017. 18, 19, 20, 21, 35, 37, 38, 50, 52, 53, 65, 70, 72, 76, 77, 80, 81, 82
- [17] ROMITTI M. V.; ZIMMER, F. M. M. C. V. S. G. Specific heat and nonlinear susceptibility in spin glasses with random fields. **Physical Review B**, v. 99, p. 014203–3500, Jan. 2019. 19, 50, 77
- [18] THEUMANN, A.; GUSMÃO, M. Quantum Ising Spin-Glass. **Physics Letters**, v. 105A, p. 311–314, Out. 1984. 19, 46, 47, 48, 49, 50, 65, 91
- [19] RAMIRES, A. P. Strongly Geometrically Frustrated Magnets. **Annual Review of Material Science**, v. 24, p. 453–480, 1994. 26
- [20] CANNELLA, V.; MYDOSH, J. A. Low Field Magnetic Susceptibility of Noble Metal-Transition Metal Spin Glass Alloys. **AIP Conference Proceedings**, v. 18, p. 651–655, 1974. 25, 28, 29
- [21] MULDER, C.; DUYNEVELDT, A. van; MYDOSH, J. Susceptibility of the $CuMn$ spin glass: Frequency and field dependences. **Physical Review B**, v. 23, p. 1384–1396, Fev. 1981. 28, 29, 30
- [22] NAGATA, S.; KEESOM, P.; HARRISON, H. Low-dc-field susceptibility of $CuMn$ spin glass. **Physical Review B**, v. 19, p. 3497–3500, Fev. 1979. 30, 31

- [23] WU, W.; BITKO, D.; ROSENBAUM, T. F.; AEPPLI, G. Quenching of the Nonlinear Susceptibility at a $T = 0$ Spin Glass Transition. **Physical Review Letters**, v. 71, p. 1919–1922, Set. 1993. 14, 35, 36, 37, 50, 51, 77, 79, 80, 82
- [24] THEUMANN, A.; SCHMIDT, A.; MAGALHÃES, S. The Ising spin glass in a transverse field revisited. Results of two fermionic models. **Physica A**, v. 311, p. 498–506, Jan. 2002. 38, 46, 56, 65, 73, 79, 91
- [25] SHERRINGTON, D.; KIRKPATRICK, S. Infinite-ranged models of spin-glasses. **Physical Review B**, v. 17, p. 4384–4403, Dez. 1978. 43, 45, 83
- [26] ALMEIDA, J. de; THOULESS, D. Stability of the Sherrington-Kirkpatrick solution of a spin glass model. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 11, p. 983–990, Jan. 1978. 45, 50, 65, 89, 90
- [27] MAGALHÃES, S.; ZIMMER, F. Fermionic Ising glasses in magnetic transverse field with BCS pairing interaction. **The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems**, v. 43, p. 187–193, Jan. 2005. 46
- [28] ROSENOW, B.; OPPERMANN, R. Tricritical behaviour of Ising spin glasses with charge fluctuations. **Physical Review Letters**, v. 77, p. 1608, Jan. 1996. 46, 79
- [29] FELDMANN, H.; OPPERMANN, R. Random magnetic interactions and spin glass order competing with superconductivity: Interference of the quantum Parisi phase. **The European Physical Journal B**, v. 10, p. 429–445, Jan. 1999. 46
- [30] MAGALHÃES, S. G.; THEUMANN, A. Fermionic Ising glasses with BCS pairing interaction. Tricritical behaviour. **The European Physical Journal B**, v. 9, p. 5–13, Maio 1999. 46
- [31] KIM, D.-H.; KIM, J.-J. Infinite-range Ising spin glass with a transverse field under the static approximation. **Physical Review B**, v. 66, p. 054432, Ago. 2002. 50, 51, 52, 77, 79, 80, 81
- [32] WANG, Y.-q.; LI, Z.-y. Longitudinal and transverse random-field Ising model. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 6, p. 10067–10074, Ago. 1994. 55
- [33] ORLAND, H.; NEGELE, J. **Quantum Many-particle Systems**. 1. ed. Boulder, CO: Westview Press, 1998. 476 p. 56, 97, 98, 99, 100, 101, 102, 103, 104, 105, 106
- [34] MORAIS, C.; ZIMMER, F. M.; MAGALHÃES, S. G. Stability conditions for

fermionic Ising spin-glass models in the presence of a transverse field. **Physica A**,
v. 388, p. 2140–2148, Feb. 2009. 50, 77, 89, 90