

**UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA - UDESC  
CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS - CCT  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA - PPGF**

Formação: Mestrado em Física

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO OBTIDA POR  
CÍNTIA FERNANDES DA SILVA**

**VIDRO DE SPIN FERMIÔNICO COM CLUSTERS EM  
CAMPO TRANSVERSO**

Apresentada em 24/02/2010 Perante a Banca Examinadora:

Dr. Fábio Mallmann Zimmer - CCT/UDESC (Presidente)

Dr. Miguel Ângelo Cavalheiro Gusmão - UFRGS

Dr. Sergio Garcia Magalhães - UFSM

Dr. Ben Hur Bernhard - CCT/UDESC

Dr. Holokx Abreu Albuquerque - CCT/UDESC (Suplente)

UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA - UDESC

CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS - CCT

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA - PPGF

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

Mestrando: Cíntia Fernandes da Silva

Orientador: Prof. Dr. Fábio Mallmann Zimmer - CCT/UDESC

**VIDRO DE SPIN FERMIÔNICO COM CLUSTERS EM  
CAMPO TRANSVERSO**

DISSERTAÇÃO APRESENTADA PARA  
OBTENÇÃO DO TÍTULO DE MESTRE EM  
FÍSICA DA UNIVERSIDADE DO ESTADO DE  
SANTA CATARINA, CENTRO DE CIÊNCIAS  
TECNOLÓGICAS - CCT, ORIENTADA PELO  
PROF. DR. FÁBIO MALLMANN ZIMMER.

Joinville

2010



## FICHA CATALOGRÁFICA

<b>NOME:</b> SILVA, Cíntia Fernandes da	
<b>DATA DA DEFESA:</b> 24/02/2010	
<b>LOCAL:</b> Joinville, CCT/UDESC	
<b>NÍVEL:</b> Mestrado	Número de Ordem: <b>07</b> - CCT/UDESC
<b>FORMAÇÃO:</b> Física	
<b>ÁREA DE CONCENTRAÇÃO:</b> Física	
<b>TÍTULO:</b> Vidro de Spin Fermiônico com Clusters em Campo Transverso.	
<b>PALAVRAS - CHAVE:</b> Desordem. Vidro de Spin. Modelo Fermiônico. Cluster.	
<b>NÚMERO DE PÁGINAS:</b> 89 p.	
<b>CENTRO/UNIVERSIDADE:</b> Centro de Ciências Tecnológicas da UDESC.	
<b>PROGRAMA:</b> Pós Graduação em Física - PPGF	
<b>CADASTRO CAPES:</b> 41002016011P-4	
<b>ORIENTADOR:</b> Dr. Fábio Mallmann Zimmer	
<b>PRESIDENTE DA BANCA:</b> Dr. Fábio Mallmann Zimmer	
<b>MEMBROS DA BANCA:</b> Dr. Fábio Mallmann Zimmer, Dr. Miguel Ângelo C. Gusmão, Dr. Sergio Garcia Magalhães, Dr. Ben Hur Bernhard, Dr. Holokx Abreu Albuquerque.	

## AGRADECIMENTOS

Durante o período de construção deste trabalho, tive muito apoio e agora chega o momento de agradecer a todos que de alguma forma contribuíram para a conclusão do mesmo.

Primeiramente, agradeço ao meu orientador Fábio Mallmann Zimmer, pelas discussões e por todo o apoio, dedicação e incentivo durante este trabalho de mestrado.

Agradeço à minha família, pelo apoio durante este período e por toda a minha vida. Agradeço a meu marido, Jair, por me incentivar a continuar, mesmo quando achava que não iria conseguir e pelo carinho e compreensão nos momentos difíceis.

Agradeço aos professores do CCT, pelos conhecimentos transmitidos durante às aulas.

Agradeço ao laboratório de Caos, pela disponibilização dos computadores do laboratório. Ao laboratório de Física da Matéria Condensada do CCT. Agradeço também ao laboratório de Física da Matéria Condensada do Centro de Ciências Naturais e Exatas, da Universidade Federal de Santa Maria, aos professores e alunos desse centro, pelo acolhimento, ajuda e pela disponibilização dos computadores.

Agradeço aos colegas do curso de mestrado pelos momentos divididos.

Agradeço aos membros da banca, Prof. Miguel Ângelo C. Gusmão, Prof. Sergio G. Magalhães, Prof. Ben Hur Bernhard, pelas sugestões e críticas.

Muito obrigada por tudo.

# RESUMO

SILVA, Cíntia Fernandes da. **Vidro de Spin Fermiônico com Clusters em Campo Transverso**. Dissertação (Mestrado em Física). Universidade do Estado de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Física, Joinville, 2010.

Este trabalho apresenta um modelo fermiônico de vidro de spin de Ising com formação de clusters na presença de um campo magnético transverso  $\Gamma$ . Esse modelo quântico considera interações de troca entre momentos magnéticos de clusters distintos (interações intercluster), que são dadas por variáveis aleatórias que obedecem uma distribuição de probabilidades gaussiana. Além disso, são consideradas interações de troca ferromagnéticas ( $J_o$ ) entre vizinhos mais próximos para sítios dentro do mesmo cluster (interações intracluster). As interações desordenadas interclusters são calculadas analiticamente usando o método das réplicas, no qual são adotadas as aproximações com simetria de réplicas e aproximação estática. Como resultado desse tratamento tem-se um modelo efetivo de um único cluster, onde as interações intraclusters são resolvidas numericamente sem aproximação por meio de técnicas de diagonalização exata. A partir deste modelo, obteve-se resultados para o parâmetro de ordem VS ( $q$ ), a autocorrelação do momento magnético total do cluster, a susceptibilidade linear ( $\chi$ ), o calor específico ( $C_v$ ) e diagramas de fase de  $T \times \Gamma$  (onde  $T$  é a temperatura) para diferentes intensidades de  $J_o$ , diferentes valores de  $\Gamma$  e tamanhos de clusters  $n_s$ . A curva para  $\chi$  sempre apresenta um pico característico na temperatura de congelamento  $T_f$ , onde  $q$  deixa de ser zero. Particularmente, a curva do  $C_v$  pode apresentar um máximo arredondado a uma temperatura  $T_o$  acima de  $T_f$  com uma pequena descontinuidade em  $T_f$ . O máximo em  $T_o$  é dependente das correlações de curto alcance ( $J_o$ ) e a descontinuidade em  $T_f$  deve-se à transição para a fase cluster de VS (interação intercluster). Entretanto, a descontinuidade em  $T_f$  gradativamente é diminuída quando  $n_s$  aumenta. Esse comportamento de  $C_v$  corresponde ao comportamento esperado para um sistema físico de VS, no qual  $C_v$  apresenta um máximo arredondado acima de  $T_f$  e nenhuma descontinuidade em  $T_f$ . A presença de  $\Gamma$  aumenta a distância entre  $T_o$  e  $T_f$ .

Os diagramas de fase mostram transições de segunda ordem entre a fase paramagnética, a altas temperaturas, e a fase cluster de VS, abaixo de  $T_f$ . Quando  $\Gamma$  aumenta, a linha crítica  $T_f$  tende a um ponto crítico quântico. Portanto, o modelo estudado é capaz de descrever o comportamento das quantidades termodinâmicas  $C_v$  e  $\chi$  que são esperados para sistemas de VS. Além disso, também permite investigar efeitos quânticos na fase cluster de VS.

**Palavras-chave:** Desordem. Vidro de Spin Quântico. Modelo Fermiônico. Cluster.

# ABSTRACT

SILVA, Cíntia Fernandes da. **Fermionic Spin Glass Model with Cluster in a Transverse Magnetic Field.** Master's Thesis Universidade do Estado de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Física, Joinville, 2010.

This work presents a fermionic Ising spin glass (SG) model with cluster formation in the presence of a transverse magnetic field  $\Gamma$ . This quantum SG model considers interactions among magnetic moments of different clusters (intercluster interactions), which are given by random variables that follow Gaussian probability distributions. Moreover, ferromagnetic exchange interactions ( $J_o$ ) are considered for nearest neighbors that belong to the same cluster (intracluster interaction). The intercluster disordered interactions are analytically calculated by using the replica method, in which is adopted the replica symmetry and the static approximation. As a result of this treatment an effective model of a single cluster is obtained, where the intracluster interactions are numerically computed by means of an exact diagonalization method. From this model, we obtained results for the SG order parameter ( $q$ ), the selfcorrelation of the cluster magnetic moment, the linear susceptibility ( $\chi$ ), the specific heat ( $C_v$ ) and phase diagrams of  $T \times \Gamma$  (where  $T$  is the temperature) for different values of  $J_o$ ,  $\Gamma$  and several cluster size  $n_s$ . The  $\chi$  curve always presents a sharp cusp at the freezing temperature  $T_f$  where  $q$  becomes nonzero. Particularly, the  $C_v$  curve can show a broad maximum at a temperature  $T_o$  above  $T_f$  with a small discontinuity at  $T_f$ . The maximum at  $T_o$  depends on the short-range correlations ( $J_o$ ) while the discontinuity at  $T_f$  is due to the transition to the cluster glass phase (intercluster interaction). However, the discontinuity at  $T_f$  is gradually diminished when  $n_s$  increases. This behavior of  $C_v$  corresponds to that expected for SG physical systems, in which the  $C_v$  presents a broad maximum for a temperature above  $T_f$  and no mark at  $T_f$ . The presence of  $\Gamma$  increases the distance between  $T_o$  and  $T_f$ . The phase diagrams show second-order transitions between the paramagnetic phase at high temperatures and

the cluster glass phase below  $T_f$ . When  $\Gamma$  increases the critical line  $T_f$  decreases, until it reaches a quantum critical point. Therefore, this model is able to describe the behavior of the thermodynamic quantities  $C_v$  and  $\chi$  that is expected to SG systems. Furthermore, it also allows investigating the quantum effects in the cluster glass phase.

**Keywords:** Disorder. Quantum Spin Glass. Fermionic Model. Cluster.

# Listas de Figuras

2.1	(a) Gráfico da susceptibilidade linear em função da temperatura para um vidro de spin canônico (sistema CuMn (0.94%)). Ao fundo são apresentados gráficos de $\chi$ para diferentes frequências de campo magnético. Notação adotada: (□) 1.33 kHz, (○) 234 Hz, (★) 10.4 Hz, (△) 2.6 Hz (adaptado de [17]). (b) Gráficos da susceptibilidade linear em função da temperatura para o sistema de CeNi <sub>0.8</sub> Cu <sub>0.2</sub> , que apresenta formação de clusters. Ao fundo são apresentadas as curvas da magnetização à ZFC e à FC para o sistema [6].	20
2.2	(a) Gráficos da magnetização em função da temperatura para o composto AgMn (2.6%). O ciclo (1 → 2 → 3 → 4 → 5) refere-se ao ciclo ZFC, e o ciclo (5 → 4 → 6 → 4 → 5) ao ciclo FC [1]. (b) Gráficos da magnetização remanente isotérmica (×) e da magnetização termorremanente (●) para o composto AuFe (0.5%) [2].	22
2.3	(a) Gráficos do calor específico para o sistema de CuMn com 2.79% de Mn, onde o máximo no calor específico está cerca de 20% acima de $T_f$ [2, 17]. (b) Gráficos do calor específico para um sistema de LiHo <sub>x</sub> Y <sub>1-x</sub> F <sub>4</sub> com concentração de Ho igual a $x = 0.167$ , com máximo em $T_o = 0.18\text{K}$ (adaptado de [29]). (c) Gráficos do calor específico para sistema de LiHo <sub>x</sub> Y <sub>1-x</sub> F <sub>4</sub> , com concentrações de Ho $x = 0.08$ , $x = 0.045$ , e $x = 0.018$ (adaptado de [31]).	23
2.4	Representação esquemática de uma rede quadrada frustrada [34].	24
2.5	Espaço de fase representativo de um vidro de spin (adaptado de [2]).	25
2.6	Diagrama de fase magnético obtido para o modelo SK (adaptado de [15]).	26
3.1	Diagramas de fase temperatura versus campo transverso para os modelos 2S e 4S (adaptado de [21]).	42

5.1	(a) Gráficos dos parâmetros $q$ e $r$ para $J_o = 1$ e $\Gamma = 0$ , nos casos em que não há cluster ( $n_s = 1$ ) e para os tamanhos de cluster $n_s = 3$ e $n_s = 6$ . (b) Gráficos dos parâmetros $q$ e $r$ para $J_o = 1$ e $\Gamma = 0,5$ , nos casos em que não há cluster ( $n_s = 1$ ) e para os tamanhos de clusters $n_s = 3$ e $n_s = 6$ . . . . .	63
5.2	(a) Gráficos dos parâmetros $q$ e $r$ para $n_s = 6$ , para diferentes valores de $J_o$ e com $\Gamma = 0$ . (b) Gráficos dos parâmetros $q$ e $r$ para $n_s = 6$ com $J_o$ variável para $\Gamma = 0,5$ . . . . .	65
5.3	(a) Gráficos do calor específico em função da temperatura para $n_s = 6$ , diferentes interações intracluster $J_o$ para $\Gamma = 0$ . (b) Gráficos do calor específico em função da temperatura e do parâmetro de ordem VS para $n_s = 6$ , $J_o$ variável com $\Gamma = 0,5$ . 67	
5.4	(a) Gráfico do calor específico em função da temperatura para $n_s = 3$ , $J_o = 11,2$ , máximo devido à interação intracluster em $T_o = 2,15 T_f$ . (b) Gráfico do calor específico em função da temperatura para $n_s = 3$ , $J_o = 19,5$ , máximo devido à contribuição intracluster em $T_o = 3,94 T_f$ . . . . .	68
5.5	(a) Gráficos do calor específico em função da temperatura para diferentes tamanhos de clusters, com $J_o = 8,40$ e $\Gamma = 0$ . (b) Gráficos do calor específico em função da temperatura e do parâmetro de ordem VS $q$ para diferentes tamanhos de clusters, com $J_o = 8,40$ e com $\Gamma = 0,5$ . . . . .	69
5.6	(a) Gráficos do calor específico em função da temperatura para diferentes tamanhos de clusters, com $J_o$ ajustado de modo que o máximo arredondado esteja em $T_o = 1,3 T_f$ para $\Gamma = 0$ , onde $T_f = 1$ . (b) Curvas do calor específico para $n_s = 3$ e $n_s = 6$ para os mesmos valores de $J_o$ porém com $\Gamma = 1,0$ . Nesta figura, os parâmetros de ordem são mostrados indicando a temperatura de transição para cada caso. . . . .	70
5.7	(a) Gráficos da susceptibilidade linear em função da temperatura, com $J_o = 1$ e $\Gamma = 0$ , para o caso onde não há formação de cluster ( $n_s = 1$ ), e para tamanhos de cluster $n_s = 3$ e $n_s = 6$ . (b) Gráficos da susceptibilidade linear em função da temperatura e dos parâmetros de ordem VS, com $J_o = 1$ e $\Gamma = 0,5$ , para o caso sem cluster ( $n_s = 1$ ) e para $n_s = 3$ e $n_s = 6$ . . . . .	71

5.8 (a) Gráficos da susceptibilidade linear em função da temperatura para o tamanho de cluster $n_s = 6$ , diferentes intensidades de interação intracluster $J_o$ , com $\Gamma = 0$ . (b) Gráficos da susceptibilidade linear em função da temperatura para $n_s = 6$ , com $J_o$ variável e $\Gamma = 1, 0$ .	72
5.9 (a) Diagramas de fase temperatura versus campo transverso para os modelos 2S e 4S para $n_s = 1$ . (b) Diagramas de fase temperatura versus campo transverso para o modelo 2S para $n_s = 3$ , $J_o = 1$ .	74
5.10 (a) Diagramas de fase temperatura versus campo transverso para $n_s = 3$ , distintos valores de $J_o$ e para o modelo 2S. (b) Diagramas de fase temperatura por campo transverso para $n_s = 6$ , com $J_o$ variável para o modelo 2S.	75

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>14</b>
<b>2</b>	<b>Caracterização Experimental dos Vidros de Spin</b>	<b>19</b>
<b>3</b>	<b>Modelos Teóricos</b>	<b>28</b>
3.1	Modelo de Vidro de Spin Clássico na Presença de Cluster . . . . .	28
3.2	Vidro de Spin de Ising em um Campo Transverso . . . . .	34
<b>4</b>	<b>Modelo de Vidro de Spin Fermiônico com Cluster em um Campo Transverso</b>	<b>44</b>
4.1	Cálculos Analíticos . . . . .	53
4.1.1	Calor Específico . . . . .	53
4.1.2	Susceptibilidade Linear . . . . .	54
4.2	Caso Particular de um Único Sítio por Cluster . . . . .	56
4.3	Caso Geral . . . . .	59
<b>5</b>	<b>Resultados</b>	<b>61</b>
5.1	Parâmetros de Ordem Vidro de Spin . . . . .	62
5.2	Calor Específico . . . . .	65
5.3	Susceptibilidade Magnética . . . . .	71
5.4	Diagramas de Fase . . . . .	73
<b>6</b>	<b>Conclusão</b>	<b>76</b>
<b>A</b>	<b>Integrais de Caminho Fermiônicas</b>	<b>80</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>86</b>

# Capítulo 1

## Introdução

O vidro de spin (VS) é um estado magnético caracterizado pelo congelamento aleatório de seus momentos magnéticos abaixo de uma temperatura crítica ( $T_f$ ) [1]. Sistemas físicos que apresentam um comportamento de VS têm sido relatados desde a década de 70 em ligas magnéticas diluídas e possuem propriedades peculiares, como por exemplo, a ocorrência de um estado metaestável e altamente irreversível, sem ordenamento espacial de longo alcance convencional (ferro ou antiferromagnético), abaixo de  $T_f$  [2]. Para a existência da fase VS, duas características são fundamentais: desordem e competição entre interações (frustração) [3].

Recentemente, sistemas de elétrons fortemente correlacionados têm recebido grande destaque na área de matéria condensada, principalmente devido à descoberta de compostos de férniions pesados e supercondutores de altas temperaturas [4]. Em alguns desses sistemas, a desordem exerce um papel relevante podendo levar a uma frustração, e, por consequência, a uma fase vidro de spin. Um interesse particular nesses sistemas de elétrons fortemente correlacionados é a existência da fase vidro de spin em aglomerados de spins (“clusters” de spins). Como exemplo, tem-se os resultados experimentais obtidos para a série  $\text{CeNi}_{1-x}\text{Cu}_x$  [5, 6] e para a série  $\text{Sr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Ru}_2\text{O}_7$  [7], que apresentam uma fase magnética descrita por vidro de spin com cluster (“cluster de VS”<sup>1</sup>). Outro exemplo muito recente é o composto  $\text{CePd}_{1-x}\text{Rh}_x$  [8], que também apresenta cluster de vidro de spin a baixas temperaturas. Sendo assim, o presente trabalho está focado em uma formulação fermiônica para um modelo quântico de cluster de VS, que pode ser útil para, posteriormente, descrever tais sistemas [9]. Um importante mecanismo físico envolvido nos sistemas fortemente correlacionados citados é a relação existente entre desordem, frustração, flu-

---

<sup>1</sup>A partir desse momento, nos referenciaremos a VS com cluster, que seria a tradução mais apropriada para “cluster glass”, como “cluster de VS”.

tuações quânticas e/ou térmicas [10], entre outras, que tornam as teorias propostas para o estudo do vidro de spin extremamente complexas, em particular, na descrição do vidro de spin quântico [11]. Portanto, é de fundamental relevância estudar modelos teóricos que permitam descrever talas relações. Neste sentido, o trabalho aqui desenvolvido propõe uma formulação fermiônica para um modelo teórico que descreva a fase vidro de spin com formação de clusters na presença de um campo transverso, o qual introduz flutuações de natureza quântica [12]. Nesse caso, a presença do campo transverso pode introduzir a ocorrência de um ponto crítico quântico no presente trabalho de cluster de VS fermiônico. Em particular, os resultados termodinâmicos obtidos a partir desse modelo podem ser úteis para o magneto  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$  [13], que é uma realização experimental de um VS de Ising em um campo transverso [14].

Alguns modelos teóricos foram propostos para descrever a fase VS. Um modelo bem conhecido na literatura é o modelo de Sherrington-Kirkpatrick (modelo SK) [15], no qual são usadas variáveis clássicas de spins de Ising. Esse modelo considera interações entre momentos magnéticos dadas por variáveis aleatórias, que seguem uma distribuição de probabilidades Gaussiana [15]. A desordem é garantida por essas variáveis aleatórias, que também podem levar a uma frustração [2]. Para o estudo teórico desse modelo, o tratamento sobre a desordem é realizado através do método das réplicas [16]. Com esse tratamento, o problema original reduz-se a um problema efetivo de um único sítio sob a influência de um campo médio gerado pelos demais sítios. Este modelo, porém, gera alguns resultados não compatíveis com os resultados experimentais, como por exemplo, os resultados obtidos para o calor específico. Experimentalmente, sistemas físicos de VS apresentam na curva do calor específico um máximo arredondado acima da temperatura de transição  $T_f$  e nenhuma anomalia em  $T_f$  [2]. Para a susceptibilidade magnética, o comportamento observado é um pico bem acentuado na temperatura de transição [17]. Entretanto, os resultados teóricos obtidos para o calor específico através do modelo SK apresentam um pico abaixo de  $T_f$  [15], discordando dos resultados esperados para um sistema físico de VS [17]. Contudo, o resultado obtido através do modelo SK para a susceptibilidade magnética está de acordo com o resultado experimental, ou seja, pico bem marcado em  $T_f$  [17].

Com a intenção de melhorar os resultados termodinâmicos obtidos pelo modelo SK,

Soukoulis e Levin propuseram um modelo teórico para investigar a fase vidro de spin introduzindo um termo de correlações de curto alcance [18]. Esse modelo, conhecido como modelo de cluster de VS, considera interações aleatórias de troca entre momentos magnéticos de clusters distintos, que seguem uma distribuição de probabilidades Gaussiana semelhante a do modelo clássico de Sherrington-Kirkpatrick [15]. Isto é, o modelo de cluster de vidro de spin considera clusters correlacionados como entidades básicas ao invés de spins individuais [18]. Como resultados deste modelo encontra-se na curva da susceptibilidade magnética um pico acentuado na temperatura de transição e, para o calor específico, um máximo arredondado a uma temperatura  $T_o$  acima de  $T_f$  [18]. Esses dois comportamentos estão de acordo com os resultados esperados para um sistema físico de VS [17]. Particularmente, Soukoulis propôs um modelo de cluster de VS no qual os spins são tratados como variáveis clássicas de spin de Ising [19].

Outro estudo teórico que tem recebido grande destaque nos últimos anos é o modelo de VS quântico [11]. Um modelo de VS quântico que tem sido extensivamente estudado é o modelo de VS de Ising na presença de um campo transverso, porém sem a presença de clusters [20]. Em particular, esse modelo também é estudado no formalismo fermiônico [21, 22, 23]. Nesse formalismo, os operadores de spins são escritos em termos de combinações bilineares de operadores fermiônicos. O modelo de VS fermiônico em um campo transverso tem, como característica, a ocorrência de uma transição de fase à temperatura nula, ou seja, um ponto crítico quântico [12].

O presente trabalho tem, por objetivo, estudar um modelo teórico de cluster de vidro de spin fermiônico na presença de um campo transverso. O campo magnético aplicado transversalmente ao acoplamento de Ising é um termo não-comutativo e, por essa razão, é responsável por introduzir flutuações quânticas ao problema. Portanto, o problema de cluster de VS fermiônico na presença de um campo transverso trata-se de um problema quântico. No modelo proposto de VS fermiônico com cluster, os operadores de spin são escritos em termos de combinações bilineares de operadores fermiônicos. Essa formulação com operadores fermiônicos é conhecida como formulação fermiônica [24]. A vantagem em utilizar a formulação fermiônica é que ela tem uma aplicação natural nos problemas de matéria condensada, onde os operadores fermiônicos podem representar elétrons que participam de outros fenômenos, como efeito Kondo [25] ou supercondutividade [26].

Para tratamento da desordem no modelo de cluster de VS fermiônico, o método das réplicas [16], bem como a aproximação de simetria de réplicas e aproximação estática [11], são usados para obter um problema efetivo de um único cluster sob a influência dos demais, que é resolvido numericamente por métodos de diagonalização exata. As propriedades termodinâmicas do vidro de spin fermiônico, como susceptibilidade estática, calor específico e os parâmetros de ordem VS, são analisados para diversos tamanhos de clusters, intensidades de interações ferromagnéticas intracluster e intensidades de campo transverso. Diagramas de fases de temperatura por campo transverso também são obtidos para o modelo teórico proposto. Assim, pretende-se estudar as relações entre tamanho de cluster, interações ferromagnéticas de curto alcance, flutuações quânticas, desordem e frustração.

O presente modelo quântico de cluster de VS fermiônico pretende melhorar tanto os resultados obtidos através do modelo de VS de Ising em um campo transverso, sem cluster, desenvolvido por Theumann et al. [21], quanto os resultados obtidos através do modelo de VS clássico com clusters para variáveis de spins de Ising [19]. A análise do modelo de VS fermiônico em um campo transverso, sem cluster, é realizada através de uma aproximação de campo médio, ou seja, através dos procedimentos adotados para resolução desse problema de VS quântico, chega-se a um problema efetivo de um único sítio sob a influência de um campo médio gerado pelos demais sítios [21]. Com esse tipo de aproximação, portanto, perde-se informações localizadas sobre o problema como, por exemplo, as informações sobre as interações entre sítios vizinhos. No modelo proposto nesta dissertação (cluster de VS fermiônico), dentro de um mesmo cluster, a aproximação de campo médio não é assumida, assim, obtém-se contribuições mais localizadas, ou seja, informações de curto alcance dentro do cluster. Em relação ao modelo de cluster de VS clássico [19], o modelo de cluster de VS fermiônico em um campo transverso é um modelo quântico que tem a possibilidade de chegar a uma transição de fase à temperatura nula [12].

A presente dissertação está dividida da forma descrita a seguir. No capítulo 1 é feita uma introdução ao trabalho desenvolvido. No capítulo 2, são apresentadas as características encontradas experimentalmente nos sistemas físicos de VS, que são utilizadas para caracterizar a fase VS.

No capítulo 3, são discutidos dois modelos de extrema importância para o trabalho desenvolvido: o modelo de VS clássico com cluster [19] e o modelo de VS de Ising em um campo transverso [21]. A seção 3.1 é destinada à análise do modelo teórico de VS com presença de cluster proposto por Soukoulis [19]. Na seção 3.2, o problema de VS de Ising em um campo transverso [21] é estudado.

No capítulo 4, é discutido o modelo teórico proposto de cluster de VS em presença de um campo transverso, escrito no formalismo fermiônico [27]. Na seção 4.1, são discutidos como se calcula, analiticamente, algumas quantidades termodinâmicas. Um caso particular do modelo de cluster de VS em um campo transverso é discutido na seção 4.2. O caso particular analisado é o caso onde não há formação de cluster.

No capítulo 5, os resultados obtidos a partir do modelo proposto de cluster de VS fermiônico em presença de um campo transverso são apresentados. Na seção 5.1, são analisados os comportamentos do parâmetro de ordem VS e da autocorrelação de momento magnético total do cluster para diferentes intensidades de interação ferromagnética intracluster ( $J_o$ ), para um dado tamanho de cluster ( $n_s$ ) fixo e para uma intensidade de interação intracluster fixa, variando-se o tamanho do cluster. Os comportamentos dessas grandezas são analisados na ausência e na presença de um campo magnético transverso. Na seção 5.2, o calor específico é investigado para diferentes tamanhos de clusters, diferentes interações intracluster na ausência e na presença de um campo transverso. A susceptibilidade linear é analisada na seção 5.3 variando-se a interação intracluster, para  $n_s$  fixo, e para um  $J_o$  fixo, variando-se o tamanho do cluster. Os resultados são obtidos quando não há presença de um campo transverso e quando este está presente. Diagramas de fase de temperatura por campo transverso são discutidos na seção 5.4. No capítulo 6, são apresentadas as considerações finais do trabalho desenvolvido. No apêndice A, é descrita o formalismo das integrais de caminho fermiônicas, o que será útil para o estudo dos modelos fermiônicos descritos nesta dissertação.

## Capítulo 2

# Caracterização Experimental dos Vidros de Spin

Algumas características encontradas experimentalmente nos sistemas de VS são usadas para caracterizar a fase magnética vidro de spin [2, 5, 6, 28]. Dentre elas, destacam-se: pico agudo no gráfico da susceptibilidade linear, o qual depende da frequência do campo magnético aplicado; ausência de ordem magnética de longo alcance abaixo da temperatura de transição  $T_f$ ; congelamento dos momentos magnéticos em direções aleatórias abaixo de  $T_f$ ; efeitos de histerese e remanência magnética, que decai lentamente com o tempo [2]; efeito de irreversibilidade da magnetização e da susceptibilidade DC abaixo da temperatura de transição  $T_f$ , isto é, há dois modos de fazer as medidas da magnetização e da susceptibilidade: uma é resfriar as amostras a campo nulo, em seguida aplicar um campo magnético constante por um determinado tempo e então desligá-lo. Esse procedimento é chamado de “zero-field-cooling”(ZFC). Outro modo de medir a susceptibilidade e a magnetização é resfriar a amostra, porém, com um campo magnético constante aplicado e depois desligá-lo, o qual é chamado de “field-cooling”(FC). Os resultados obtidos a partir do resfriamento a campo nulo (ZFC) são diferentes das mesmas grandezas medidas após o resfriamento com campo aplicado (FC) [1, 2].

Os sistemas magnéticos descritos por cluster de VS apresentam características semelhantes ao VS canônico (spins individuais), tais como: pico característico no gráfico da susceptibilidade linear na temperatura de transição [5]; dependência do pico na susceptibilidade com a frequência do campo magnético aplicado [5]; congelamento aleatório dos momentos magnéticos dos clusters abaixo de  $T_f$  (temperatura na qual ocorre a transição para a fase cluster de VS) [5]. Também apresentam efeitos de irreversibilidade para as

curvas da susceptibilidade e da magnetização DC.

Na figura (2.1), estão representados os gráficos da susceptibilidade AC, a campos magnéticos fracos, para dois sistemas: para o sistema de VS canônico CuMn (0.94%) [17] (figura 2.1(a)) e para a liga de  $\text{CeNi}_{0.8}\text{Cu}_{0.2}$ , que apresenta comportamento descrito por cluster de VS [6] (figura 2.1(b)). Observa-se na figura (2.1(a)) um pico bem acentuado na temperatura de transição  $T_f$ , o qual é usado para marcar a transição entre a fase paramagnética, a altas temperaturas, e a fase VS, para  $T < T_f$ . Nessa mesma figura, ao fundo, nota-se que há um ligeiro arredondamento no pico da susceptibilidade e, o mais importante, que há uma dependência desse pico com a frequência do campo magnético aplicado [17].

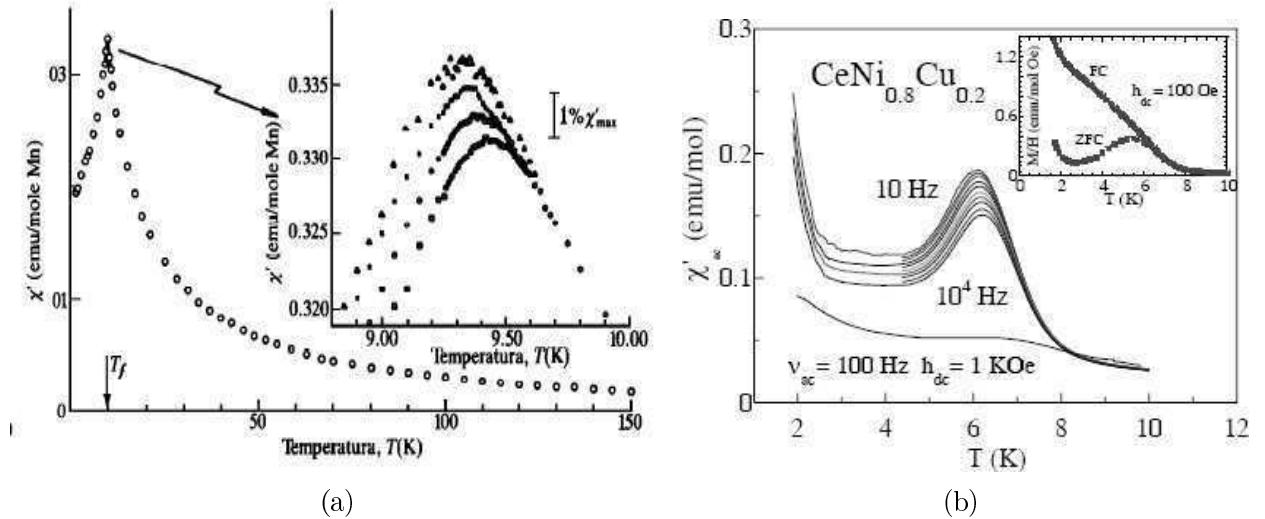


Figura 2.1: (a) Gráfico da susceptibilidade linear em função da temperatura para um vidro de spin canônico (sistema CuMn (0.94%)). Ao fundo são apresentados gráficos de  $\chi$  para diferentes frequências de campo magnético. Notação adotada: (◻) 1.33 kHz, (○) 234 Hz, (★) 10.4 Hz, (△) 2.6 Hz (adaptado de [17]). (b) Gráficos da susceptibilidade linear em função da temperatura para o sistema de  $\text{CeNi}_{0.8}\text{Cu}_{0.2}$ , que apresenta formação de clusters. Ao fundo são apresentadas as curvas da magnetização à ZFC e à FC para o sistema [6].

Na figura (2.1(b)), são apresentados os gráficos da susceptibilidade linear em função da temperatura para o composto  $\text{CeNi}_{0.8}\text{Cu}_{0.2}$ , que apresenta um comportamento de cluster de vidro de spin [6]. Nesse gráfico, observa-se também que o pico na susceptibilidade é dependente da frequência do campo magnético aplicado, ou seja, se a frequência do campo aplicado é diminuída, a temperatura de congelamento também diminui. O pico acentuado em  $T_f$  e a dependência desse pico com a frequência do campo aplicado são características

usadas para caracterizar a fase vidro de spin e também a fase cluster de VS.

No fundo da figura (2.1(b)), estão representados os gráficos da magnetização em função da temperatura. A magnetização DC apresenta efeitos de irreversibilidade, ou seja, apresenta comportamentos diferentes dependendo de como é realizada a medida. Quando resfria-se a amostra sem campo magnético aplicado (ZFC), o comportamento da magnetização é diferente de quando ela é resfriada com campo aplicado (FC) [6]. Esse comportamento também é evidenciado na figura (2.2(a)) para o sistema de VS canônico AgMn (2.6%) [2], e essa é outra característica encontrada experimentalmente nos sistemas que apresentam comportamento vidro de spin [1].

Na figura (2.2(a)), tem-se os gráficos da magnetização DC em função da temperatura para dois tipos de medidas, ou ciclos, distintos. No ciclo  $(1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 5)$  o sistema é resfriado sem campo externo aplicado (ZFC). Primeiramente, resfria-se a amostra de  $T \gg T_f$  até  $T \ll T_f$  ( $1 \rightarrow 2$ ), em seguida aplica-se um campo DC baixo e a magnetização assume valores positivos ( $2 \rightarrow 3$ ), a temperatura aumenta e a curva de magnetização segue o caminho ( $3 \rightarrow 4 \rightarrow 5$ ). Quando resfria-se a amostra, porém, com campo externo constante aplicado, a magnetização segue o percurso ( $5 \rightarrow 4$ ), entretanto, para  $T < T_f$ , ela segue ( $4 \rightarrow 6$ ), sendo praticamente independente da temperatura [1].

Outra característica experimental de um sistema de vidro de spin é a magnetização remanente, isto é, após desligar o campo magnético aplicado, encontra-se uma magnetização remanente que decai lentamente com o tempo [3]. Esta também é irreversível e depende da forma como as amostras foram preparadas. Um meio de obter a magnetização remanente é resfriar a amostra a campo nulo até a temperatura de interesse e, em seguida, aplicar um campo magnético conhecido durante um determinado intervalo de tempo e então desligá-lo novamente. Assim, tem-se o gráfico da magnetização remanente isotérmica (IRM) [3]. O outro modo de preparar as amostras é resfriá-las lentamente com um campo magnético constante aplicado até  $T \ll T_f$  e então desligá-lo. Nesse caso, tem-se o gráfico da magnetização termorremanente (TRM) [2]. Os comportamentos para a magnetização remanente isotérmica (IRM) e para a magnetização termorremanente (TRM) são apresentados na figura (2.2(b)). Enquanto TRM não depende da temperatura inicial, ela depende do tempo de espera para medi-la após o campo ser desligado. Porém, a magnetização remanente isotérmica (IRM) depende tanto do tempo em que o

campo permanece aplicado quanto do tempo esperado para medir a IRM após o mesmo ser desligado [2]. A campos altos, as magnetizações IRM e TRM tendem ao mesmo valor de saturação.

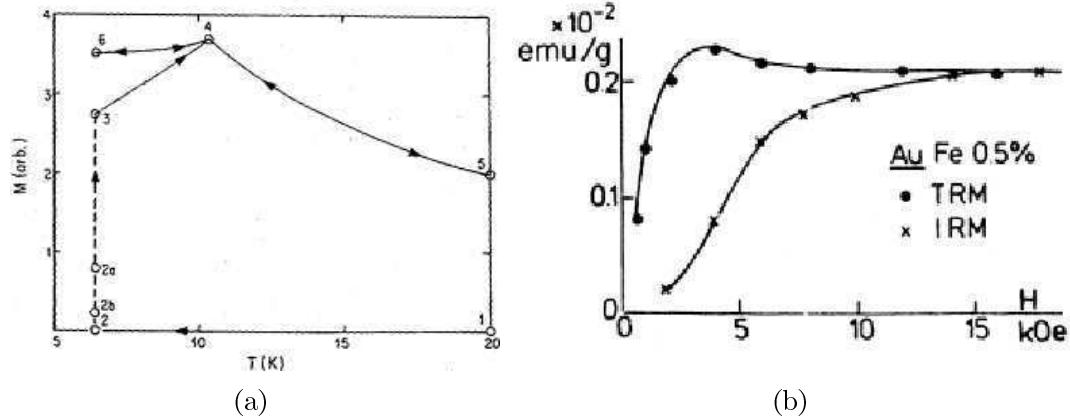


Figura 2.2: (a) Gráficos da magnetização em função da temperatura para o composto AgMn (2.6%). O ciclo  $(1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 5)$  refere-se ao ciclo ZFC, e o ciclo  $(5 \rightarrow 4 \rightarrow 6 \rightarrow 4 \rightarrow 5)$  ao ciclo FC [1]. (b) Gráficos da magnetização remanente isotérmica ( $\times$ ) e da magnetização termorremanente ( $\bullet$ ) para o composto AuFe (0.5%) [2].

O calor específico de um sistema vidro de spin apresenta um máximo bastante arredondado a uma temperatura  $T_o$  acima da temperatura de transição  $T_f$  [2], onde  $T_o \sim 1.2 - 1.4 T_f$ . Esse comportamento é observado na figura (2.3(a)) para um sistema de CuMn (2.79%) [2]. Nessa figura, nota-se também que, na presença de um campo magnético, o máximo no gráfico do calor específico progressivamente é arredondado. Medidas do calor específico magnético não indicam nenhuma anomalia na temperatura de transição para um VS canônico [2]. Isso pode ocorrer, pois, aparentemente, uma considerável quantidade de graus de liberdade dos spins já congelam acima de  $T_f$ , na região onde surge o máximo, que deve ser devido à formação de ordem de curto-alcance [17]. Na figura (2.3(b)), tem-se o gráfico do calor específico para o composto de  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$  em uma concentração de Hólmio de  $x = 0.167$  [29]. Para essa concentração, esse composto apresenta comportamento de um sistema de VS, onde a temperatura de transição ao VS corresponde à  $T_f = 0.13 \text{ K}$  [30]. A curva do calor específico, para essa concentração, apresenta um máximo arredondado em  $T_o = 0.18 \text{ K}$  [29], cerca de 20 – 30% acima da temperatura de transição. Assim, para concentrações intermediárias, o comportamento do calor específico é o esperado para um VS. Diminuindo a concentração de Ho para  $x = 0.045$  (ver fig. (2.3(c))), o máximo arredondado ocorre por volta de  $0.15 \text{ K}$  [31]. Entretanto,

recentes estudos experimentais mostram que a temperatura de transição encontrada para essa concentração está em torno de 43 mK [32], o que está muito abaixo dos 20 – 30% esperado para um VS usual [2]. Alguns trabalhos sugerem que essa discrepância deve-se a efeitos quânticos que surgem no sistema quando  $x$  é pequeno [32, 33].

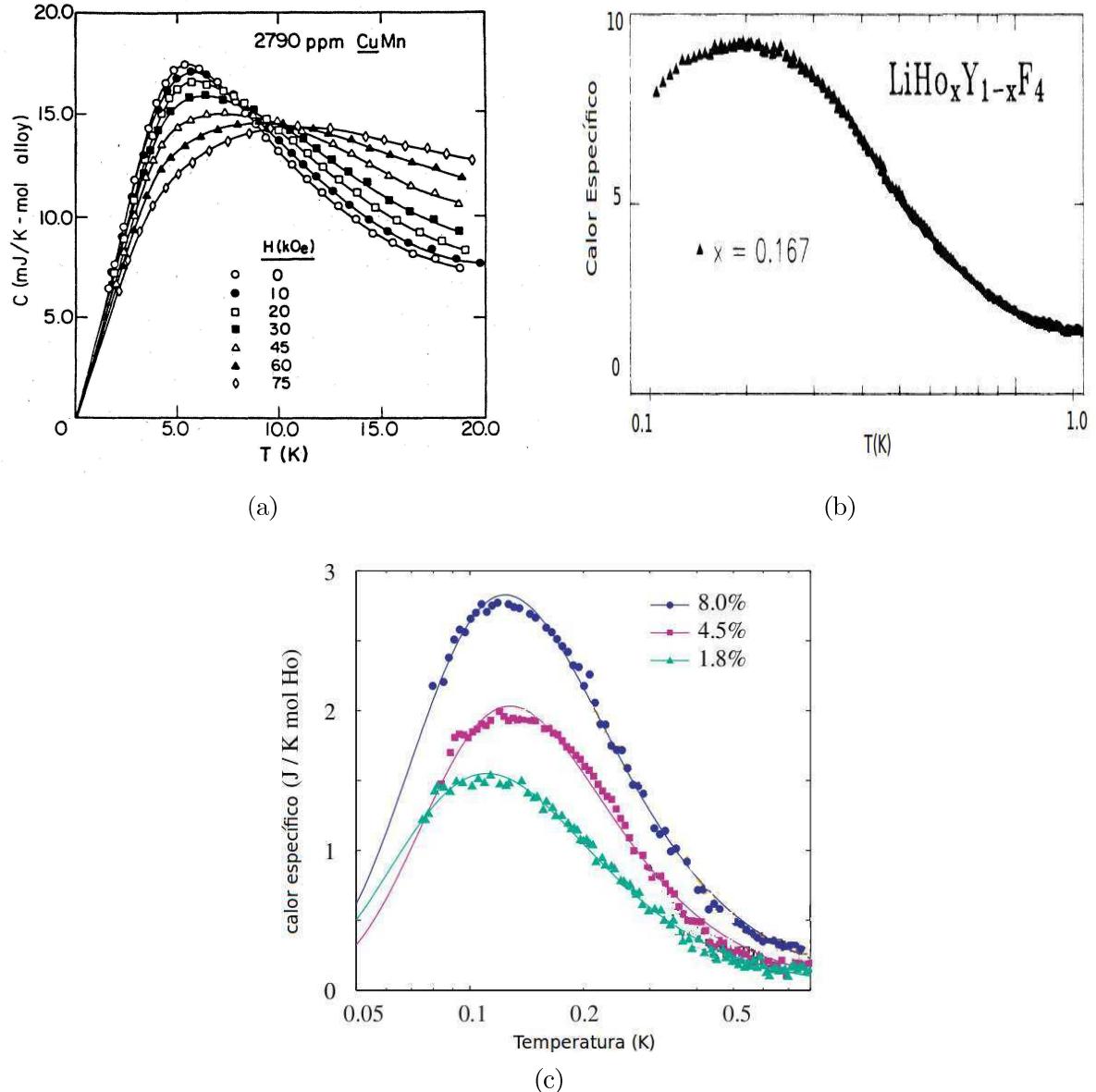


Figura 2.3: (a) Gráficos do calor específico para o sistema de CuMn com 2.79% de Mn, onde o máximo no calor específico está cerca de 20% acima de  $T_f$  [2, 17]. (b) Gráficos do calor específico para um sistema de  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$  com concentração de Ho igual a  $x = 0.167$ , com máximo em  $T_o = 0.18\text{K}$  (adaptado de [29]). (c) Gráficos do calor específico para sistema de  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ , com concentrações de Ho  $x = 0.08$ ,  $x = 0.045$ , e  $x = 0.018$  (adaptado de [31]).

O comportamento vidro de spin é observado em diversas ligas magnéticas diluídas,

onde íons de metais de transição, como Mn, Fe, são distribuídos de modo aleatório em sítios de metais nobres, como Au, Ag, Cu, Rh, os quais são chamados de hospedeiros. Para que um sistema apresente comportamento VS duas características devem estar presentes: desordem e frustração.

A desordem pode ser dada pela aleatoriedade na posição de cada spin na rede (experimentalmente) ou pelo sinal de interação entre vizinhos mais próximos (teoricamente). A frustração é uma competição entre interações, de tal forma que nem todas as interações podem ser satisfeitas simultaneamente. Esse conceito pode ser entendido com o exemplo da figura (2.4), onde spins de Ising estão dispostos em uma rede quadrada com interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas [34]. Nessa figura, observa-se que não é possível satisfazer todas as quatro interações ao mesmo tempo, pois o spin do topo do lado direito não obedece as duas interações simultaneamente, ou seja, obedecendo a interação com o spin da esquerda, ele deveria estar orientado para cima. Porém, obedecendo a interação com o spin debaixo, deveria apontar para baixo. Assim, define-se o conceito de rede frustrada, isto é, existe mais de uma configuração possível para o mesmo estado.

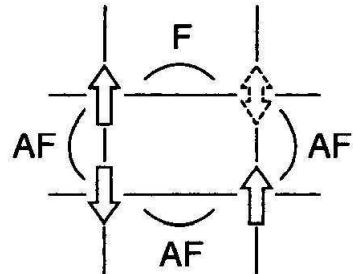


Figura 2.4: Representação esquemática de uma rede quadrada frustrada [34].

Esses ingredientes, desordem e frustração, juntos levam o sistema a um estado fundamental multidegenerado, onde existem vários mínimos locais de energia separados por barreiras de energia livre, relacionado à quebra de ergodicidade [3]. Desse modo, deve-se analisar a quebra de ergodicidade do vidro de spin. Acima de  $T_f$ , o sistema é ergódico (um sistema em equilíbrio é ergódico quando se encontra com uma probabilidade proporcional a  $\exp(-E/kT)$  em qualquer de suas configurações possíveis do espaço de fase [35]), abaixo dessa temperatura, ocorre a quebra de ergodicidade, no qual o espaço de fases é dividido

em muitos vales, separados por barreiras infinitamente altas de energia livre (no limite termodinâmico), tornando o estado fundamental altamente degenerado, em que os vales são termodinamicamente inacessíveis uns aos outros [3]. Essa representação do espaço de fase é denominada de “picture” de muitos vales e está representada na figura (2.5) [2]. A uma temperatura  $T = T_f - \delta T$  cada vale é dividido novamente em novos vales menores separados também por barreiras infinitas de energia livre [3]. Então, a cada diminuição da temperatura na fase VS, novas quebras de ergodicidade acontecem em cada vale e isso leva a uma sequência contínua de quebra de ergodicidade abaixo de  $T_f$  [3].

As características descritas acima mostram o comportamento de um sistema que relaxa, ou seja, a magnetização evolui no tempo devido às barreiras de potencial que separam os estados por uma quantia de energia livre. Assim, quando se resfria a amostra sem campo externo aplicado, o sistema não alcança um equilíbrio termodinâmico. Já com campo aplicado, o sistema tem a possibilidade de varrer todos os estados meta-estáveis (mínimos locais de energia livre) possíveis [2].



Figura 2.5: Espaço de fase representativo de um vidro de spin (adaptado de [2]).

Um modelo teórico para tratar o problema vidro de spin canônico é o modelo que considera spins localizados em uma rede regular, porém, com interações aleatórias entre os momentos magnéticos [16]. Posteriormente, Sherrington e Kirkpatrick propuseram uma interação de alcance infinito entre os spins, no qual o método das réplicas é usado para tratar a desordem do problema [15]. Esse modelo, conhecido como modelo SK [15], tem sido amplamente utilizado por ser exatamente solúvel. O modelo SK considera variáveis aleatórias de troca entre todos os pares de spins, que obedecem uma distribuição de probabilidades Gaussiana [15]. Para resolução da energia livre e das demais grandezas ter-

modinâmicas, é empregado o método das réplicas com aproximação de simetria de réplicas [15]. Como resultados desse modelo, tem-se o diagrama de fase magnético mostrado na figura (2.6), as curvas para a susceptibilidade estática e para o calor específico, além de resultados para a entropia [15].

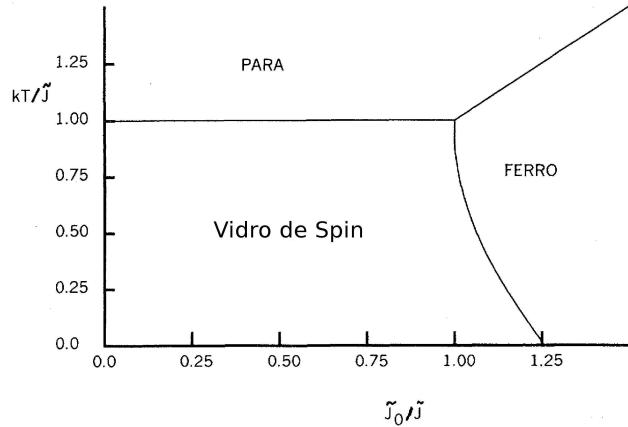


Figura 2.6: Diagrama de fase magnético obtido para o modelo SK (adaptado de [15]).

No diagrama de fase apresentado na figura (2.6), observa-se que, diminuindo a temperatura a partir de uma fase paramagnética, chega-se a uma fase ferromagnética, quando  $J_o > J$ , onde  $J$  está relacionado à largura da gaussiana que representa a interação aleatória entre os spins, ou seja,  $J$  representa a desordem do sistema, e  $J_o$  está relacionado com a interação média ferromagnética. Para  $J > J_o$ , diminuindo a temperatura a partir de uma fase paramagnética, chega-se à fase VS [15]. Os resultados obtidos para a susceptibilidade linear mostram um pico bem marcado na temperatura de transição [36], como esperado para um sistema físico de VS [2, 17]. Entretanto, esse modelo apresenta alguns resultados discordantes com os resultados experimentais para um VS. Como por exemplo, o resultado para o calor específico apresenta pico abaixo da temperatura de transição [15], contrário ao resultado esperado, pico na curva do calor específico acima da temperatura de transição [17]. Através do método utilizado para solução do modelo SK (método das réplicas com aproximação de simetria de réplicas [15]), problemas nos resultados para a entropia do sistema também são encontrados. Devido à aproximação de simetria de réplicas, encontra-se uma entropia negativa na fase VS, o que é fisicamente inaceitável, pois viola a segunda lei da termodinâmica. Isso ocorre, como mostrado por de Almeida e Thouless [37], pois a solução com simetria de réplicas é instável em toda a

fase VS. Entretanto, Parisi propôs um método de quebra de simetria de réplicas no qual a estabilidade da solução do VS é restabelecida com infinitos passos de quebra de simetria, onde a entropia deixa de ser negativa [38].

# Capítulo 3

## Modelos Teóricos

Neste capítulo, são apresentados dois modelos teóricos já conhecidos na literatura e de fundamental importância para o trabalho aqui desenvolvido. O modelo teórico de vidro de spin na presença de cluster, baseado no trabalho de Soukoulis [19], e o modelo teórico de vidro de spin de Ising fermiônico em presença de um campo transverso, sem cluster, escrito na formulação fermiônica, baseado no trabalho de Theumann et al. [21].

Na seção 3.1, é analisado o modelo de cluster de vidro de spin, que propõe uma teoria de campo médio de cluster de vidro de spin, no qual clusters correlacionados são as entidades básicas [19]. Esse modelo utiliza o método das réplicas com aproximação de simetria de réplicas [15] para obtenção da energia livre e das demais quantidades termodinâmicas.

Na seção 3.2, é discutido o modelo teórico de vidro de spin fermiônico em presença de um campo transverso, sem cluster [21]. Esse modelo consiste em uma interação desordenada entre spins de Ising na presença de um campo transverso, o qual introduz flutuações quânticas quando  $\Gamma > 0$ . Nesse modelo, os operadores de spins são escritos no formalismo fermiônico [21]. É importante ressaltar que nesse modelo não há formação de cluster. Além disso, são utilizadas a simetria de réplicas e a aproximação estática para tratar o problema de vidro de spin fermiônico [21].

### 3.1 Modelo de Vidro de Spin Clássico na Presença de Cluster

O crescente interesse em estudar clusters de vidro de spin deve-se a recentes pesquisas experimentais que evidenciam a existência de uma fase vidro de spin em aglomerados, denominada cluster de vidro de spin [5, 6, 7, 28]. Como exemplo, tem-se os resultados ex-

perimentais obtidos para a série de  $\text{CeNi}_{1-x}\text{Cu}_x$  [5] e a série de  $\text{CePd}_{1-x}\text{Rh}_x$  [8]. Quando a concentração de momentos magnéticos é suficientemente alta, a tendência em desenvolver correlações de curto alcance entre eles é aumentada. Assim, pode-se formar agregados (ou clusters) de momentos correlacionados magneticamente a curto alcance [6].

Com a intenção de obter resultados termodinâmicos compatíveis com os comportamentos esperados para um sistema físico de VS, Soukoulis e Levin [18] propuseram um modelo teórico que contém correlações de curto alcance [18]. Esse modelo tem como entidades básicas clusters correlacionados ao invés de spins individuais. No modelo de cluster de vidro de spin, pode-se considerar interações intracluster, ou seja, interações entre momentos magnéticos dentro de um mesmo cluster, que podem ser ferromagnéticas ou antiferromagnéticas, por exemplo. Esse modelo considera também interações aleatórias de troca entre momentos magnéticos de clusters distintos que seguem uma distribuição de probabilidades Gaussiana, semelhante a do modelo de Sherrington-Kirkpatrick (modelo SK) [15]. Em particular, Soukoulis propôs um modelo de cluster de VS no qual os spins são tratados como variáveis clássicas de spins de Ising, que podem assumir valores  $+1$  ou  $-1$  [19].

O modelo apresentado nesta seção, é muito semelhante ao modelo proposto por Soukoulis, entretanto, aqui são consideradas interações entre todos os vizinhos e no modelo de Soukoulis, as interações são somente entre primeiros vizinhos [19]. O Hamiltoniano que representa o modelo de Soukoulis [19] no estudo de cluster de vidro de spin clássico é

$$H = - \sum_{\nu < \lambda}^{N_{cl}} J_{\nu\lambda} S_{\nu} S_{\lambda} - \sum_{\nu=1}^{N_{cl}} \sum_{i < j}^{N_{sp}} J_{ij}^o S_{i\nu} S_{j\nu} , \quad (3.1)$$

onde  $J_{ij}^o$  são interações de troca entre spins dentro do cluster (interação intracluster),  $J_{\nu\lambda}$  variáveis aleatórias de interação de troca entre clusters (interação intercluster),  $N_{cl}$  é o número de cluster do sistema e  $N_{sp}$  o número de spins dentro do mesmo cluster. Nessa notação, índices gregos referem-se a clusters e índices romanos a spins dentro do mesmo cluster. Nesse trabalho, considerou-se que o tamanho de todos os clusters é  $N_{sp}$ . As variáveis aleatórias de troca  $J_{\nu\lambda}$  seguem a distribuição de probabilidades Gaussiana

$$P(J_{\nu\lambda}) = \sqrt{\frac{N_{cl}}{2\pi J^2}} \exp \left[ -\frac{(J_{\nu\lambda} - J_1)^2}{2J^2} N_{cl} \right] . \quad (3.2)$$

Para o cálculo da energia livre são necessários os cálculos de duas médias: a média termodinâmica usual e a média configuracional, isto é, média sobre as variáveis aleatórias

$J_{\nu\lambda}$ , que é dada pela média configuracional do logaritmo da função de partição, assim,

$$\beta F = -\frac{1}{N_{cl}} \langle \ln Z \rangle_{J_{\nu\lambda}} . \quad (3.3)$$

O método das réplicas, com aproximação de simetria de réplicas, é empregado para o cálculo da energia livre. O método das réplicas possibilita encontrar uma expressão analítica para a energia livre e consiste na igualdade matemática

$$\ln Z = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n} , \quad (3.4)$$

onde  $Z^n$  é a função de partição replicada  $n$  vezes, ou seja,  $Z^n = \prod_{\alpha=1}^n Z^\alpha$ , com  $n$  sendo um número inteiro e positivo. Isso significa que o sistema é replicado  $n$  vezes, com  $n$  réplicas idênticas e não-interagentes do mesmo sistema. Neste caso, a energia livre por cluster ( $f = \frac{F}{N_{cl}}$ ) é expressa como

$$f = -\frac{1}{N_{cl}} \frac{1}{\beta} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left[ \int dJ_{\nu\lambda} P(J_{\nu\lambda}) Z^n - 1 \right] , \quad (3.5)$$

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

$$\begin{aligned} Z_n &= \text{Tr} \int dJ_{\nu\lambda} \sqrt{\frac{N_{cl}}{2\pi J^2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[ \sum_{\nu\lambda} -\frac{(J_{\nu\lambda} - J_1)^2}{J^2} N_{cl} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - 2 \sum_{\alpha} \left( \sum_{\nu < \lambda} \beta J_{\nu\lambda} S_\nu^\alpha S_\lambda^\alpha \right) \right] + \beta \sum_{\nu} \sum_{ij} J_{ij}^o S_{i\nu}^\alpha S_{j\nu}^\alpha \right\} , \end{aligned} \quad (3.6)$$

onde  $\text{Tr}$  é o traço e  $\alpha$  representa o índice de réplica, com  $\alpha = 1, \dots, n$ . Reescrevendo a equação (3.6) na forma de quadrado perfeito, tem-se

$$\begin{aligned} Z_n &= \text{Tr} \int dJ_{\nu\lambda} \sqrt{\frac{N_{cl}}{2\pi J^2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[ \sum_{\nu\lambda} \left( \frac{J_{\nu\lambda} - J_1}{J} \sqrt{N_{cl}} + \sum_{\alpha} \beta J S_\nu^\alpha S_\lambda^\alpha \right)^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \sum_{\nu < \lambda} \left( \sum_{\alpha} \beta J S_\nu^\alpha S_\lambda^\alpha \right)^2 \right] - \sum_{\alpha} 2\beta J_1 \sqrt{N_{cl}} S_\nu^\alpha S_\lambda^\alpha + \beta \sum_{\alpha} \sum_{\nu} \sum_{ij} J_{ij}^o S_{i\nu}^\alpha S_{j\nu}^\alpha \right\} , \end{aligned} \quad (3.7)$$

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

$$\left( \sum_{\alpha} S_\nu^\alpha S_\lambda^\alpha \right)^2 = \left( \sum_{\alpha=1}^n S_\nu^\alpha S_\lambda^\alpha \right) \left( \sum_{\beta=1}^n S_\nu^\beta S_\lambda^\beta \right) . \quad (3.8)$$

Substituindo a equação (3.8) em (3.7) e calculando a média sobre a desordem encontra-se, para a função de partição replicada, a expressão

$$Z_n = \text{Tr} \exp \left[ \beta J_1 \sqrt{N_{cl}} \sum_{\alpha} \sum_{\nu < \lambda} S_{\nu}^{\alpha} S_{\lambda}^{\alpha} + \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\nu < \lambda} \frac{\beta^2 J^2}{2} S_{\nu}^{\alpha} S_{\lambda}^{\alpha} S_{\nu}^{\beta} S_{\lambda}^{\beta} + \beta \sum_{\alpha} \sum_{\nu} \sum_{ij} J_{ij}^o S_{i\nu}^{\alpha} S_{j\nu}^{\alpha} \right]. \quad (3.9)$$

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

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\nu < \lambda} S_{\nu}^{\alpha} S_{\lambda}^{\alpha} S_{\nu}^{\beta} S_{\lambda}^{\beta} &= \sum_{\nu < \lambda} \sum_{\alpha, \beta} S_{\nu}^{\alpha} S_{\nu}^{\beta} S_{\lambda}^{\alpha} S_{\lambda}^{\beta} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \left( \sum_{\nu} S_{\nu}^{\alpha} S_{\nu}^{\beta} \right)^2 - \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\nu} (S_{\nu}^{\alpha} S_{\nu}^{\beta})^2. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Considerando  $J_1 = 0$ , em que a função de distribuição Gaussiana é centrada na origem, e levando em conta que no limite termodinâmico ( $N_{cl} \rightarrow \infty$ ) o último termo da equação (3.10), que é da ordem de  $N_{cl}$ , pode ser desprezado quando comparado ao termo  $\sum_{\alpha, \beta} (\sum_{\nu} S_{\nu}^{\alpha} S_{\nu}^{\beta})^2$ , pois esse é da ordem de  $N_{cl}^2$ , obtém-se a seguinte expressão para a energia livre por cluster

$$f = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{N_{cl}} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left\{ \text{Tr} \exp \left[ \frac{J^2 \beta^2}{4} \sum_{\alpha, \beta} \left( \sum_{\nu} S_{\nu}^{\alpha} S_{\nu}^{\beta} \right)^2 + \sum_{\nu} \sum_{\alpha} \sum_{i < j} J_{ij}^o S_{i\nu}^{\alpha} S_{j\nu}^{\alpha} \right] \right\}. \quad (3.11)$$

O termo quadrático da equação (3.11) é linearizado com o auxílio da identidade matemática

$$\exp(\lambda a^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \exp \left( -\frac{x^2}{2} + \sqrt{2\lambda} ax \right). \quad (3.12)$$

Essa transformação introduz campos auxiliares  $q_{\alpha\beta}$  que estão relacionados aos parâmetros de ordem VS do sistema. Com essa transformação, a energia livre por cluster assume a forma

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

no qual o problema original reduziu-se a um problema efetivo de um único cluster com interações entre réplicas.

No limite termodinâmico, as integrais sobre os campos auxiliares  $q_{\alpha\beta}$  podem ser calculadas através do método “steepest descents”[17], que leva às equações ponto de sela ( $\frac{\partial f}{\partial q_{\alpha\beta}} = 0$ ), assim,

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

para  $\alpha \neq \beta$ , e

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

para  $\alpha = \beta$ , onde os campos  $q_{\alpha\beta}$  estão associados aos parâmetros de ordem VS, análogo ao parâmetro de ordem VS (modelo SK) [15, 16], e a correlação  $q_{\alpha\alpha}$  está associada, segundo a referência [19], ao momento magnético total do cluster.

Uma primeira aproximação para os elementos da matriz das réplicas  $q_{\alpha\beta}$  é considerar a aproximação com simetria de réplicas [15, 19], s

$$q_{\alpha\beta} = \begin{cases} M, & \text{se } \alpha = \beta \\ q, & \text{se } \alpha \neq \beta \end{cases}. \quad (3.16)$$

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

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

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

$$\left( \sum_{\alpha} S_{\nu}^{\alpha} \right)^2 = \sum_{\nu} (S_{\nu}^{\alpha})^2 + 2 \sum_{\alpha \neq \beta} S_{\nu}^{\alpha} S_{\nu}^{\beta}. \quad (3.18)$$

Substituindo a equação (3.18) em (3.17) e linearizando o termo quadrático com ajuda da equação (3.12), obtém-se

$$f = -\frac{1}{\beta} \left\{ \frac{\beta^2 J^2}{2} (q^2 - M^2) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-x^2/2} \ln \text{Tr} \exp \left[ \beta^2 J^2 \left( M - \frac{q}{2} \right) S_\nu^2 + \beta^2 J^2 \sqrt{q} S_\nu x - \sum_{ij} \beta J_{ij}^0 S_{i\nu} S_{j\nu} \right] \right\}, \quad (3.19)$$

onde na equação (3.19) os limites termodinâmico ( $N_{cl} \rightarrow \infty$ ) e do número de réplicas tendendo a 0 ( $n \rightarrow 0$ ) foram tomados e identifica-se o Hamiltoniano efetivo

$$H_{ef} = - \sum_{i < j} J_{ij}^0 S_{i\nu} S_{j\nu} - \beta J^2 \sqrt{q} S_\nu x + \beta J^2 \left( M - \frac{q}{2} \right) S_\nu^2, \quad (3.20)$$

onde o problema original reduziu-se a um problema efetivo de um único cluster sob à influência de um campo médio gerado pelos demais clusters. Logo, a energia livre por cluster, fica

$$f = -\frac{1}{\beta} \left\{ \frac{\beta^2 J^2}{2} (q^2 - M^2) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-x^2/2} \ln \text{Tr} \exp(-\beta H_{ef}) \right\}. \quad (3.21)$$

Através do método “steepest descents”, encontram-se os parâmetros

$$M = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2/2} \frac{\text{Tr} S_\nu^2 e^{-\beta H_{ef}}}{Z}, \quad (3.22)$$

que, de acordo com a referência [19], está relacionado ao momento magnético total do cluster, e

$$M - q = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2/2} x \frac{1}{\beta J \sqrt{q}} \frac{\text{Tr} S_\nu e^{-\beta H_{ef}}}{Z}, \quad (3.23)$$

onde  $q$  é o parâmetro de ordem VS usual,  $Z$  é a função de partição e  $H_{ef}$  está definido na equação (3.20).

O tratamento desse problema efetivo de um único cluster sobre a influência de um campo médio, que representa as interações com os demais clusters, é feita numericamente, isto é, as interações intracluster são calculadas numericamente usando técnicas de diagonalização exata. Em particular, este modelo efetivo é diagonal na base dos spins de Ising. O procedimento numérico usado para resolver as interações intracluster são os que seguem. Primeiramente, é proposta uma base para o Hamiltoniano do sistema, que no caso é a base dos spins de Ising. Em seguida, o traço da matriz Hamiltoniana é calculado e, então, os parâmetros de ordem são resolvidos auto-consistentemente.

## 3.2 Vidro de Spin de Ising em um Campo Transverso

O vidro de spin de Ising na presença de um campo magnético transverso trata-se de um sistema com dinâmica quântica. Isso porque, o campo magnético aplicado transversalmente ao acoplamento de Ising é um termo não-comutativo, e por isso, introduz flutuações de natureza quântica [21]. O campo transverso tem como característica a capacidade de inverter (“flipar”) os momentos magnéticos do sistema, fazendo com que os estados magnéticos puros se misturem, introduzindo, assim, as flutuações quânticas [39]. No modelo de VS quântico apresentado nesta seção, os operadores de spins são representados por combinações bilineares de operadores fermiônicos, conhecido como formalismo fermiônico para o modelo de VS [21, 24]. O tratamento do problema VS fermiônico segue a teoria de réplicas com aproximação de simetria de réplicas [15] e, além disso, a aproximação estática é empregada [21]. No cálculo da função de partição, são necessárias ferramentas especiais para tratar com a não-comutatividade dos operadores de spin. Um modo de fazer isso é usar o formalismo das integrais de caminho fermiônica e introduzir um ordenamento temporal por meio de um tempo imaginário  $\tau$ , com  $0 \leq \tau \leq \beta$  [27]. A discussão do formalismo das integrais de caminho fermiônicas é feita no apêndice A. A vantagem da formulação fermiônica é que ela tem uma aplicação natural nos problemas de matéria condensada, onde os operadores fermiônicos podem representar elétrons que participam de outros processos físicos, como supercondutividade e efeito Kondo [21].

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

$$\hat{H} = - \sum_{ij} J_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - 2\Gamma \sum_i \hat{S}_i^x , \quad (3.24)$$

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

$$P(J_{ij}) = \sqrt{\frac{N}{16\pi J^2}} \exp\left(-\frac{J_{ij}N}{16J^2}\right) . \quad (3.25)$$

Os operadores de spins da eq. (3.24) são representados pelos operadores fermiônicos em segunda quantização por

$$\hat{S}_i^z = \frac{1}{2} [\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}] \quad \text{e} \quad \hat{S}_i^x = \frac{1}{2} [c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}] , \quad (3.26)$$

onde  $c_{i\sigma}^\dagger$  e  $c_{i\sigma}$  são os operadores fermiônicos de criação e destruição, respectivamente, com a projeção de spin  $\sigma = \uparrow$  ou  $\downarrow$ , e  $\hat{n}_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  é o operador número, que faz a contagem da ocupação do sítio.

No modelo (3.24), os operadores  $\hat{S}^z$  e  $\hat{S}^x$  são escritos em termos dos operadores fermiônicos de acordo com a equação (3.26). Desse modo, o Hamiltoniano está definido no espaço de Fock com quatro estados por sítio: um estado sem férnion, dois estados com um férnion e um estado com dois férnions por sítio. Esses estados são representados esquematicamente por

$$|0\ 0\rangle; \quad |\uparrow\ 0\rangle; \quad |0\ \downarrow\rangle; \quad |\uparrow\downarrow\rangle, \quad (3.27)$$

respectivamente. Logo, o operador  $\hat{S}^z$  possui quatro autovalores, dois magnéticos, quando o operador atua nos estados com um férnion por sítio ( $|\uparrow\ 0\rangle$ ,  $|0\ \downarrow\rangle$ ), e dois não magnéticos, quando ele atua nos estados vazio ou duplamente ocupado ( $|0\ 0\rangle$ ,  $|\uparrow\downarrow\rangle$ ). Assim, o modelo fermiônico difere dos modelos representados no espaço de spins, no qual o operador  $\hat{S}^z$  possui apenas os dois estados magnéticos ( $|\uparrow\ 0\rangle$ ,  $|0\ \downarrow\rangle$ ). O método apresentado nessa seção, faz distinção entre dois modelos. Um que permite os quatro estados por sítio (modelo 4S), mas exige uma ocupação média de um férnion por sítio [21, 40], e outro que admite somente os estados magnéticos, ou seja, restringe o operador  $\hat{S}^z$  a um subespaço equivalente ao espaço dos spins (modelo 2S). O modelo que apresenta quatro estados por sítio é chamado de modelo irrestrito ou modelo 4S. Um modo de eliminar esses estados não-magnéticos foi proposto por Wiethege e Sherrington [39] e, recentemente, utilizado por Theumann et al. [21] e consiste em fixar o número de ocupação em um férnion por sítio. Esse modelo é chamado de modelo restrito ou modelo 2S [39]. Esta restrição é imposta por meio de uma função delta de Kronecker, de modo que somente os estados onde  $n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow} = 1$  são permitidos, isto é, somente os estados com um férnion por sítio são contados para a função de partição.

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

$$Z_{4S} = \text{Tr } e^{-\beta \hat{H}}, \quad (3.28)$$

enquanto que no modelo 2S, uma restrição deve ser imposta de tal modo que somente os

estados magnéticos ( $| \uparrow \downarrow \rangle$ ,  $| 0 \downarrow \rangle$ ) são permitidos, ou seja, somente os estados com um férnion por sítio. Desse modo, a função de partição do modelo restrito é

$$Z_{2S} = \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H}} \prod_j \delta(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow} - 1) \right], \quad (3.29)$$

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

$$\delta(x) = \begin{cases} 1, & \text{se } x = 0 \\ 0, & \text{se } x \neq 0 \end{cases}, \quad (3.30)$$

assim, a função delta de Kronecker na equação (3.29) indica que somente os sítios com um férnion são contados. Os dois modelos podem ser representados por uma única expressão usando a representação integral para a função delta de Kronecker, a saber

$$\delta(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow} - 1) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_j e^{ix_j(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow} - 1)}. \quad (3.31)$$

Assim, usando a representação integral da função delta de Kronecker e as integrais de caminho fermiônicas, onde os operadores fermiônicos de spins são representados por campos de Grassmann [27] (ver equação (A.25) no apêndice A para maiores informações), pode-se escrever a função de partição da forma

$$Z\{\mu\} = \int D[\phi^*, \phi] \int_0^{2\pi} \prod_j \frac{dx_j}{2\pi} e^{-\mu_j e^{A\{\mu\}}}, \quad (3.32)$$

com o funcional

$$\int D[\phi^*, \phi] = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_j \prod_{\sigma=\uparrow, \downarrow} d\phi_{j\sigma}^* d\phi_{j\sigma}, \quad (3.33)$$

e onde a ação  $A\{\mu\}$  é dada por

$$\begin{aligned} A\{\mu\} = & \int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_j \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \left[ \phi_{j\sigma}^*(\tau) \frac{d}{d\tau} \phi_{j\sigma}(\tau) + \mu_j \phi_{j\sigma}^*(\tau) \phi_{j\sigma}(\tau) \right. \right. \\ & \left. \left. - H(\phi_{j\sigma}^*(\tau), \phi_{j\sigma}(\tau)) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.34)$$

$\phi_{j\sigma}^*$  e  $\phi_{j\sigma}$  são campos de Grassmann e  $\mu_j$  é o potencial químico, que tem a função de controlar a ocupação média por sítio para o modelo 4S, no qual  $\mu_j = 0$ . Para o modelo 2S,  $\mu_j = ix_j$  tem a função de restringir a ocupação do sítio [41]. Com a intenção de

escrever a função de partição em termos de campos de Grassmann, deve-se calcular a transformada de Fourier sobre os campos de Grassmann [27], tal que

$$\phi_{j\sigma}(\tau) = \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n \tau / \beta} \phi_{j\sigma}(\omega) \quad \text{e} \quad \phi_{j\sigma}^*(\tau) = \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n \tau / \beta} \phi_{j\sigma}^*(\omega) , \quad (3.35)$$

e a transformada inversa da equação (3.35) é

$$\phi_{j\sigma}(\omega) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega \tau / \beta} \phi_{j\sigma}(\tau) , \quad (3.36)$$

com  $\omega_n = (2n + 1)\pi$ , para  $n = 0, \pm 1, \dots$ , sendo  $\omega_n$  as frequências de Matsubara que satisfazem as condições de contorno antissimétricas

$$\phi_{j\sigma}(\tau + \beta) = -\phi_{j\sigma}(\tau) . \quad (3.37)$$

A integral em  $\tau$  na equação (3.34) pode ser transformada em um somatório sobre as frequências. Os operadores  $\hat{S}^z$  também podem ser escritos em termos das transformadas de Fourier, tal que

$$S_j^z(\tau) = \frac{1}{2} \Psi_j^\dagger(\omega) \sigma^z \Psi_j(\omega') e^{i(\omega - \omega')\tau / \beta} \quad \text{e} \quad S_i^z(\tau) = \frac{1}{2} \Psi_j^\dagger(\omega'') \sigma^z \Psi_j(\omega''') e^{i(\omega'' - \omega''')\tau / \beta} , \quad (3.38)$$

onde

$$\sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.39)$$

é uma matriz de Pauli e

$$\Psi_j(\omega) = \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}(\omega) \\ \phi_{j\downarrow}(\omega) \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \Psi_j^\dagger(\omega) = \begin{bmatrix} \phi_{j\uparrow}^*(\omega) & \phi_{j\downarrow}^*(\omega) \end{bmatrix} . \quad (3.40)$$

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

$$\int d\tau \sum_{ij} S_i^z(\tau) S_j^z(\tau) = \sum_{\Omega} J_{ij} \beta S_i^z(\Omega) S_j^z(-\Omega) , \quad (3.41)$$

onde

$$S_i^z(\Omega) = \frac{1}{2} \sum_{\omega} \Psi_i^\dagger(\omega + \Omega) \sigma^z \Psi_i(\omega) , \quad (3.42)$$

com  $\Omega = 2m\pi$ , para  $m = 0, \pm 1, \dots$  sendo  $\Omega$  as frequências de Matsubara simétricas [27].

Para o cálculo da energia livre é utilizado o método das réplicas ( $f = -\frac{1}{N} \lim_{n \rightarrow 0} \ln \frac{Z^n - 1}{n}$ ) com aproximação de simetria de réplicas [15], como visto na seção (3.1). Usando procedimentos semelhantes aos adotados na seção (3.1) e admitindo a aproximação estática, ou seja, neste modelo a aproximação estática é assumida quando se considera  $\Omega = 0$ , pois  $\Omega$  está relacionado ao tempo de acordo com a equação (3.41). A função de partição replicada toma a forma

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_{J_{ij}} &= \int_0^{2\pi} \prod_{\alpha} \prod_j \frac{dx_j^{\alpha}}{2\pi} e^{-\mu_j^{\alpha}} \int D[\phi^*, \phi] \\ &\times \exp \left\{ \sum_{\alpha} \sum_{\omega} \sum_j \Psi_j^{\dagger \alpha}(\omega) [(i\omega + \beta\mu_j^{\alpha}) I + \beta\Gamma\sigma^x] \Psi_j^{\alpha}(\omega) \right. \\ &\left. + \left( \sum_{\alpha} \sum_{ij} J_{ij} \beta S_{i\alpha}^z S_{j\alpha}^z - \frac{J_{ij}^2 N}{16N^2} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (3.43)$$

onde  $\alpha$  denota o índice de réplica, com  $\alpha = 1, \dots, n$ . Na equação (3.43), usou-se a representação (3.40), a matriz de Pauli  $\sigma^z$ , definida na equação (3.39), e as matrizes

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.44)$$

onde  $\sigma^x$  é uma matriz de Pauli e  $I$  a matriz identidade. Escrevendo a equação (3.43) na forma de quadrado perfeito para calcular a média sobre as variáveis aleatórias  $J_{ij}$ , tem-se

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_{J_{ij}} &= \int_0^{2\pi} \prod_{\alpha} \prod_j \frac{dx_j^{\alpha}}{2\pi} e^{-\mu_j^{\alpha}} \int D[\phi^*, \phi] \\ &\times \exp \left\{ \sum_{\alpha} \sum_{\omega} \sum_j \Psi_j^{\dagger \alpha}(\omega) [(i\omega + \beta\mu_j^{\alpha}) I + \beta\Gamma\sigma^x] \Psi_j^{\alpha}(\omega) \right. \\ &\left. + \frac{8\beta^2 J^2}{N} \sum_{ij} \left( \sum_{\alpha} S_{i\alpha}^z S_{j\alpha}^z \right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Reescrevendo o último termo da equação (3.45) como

$$\frac{1}{N} \sum_{ij} \left( \sum_{\alpha} S_{i\alpha}^z S_{j\alpha}^z \right)^2 = \frac{1}{N} \sum_{\alpha, \gamma} \left[ \left( \sum_{j=1}^N S_{j\alpha}^z S_{j\gamma}^z \right)^2 - \sum_{j=1}^N (S_{j\alpha}^z)^2 (S_{j\gamma}^z)^2 \right], \quad (3.46)$$

e desprezando o último termo da equação (3.46), pois este é muito pequeno ( $\sim N$ ) frente ao termo  $\frac{1}{N} \sum_{\alpha, \gamma} \left( \sum_{j=1}^N S_{j\alpha}^z S_{j\gamma}^z \right)^2$  ( $\sim N^2$ ) no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ), a função

de partição assume a forma

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_{J_{ij}} &= \int_0^{2\pi} \prod_{\alpha} \prod_j \frac{dx_j^{\alpha}}{2\pi} e^{-\mu_j^{\alpha}} \int D[\phi^*, \phi] \int \prod_{\alpha\gamma} dq_{\alpha\gamma} \\ &\times \exp \left\{ \sum_{\alpha} \sum_{\omega} \sum_j \Psi_j^{\dagger\alpha}(\omega) [(i\omega + \beta\mu_j^{\alpha}) I + \beta\Gamma\sigma^x] \Psi_j^{\alpha}(\omega) \right. \\ &\left. - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\gamma} q_{\alpha\gamma}^2 - \sum_{\alpha\gamma} \sum_j \frac{4\beta J}{N} \left( \sum_j S_{j\alpha}^z S_{j\gamma}^z \right) q_{\alpha\gamma} \right\}, \end{aligned} \quad (3.47)$$

onde o termo  $\frac{1}{N} \sum_{\alpha,\gamma} \left( \sum_{j=1}^N S_{j\alpha}^z S_{j\gamma}^z \right)^2$  foi linearizado usando a equação (3.12) (ver seção 3.1) e  $q_{\alpha\gamma}$  são campos auxiliares que surgem através da linearização e estão relacionados aos parâmetros de ordem VS. Assim, tem-se a seguinte expressão para a função de partição

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_{J_{ij}} &= \int_0^{2\pi} \prod_{\alpha} \prod_j \frac{dx_j^{\alpha}}{2\pi} e^{-\mu_j^{\alpha}} \int \prod_{\alpha\gamma} dq_{\alpha\gamma} e^{-\frac{N\beta^2 J^2 \sum_{\alpha\gamma} q_{\alpha\gamma}^2}{2}} \int D[\phi^*, \phi] \\ &\exp \left\{ \sum_{\alpha} \sum_{\omega} \sum_j \Psi_j^{\dagger\alpha}(\omega) [(i\omega + \beta\mu_j^{\alpha}) I + \beta\Gamma\sigma^x] \Psi_j^{\alpha}(\omega) \right. \\ &\left. + 4\beta^2 J^2 \sum_{\alpha\gamma} \sum_j q_{\alpha\gamma} S_{j\alpha}^z S_{j\gamma}^z \right\}. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Como na seção (3.1), admite-se que o problema tem simetria de réplicas, ou seja, pode-se representar os elementos da matriz das réplicas que estão fora da diagonal principal por apenas um único parâmetro de ordem, assim,

$$q_{\alpha\gamma} = \begin{cases} q, & \text{se } \alpha \neq \gamma \\ \bar{\chi} = q + \bar{\chi}, & \text{se } \alpha = \gamma \end{cases}, \quad (3.49)$$

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

$$\bar{\chi} = \beta\chi. \quad (3.50)$$

Sendo assim, a função de partição sem a dependência dos índices de réplicas para os elementos da matriz das réplicas é

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_{J_{ij}} &= \int \prod_{\alpha\gamma} dq_{\alpha\gamma} e^{-n\left(\frac{N\beta^2 J^2 q^2}{2}\right)} \prod_{\alpha} dq_{\alpha} e^{-n(n-1)\frac{N\beta^2 J^2 q_{\alpha}^2}{2}} \int_0^{2\pi} \prod_j \frac{dx_j}{2\pi} e^{-\mu_j} \\ &\times \int D[\phi^*, \phi] \exp \left\{ \sum_{\omega} \sum_j \Psi_j^{\dagger}(\omega) [(i\omega + \beta\mu_j) I + \beta\Gamma\sigma^x] \Psi_j(\omega) \right. \\ &\left. + 4\beta^2 J^2 \sum_j q_{\alpha} \left( \sum_{\alpha} S_{j\alpha}^z S_{j\alpha}^z \right) + 4\beta^2 J^2 \sum_{\alpha\gamma} \sum_j q_{\alpha\gamma} S_{j\alpha}^z S_{j\gamma}^z \right\}. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Então, reescrevendo o último termo da equação (3.51), que contém interações entre réplicas, como

$$\sum_{\alpha,\gamma} S_{j\alpha}^z S_{j\gamma}^z = \left( \sum_{\alpha} S_{j\alpha}^z \right)^2 - \sum_{\alpha} S_{j\alpha}^2, \quad (3.52)$$

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

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_{J_{ij}} = & \int \prod_{\alpha\gamma} dq_{\alpha\gamma} e^{-n\left(\frac{N\beta^2 J^2 q^2}{2}\right)} \prod_{\alpha} dq_{\alpha} e^{-n(n-1)\frac{N\beta^2 J^2 (q+\bar{\chi})^2}{2}} \\ & \times \int_0^{2\pi} \frac{dx}{2\pi} e^{-\mu} \int D[\phi^*, \phi] \exp \left\{ \sum_{\omega} \Psi^{\dagger}(\omega) [(i\omega + \beta\mu) I \right. \\ & \left. + \beta\Gamma\sigma^x] \Psi(\omega) + 4\beta^2 J^2 q \left( \sum_{\alpha} S_{\alpha}^z \right)^2 + 4\beta^2 J^2 \bar{\chi} \left( \sum_{\alpha} S_{\alpha}^z \right)^2 \right\}. \quad (3.53) \end{aligned}$$

Linearizando os termos quadráticos na equação (3.53), com o auxílio da equação (3.12), dois novos campos auxiliares são introduzidos  $z$  e  $\xi_{\alpha}$ , assim, a função de partição replicada fica

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_{J_{ij}} = & \int \prod_{\alpha\gamma} dq_{\alpha\gamma} e^{-n\left(\frac{N\beta^2 J^2 q^2}{2}\right)} \prod_{\alpha} dq_{\alpha} e^{-n(n-1)\frac{N\beta^2 J^2 (q+\bar{\chi})^2}{2}} \\ & \left( \int Dz \int D\xi \int_0^{2\pi} \frac{dx}{2\pi} e^{-\mu} \int D[\phi^*, \phi] \exp \left\{ \sum_{\omega} \Psi^{\dagger}(\omega) \right. \right. \\ & [(i\omega + \beta\mu) I + \beta\Gamma\sigma^x] \Psi(\omega) + 2\beta J \sqrt{2q} \sum_{\alpha} S_{\alpha}^z z \\ & \left. \left. + 2\beta J \sqrt{2\bar{\chi}} \sum_{\alpha} S_{\alpha}^z \xi_{\alpha} \right\} \right)^N, \quad (3.54) \end{aligned}$$

onde  $\int Dy = \int \frac{1}{\sqrt{2\pi}} dy e^{-y^2/2}$ , com  $y$  sendo  $z$  ou  $\xi_{\alpha}$ .

Somando sobre os índices de réplicas, obtém-se

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_{J_{ij}} = & \int \prod_{\alpha\gamma} dq_{\alpha\gamma} e^{-n\frac{N\beta^2 J^2}{2}[q^2 + (n-1)(q+\bar{\chi})^2]} \left( \int Dz \left[ \int D\xi \right. \right. \\ & \times \int_0^{2\pi} \frac{dx}{2\pi} e^{-\mu} \int D[\phi^*, \phi] \exp \left\{ \sum_{\omega} \Psi^{\dagger}(\omega) [(i\omega + \beta\mu) I \right. \\ & \left. + \beta\Gamma\sigma^x] \Psi(\omega) + 2\beta J \sqrt{2q} S^z z + 2\beta J \sqrt{2\bar{\chi}} S^z \xi_{\alpha} \right\} \left. \right]^n \left. \right)^N. \quad (3.55) \end{aligned}$$

Escrevendo os operadores  $\hat{S}^z$  e  $\hat{S}^x$  em função dos campos de Grassmann, de acordo com as equações (3.26) e (3.40), a função de partição pode ser escrita como segue

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} = \int \prod_{\alpha\gamma} dq_{\alpha\gamma} e^{-n\frac{N\beta^2 J^2}{2}[q^2 + (n-1)(q+\bar{\chi})^2]} \left( \int Dz \left[ \int D\xi \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx e^{-\mu} \int D[\phi^*, \phi] \exp \left\{ \sum_{\omega} \Psi^\dagger(\omega) g^{-1}(\omega) \Psi(\omega) \right\} \right]^n \right)^N, \quad (3.56)$$

onde

$$g^{-1}(\omega) = \begin{pmatrix} i\omega + \beta\mu + \beta h & \beta\Gamma \\ \beta\Gamma & i\omega + \beta\mu + \beta h \end{pmatrix}, \quad (3.57)$$

e  $h = \beta J \sqrt{2q}z + \beta J \sqrt{2\bar{\chi}}\xi$ . A integral sobre os campos de Grassmann é realizada calculando o determinante da matriz  $g^{-1}$

$$I = \prod_{\omega} \det g^{-1}(\omega). \quad (3.58)$$

Logo, calculando o determinante da matriz  $g^{-1}(\omega)$ , somando sobre as frequências de Matsubara e incluindo a restrição, encontra-se

$$I' = \int_0^{2\pi} \frac{dx}{2\pi} e^{-\mu} \left\{ 2 \cosh(\beta\mu) + 2 \cosh(\sqrt{\beta^2 h^2 + \beta^2 \Gamma^2}) \right\}. \quad (3.59)$$

Ainda é preciso resolver a integral da restrição (integral sobre  $x$ ). Para o modelo 4S,  $\mu = 0$ , assim, a equação (3.59) resulta

$$I' = 2 \left[ 1 + \cosh(\sqrt{\beta^2 h^2 + \beta^2 \Gamma^2}) \right]. \quad (3.60)$$

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

$$I' = \left[ 2 \cosh(\sqrt{\beta^2 h^2 + \beta^2 \Gamma^2}) \right]. \quad (3.61)$$

Os resultados para os dois modelos podem ser expressos por

$$I' = 2 \left[ p + \cosh(\sqrt{\beta^2 h^2 + \beta^2 \Gamma^2}) \right], \quad (3.62)$$

onde  $p$  pode ser 0, para o modelo 2S, ou 1, para o modelo 4S. Assim, substituindo (3.62) em (3.56) e tomando o limite quando as réplicas tendem a zero ( $n \rightarrow 0$ ), a energia livre obtida é

$$\beta f = \frac{\beta^2 J^2}{2} [\bar{\chi}^2 + 2q\bar{\chi}] - \int Dz \ln [2K_p], \quad (3.63)$$

onde

$$K_p = p + \int d\xi \cosh(\Delta) , \quad (3.64)$$

$$\text{e } \Delta = \beta^2 h^2 + \beta^2 \Gamma^2 .$$

No limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ), as integrais sobre os parâmetros  $\chi$  e  $q$  na equação (3.56) são resolvidas pelo método “steepest descents“ [17], que resulta nas equações ponto de sela

$$\frac{\partial \beta f}{\partial q} = 0 \text{ e } \frac{\partial \beta \Omega}{\partial \bar{\chi}} = 0 , \quad (3.65)$$

e então encontram-se os parâmetros de ordem

$$q = \int Dz \frac{\left( \int D\xi_\alpha \frac{h}{\sqrt{\Delta}} \sinh(\sqrt{\Delta}) \right)^2}{\left( p + \int D\xi_\alpha \cosh(\sqrt{\Delta}) \right)^2} , \quad (3.66)$$

que é o parâmetro de ordem VS, e

$$\bar{\chi} = \int Dz \left\{ \frac{\int D\xi_\alpha \frac{h^2}{\Delta} \cosh(\sqrt{\Delta}) + \frac{\beta^2 \Gamma^2}{\Delta^{3/2}} \sinh(\sqrt{\Delta})}{\left( p + \int D\xi_\alpha \cosh(\sqrt{\Delta}) \right)} \right\} - q , \quad (3.67)$$

que está relacionado à susceptibilidade estática pela equação (3.50).

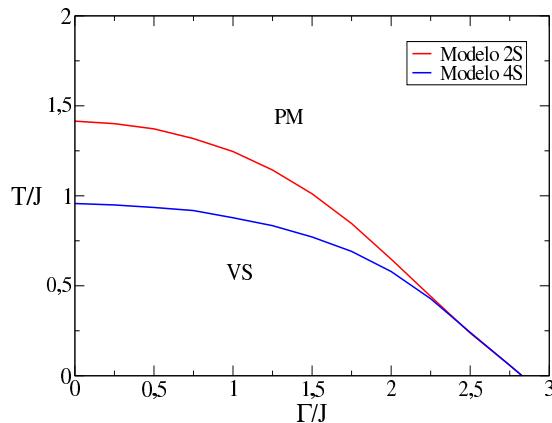


Figura 3.1: Diagramas de fase temperatura versus campo transverso para os modelos 2S e 4S (adaptado de [21]).

Diagramas de fase de temperatura por campo transverso são obtidos numericamente através deste modelo e estão apresentados na figura (3.1). Estes diagramas mostram

as linhas críticas de transição de segunda ordem entre a fase paramagnética, a altas temperaturas, e a fase vidro de spin, a temperaturas abaixo de  $T_f$  [21]. Neste modelo, quando  $\Gamma$  aumenta, a linha crítica decresce e é possível chegar a um ponto crítico quântico [12].

## Capítulo 4

# Modelo de Vidro de Spin Fermiônico com Cluster em um Campo Transverso

Com base nos modelos discutidos no capítulo anterior, modelo de cluster de vidro de spin clássico (seção 3.1) [19] e modelo fermiônico de VS de Ising em um campo transverso (seção 3.2) [21], propõe-se, neste trabalho, um modelo teórico de campo médio de vidro de spin fermiônico com cluster na presença de um campo transverso <sup>1</sup>. Nesse modelo, as entidades básicas são clusters correlacionados (aglomerados de spins), ao invés de spins individuais, como é no caso do modelo de VS fermiônico em um campo transverso sem cluster discutido na seção (3.2) [21]. O modelo proposto considera uma interação aleatória entre momentos magnéticos de clusters distintos, que segue uma distribuição de probabilidades Gaussiana. Esse modelo considera também interações intracluster (interações dentro do mesmo cluster), que no presente trabalho são interações intracluster ferromagnéticas. Além disso, um campo magnético não-comutativo aplicado transversalmente ao acoplamento de Ising é adicionado. Devido a esse campo não-comutativo, o problema de cluster de VS fermiônico em um campo transverso trata-se de um problema de natureza quântica. O campo transverso tem como função inverter os momentos magnéticos do sistema, fazendo com que os estados magnéticos puros se misturem, desse modo, são introduzidas as flutuações quânticas [39].

Nesse modelo, os operadores de spin são escritos em termos de combinações bilineares de operadores fermiônicos, conhecido como formalismo fermiônico [27]. Para o tratamento desse problema de cluster de vidro de spin fermiônico é empregado o método das réplicas

---

<sup>1</sup>Novamente, a expressão “vidro de pin com cluster” é substituída por “cluster de vidro de spin”.

[15]. Em particular, admite-se duas aproximações para a resolução do problema: a aproximação de simetria de réplicas e aproximação estática [21]. Assim como no modelo de VS fermiônico sem cluster (seção 3.2), devido a não-comutatividade dos operadores de spin, ferramentas da mecânica quântica são necessárias para tratar o problema de cluster de VS fermiônico. Usando o formalismo das integrais de caminho fermiônicas e introduzindo um ordenamento temporal por meio de um tempo imaginário  $\tau$ , com  $0 \leq \tau \leq \beta$  [27], é possível tratar esse problema da não-comutatividade dos operadores de spin. A discussão do formalismo das integrais fermiônicas é realizada no apêndice A. Nesse formalismo, os operadores fermiônicos são escritos em termos de campos de Grassmann [27].

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

$$\hat{H} = - \sum_{\nu\lambda} J_{\nu\lambda} \hat{S}_{\nu}^z \hat{S}_{\lambda}^z - \sum_{\nu} \sum_{ij} J_{ij}^o \hat{S}_{i\nu}^z \hat{S}_{j\nu}^z - 2\Gamma \sum_{\nu} \sum_i \hat{S}_{i\nu}^x , \quad (4.1)$$

onde a soma  $\sum_{\nu\lambda}$  é feita sobre todos os pares distintos de clusters, a soma  $\sum_{\nu}$  é feita sobre todos os clusters,  $J_{\nu\lambda}$  são variáveis aleatórias de interação de troca intercluster, que seguem a distribuição de probabilidade Gaussiana

$$P(J_{\nu\lambda}) = \sqrt{\frac{N_d}{32\pi J^2}} \exp\left[-\frac{J_{\nu\lambda}^2 N_d}{32J^2}\right] , \quad (4.2)$$

e  $N_d$  é o número de clusters do sistema. A soma  $\sum_{ij}$ , no modelo (4.1), é feita sobre todos os pares distintos de sítios dentro do mesmo cluster  $\nu$ ,  $J_{ij}^o$  são variáveis de interação de troca intracluster, e  $\Gamma$  é o campo magnético aplicado transversalmente ao acoplamento de Ising.

Os operadores de spin do modelo (4.1) são representados, em segunda quantização, por operadores fermiônicos da forma

$$\hat{S}_{i\nu}^z = \frac{1}{2}(\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}) \quad \text{e} \quad \hat{S}_{i\nu}^x = \frac{1}{2} \left( c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\uparrow} \right) , \quad (4.3)$$

onde  $\hat{n}_{i\sigma} = c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$  é o operador número, que faz a contagem da ocupação do sítio  $i$ , com a projeção de spin  $\sigma = \uparrow$  ou  $\downarrow$ , e  $c_{i\sigma}^{\dagger}$  e  $c_{i\sigma}$  são os operadores quânticos de criação e destruição, respectivamente. O operador  $\hat{S}_{\nu}^z$  do modelo (4.1) é dado por:  $\hat{S}_{\nu}^z = \sum_{i=1}^{n_s} \hat{S}_{i\nu}^z$ , onde  $n_s$  é o número de sítios dentro do cluster  $\nu$ . Na notação adotada aqui, índices gregos referem-se a clusters e índices romanos a spins dentro do cluster.

No modelo (4.1), os operadores  $\hat{S}_{i\nu}^z$  e  $\hat{S}_{i\nu}^x$  são escritos em termos dos operadores fermiônicos de acordo com a equação (4.3). Assim sendo, o Hamiltoniano está definido no espaço de Fock com quatro estados por sítio: um estado sem férmion (estado de vácuo), dois estados ocupados com um férmion e um estado com dois férmions por sítio. Portanto, o operador  $\hat{S}_{i\nu}^z$  tem quatro autovalores por sítio, dois magnéticos, quando o operador atua nos estados com um férmion por sítio ( $|\uparrow 0\rangle$ ,  $|0\downarrow\rangle$ ) e dois não magnéticos, quando ele atua nos estados duplamente ocupado ou vazio ( $|00\rangle$ ,  $|\uparrow\downarrow\rangle$ ). Assim, o modelo fermiônico difere dos modelos representados no espaço de spins, no qual o operador  $\hat{S}^z$  possui apenas os dois estados magnéticos por sítio ( $|\uparrow 0\rangle$ ,  $|0\downarrow\rangle$ ). Do mesmo modo como na seção (3.2), o método apresentado nesta seção faz distinção entre dois modelos. Um que permite os quatro estados por sítio (modelo 4S), mas exige uma ocupação média de  $n_s$  férmions por cluster [21, 40], e outro, que admite somente os estados magnéticos, ou seja, restringe o operador  $\hat{S}_{i\nu}^z$  a um subespaço equivalente ao espaço dos spins (modelo 2S) [21, 40].

Como se trata de um problema com clusters, o sistema não tem apenas um sítio e sim vários. Assim, deve-se apresentar como são formados os estados possíveis para o sistema. Por exemplo, considera-se um cluster formado por dois sítios. Os estados possíveis para esse sistema de dois sítios estão representados abaixo, onde se leva em consideração, para a formação dos estados possíveis, a ocupação de cada sítio. Na representação abaixo,  $|1\ 2, 1\ 2\rangle$  indica as ocupações dos sítios 1 e 2, onde à esquerda são representados os estados com spin para cima e à direita os estados com spin para baixo. Assim, as configurações possíveis para um cluster de dois sítios são

$$\begin{aligned} & |\uparrow\uparrow, 0\ 0\rangle, \quad |\uparrow\ 0, 0\ \downarrow\rangle, \quad |0\ \uparrow, \downarrow\ 0\rangle, \quad |0\ 0, \downarrow\downarrow\rangle, \quad |0\ 0, 0\ 0\rangle, \quad |0\ \uparrow, 0\ \downarrow\rangle, \\ & |\uparrow\ 0, \downarrow\ 0\rangle, \quad |\uparrow\uparrow, \downarrow\ 0\rangle, \quad |\uparrow\uparrow, 0\ \downarrow\rangle, \quad |\uparrow\uparrow, \downarrow\downarrow\rangle, \quad |0\ \uparrow, \downarrow\downarrow\rangle, \quad |\uparrow\ 0, \downarrow\downarrow\rangle \\ & |\uparrow\ 0, 0\ 0\rangle, \quad |0\ \uparrow, 0\ 0\rangle, \quad |0\ 0, \downarrow\ 0\rangle, \quad |0\ 0, 0\ \downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Dentre esses estados, somente os quatro primeiros representam estados no espaço dos spins, isto é, somente estes são estados magnéticos (modelo 2S).

Para encontrar a energia livre e as demais quantidades termodinâmicas, as funções de partição dos modelos 2S e 4S são analisadas. A função de partição para o modelo 4S é

$$Z_{4S} = \text{Tr } e^{-\beta\hat{H}}, \quad (4.5)$$

enquanto que para o modelo restrito (modelo 2S), uma restrição deve ser imposta de tal

forma que somente os sítios com estados magnéticos são permitidos. Essa restrição é imposta pela função delta de Kronecker de tal modo que somente são contados os estados com um férmion por sítio, pois, a função delta de Kronecker é definida como

$$\delta(x) = \begin{cases} 1, & \text{se } x = 0 \\ 0, & \text{se } x \neq 0 \end{cases}, \quad (4.6)$$

assim, a função delta de Kronecker na equação (4.6) indica que somente os sítios com um férmion são contados, garantindo a restrição necessária. Assim, a função de partição para o modelo 2S pode ser escrita

$$Z_{2S} = \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H}} \prod_{\nu=1}^{N_{cl}} \prod_{j=1}^{n_s} \delta(\hat{n}_{\nu j \uparrow} + \hat{n}_{\nu j \downarrow} - 1) \right], \quad (4.7)$$

onde  $\text{Tr}$  é o traço e  $\beta = 1/T$  o inverso da temperatura. Os dois modelos podem ser representados por uma mesma expressão usando a representação integral para a função delta de Kronecker da mesma forma feita na seção 3.2 (equação 3.31). Nesse modelo, os operadores fermiônicos são escritos em termos de campos de Grassmann [27]. Sendo assim, a função de partição que representa os dois modelos, usando o formalismo das integrais de caminho fermiônico (ver apêndice A) [27], é dada por

$$Z\{\mu\} = \int D[\phi_j^*, \phi_j] \int_0^{2\pi} \prod_{\nu=1}^{N_{cl}} \prod_{j=1}^{n_s} \frac{dx_{\nu j}}{2\pi} e^{-\mu_{\nu j}} e^{A\{\mu\}}, \quad (4.8)$$

com o funcional

$$\int D[\phi^*, \phi] = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_j \prod_{\sigma=\uparrow, \downarrow} d\phi_{j\sigma, k}^* d\phi_{j\sigma, k}, \quad (4.9)$$

e onde a ação  $A\{\mu\}$  é

$$A\{\mu\} = \int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_{\nu}^{N_{cl}} \sum_{i=1}^{n_s} \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \phi_{j\nu\sigma}^*(\tau) \left[ \frac{\partial}{\partial \tau} + \mu_\nu \right] \phi_{j\nu\sigma}(\tau) - H(\phi^*(\tau), \phi(\tau)) \right\}, \quad (4.10)$$

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

$$\begin{aligned} H(\phi^*(\tau), \phi(\tau)) = & - \sum_{\nu\lambda} J_{\nu\lambda} S_\nu^z(\tau) S_\lambda^z(\tau) - \sum_{\nu} \left( \sum_{ij} J_{ij}^o S_{i\nu}^z(\tau) S_{j\nu}^z(\tau) \right. \\ & \left. + 2\Gamma \sum_i S_{i\nu}^x(\tau) \right), \end{aligned} \quad (4.11)$$

$\phi_{i\nu}^*(\tau)$  e  $\phi_{i\nu}(\tau)$  são campos de Grassmann associados aos operadores de criação e destruição [27],  $\mu_\nu$  é o potencial químico, que tem a função de controlar a ocupação média por cluster para o modelo 4S, no qual  $\mu_\nu = 0$ , que corresponde a ocupação média de  $n_s$  férmons por cluster. Para o modelo 2S,  $\mu_\nu = ix_\nu$ , onde os estados não magnéticos por sítio não são permitidos [41].

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

$$S_\nu^z(\tau) = \frac{1}{2} \sum_\nu \sum_{j=1}^{n_s} [\phi_{j\nu\uparrow}(\tau)^* \phi_{j\nu\uparrow}(\tau) - \phi_{j\nu\downarrow}(\tau)^* \phi_{j\nu\downarrow}(\tau)] , \quad (4.12)$$

e

$$S_\nu^x(\tau) = \frac{1}{2} \sum_\nu \sum_{j=1}^{n_s} [\phi_{j\nu\uparrow}(\tau)^* \phi_{j\nu\downarrow}(\tau) + \phi_{j\nu\downarrow}(\tau)^* \phi_{j\nu\uparrow}(\tau)] . \quad (4.13)$$

Para analisar as quantidades termodinâmicas do sistema deve-se realizar dois tipos de médias: a média termodinâmica usual e a média sobre as variáveis aleatórias  $J_{\nu\lambda}$ , chamada média configuracional. Essa média é dada pela média do logaritmo da função de partição, assim

$$F = -\frac{1}{\beta} \langle \ln Z(J_{\nu\lambda}) \rangle_{J_{\nu\lambda}} . \quad (4.14)$$

Para o cálculo da energia livre, é usado o método das réplicas com aproximação de simetria de réplicas [15]. O método das réplicas consiste basicamente na identidade

$$\ln Z = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n} , \quad (4.15)$$

onde  $Z^n$  é a função de partição replicada  $n$  vezes, com  $n$  inteiro e positivo, tal que,  $Z^n = \prod_{\alpha=1}^n Z^\alpha$ . Isto é, o sistema é replicado  $n$  vezes, com  $n$  réplicas idênticas e não-interagentes do sistema original. Desse modo, a média configuracional da função de partição replicada, com a notação  $Z_n = \text{Tr} \int dJ_{ij} P(J_{ij}) e^{-\beta H^\alpha}$ , usando o formalismo das integrais de caminho fermiônicas, toma a forma

$$\begin{aligned} Z_n &= \int \prod_{\nu\lambda} \sqrt{\frac{N_{cl}}{32\pi J^2}} dJ_{\nu\lambda} P(J_{\nu\lambda}) \int_0^{2\pi} \prod_\nu \prod_j \frac{1}{2\pi} dx_{\nu j} e^{-i\mu_{\nu j}} \int D[\phi_\nu^*, \phi_\nu] \\ &\quad \times \exp \left\{ \sum_\alpha B_\alpha - \sum_{\nu\lambda} \frac{J_{\nu\lambda}^2 N_d}{32 J^2} + \sum_\alpha \sum_{\nu\lambda} J_{\nu\lambda} \int_0^\beta d\tau S_\nu^{z\alpha}(\tau) S_\lambda^{z\alpha}(\tau) \right\} , \quad (4.16) \end{aligned}$$

com

$$B_\alpha = - \int_0^\beta d\tau \left[ \sum_\nu \phi_\nu^*(\tau) \left( \frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) \phi_\nu(\tau) + \sum_\nu \sum_{ij} J_{ij}^o S_{i\nu}^{z\alpha}(\tau) S_{j\nu}^{z\alpha}(\tau) + 2\Gamma \sum_\nu \sum_i S_{i\nu}^{x\alpha}(\tau) \right], \quad (4.17)$$

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

Reescrevendo a equação (4.16) na forma de quadrado perfeito e calculando a média sobre as variáveis  $J_{\nu\lambda}$ , encontra-se

$$Z_n = \int_0^{2\pi} \prod_\nu \prod_j \frac{1}{2\pi} dx_{\nu j} e^{-i\mu_{\nu j}} \int D[\phi_\nu^*, \phi_\nu] \exp \left\{ \sum_\alpha B_\alpha + \frac{8J^2}{N_{cl}} \sum_{\nu\lambda} \left( \sum_\alpha \int_0^\beta d\tau S_\nu^{z\alpha}(\tau) S_\lambda^{z\alpha}(\tau) \right)^2 \right\}. \quad (4.18)$$

Na equação (4.18), há interações entre os clusters  $\nu$  e  $\lambda$ . Pode-se obter uma expressão que contenha apenas termos de um único cluster reescrevendo o último termo da equação (4.18) da forma

$$\begin{aligned} \sum_{\nu\lambda} \left( \sum_\alpha \int_0^\beta d\tau S_\nu^{z\alpha}(\tau) S_\lambda^{z\alpha}(\tau) \right)^2 &= \sum_{\nu\lambda} \left[ \left( \sum_\alpha \int_0^\beta d\tau S_\nu^{z\alpha}(\tau) S_\lambda^{z\alpha}(\tau) \right) \right. \\ &\quad \times \left. \left( \sum_\beta \int_0^\beta d\tau' S_\nu^{z\beta}(\tau') S_\lambda^{z\beta}(\tau') \right) \right] \\ &= \sum_\nu \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \left( \sum_{\alpha,\beta} S_\nu^{z\alpha}(\tau) S_\nu^{z\beta}(\tau') \right)^2. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Introduzindo a equação (4.19) em (4.18) para então linearizar o termo quadrático  $\sum_\nu \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \left( \sum_{\alpha,\beta} S_\nu^{z\alpha}(\tau) S_\nu^{z\beta}(\tau') \right)^2$ , usando a transformação (3.12), obtém-se

$$\begin{aligned} Z_n &= \int \prod_{\alpha,\beta} DQ_{\alpha,\beta}(\tau, \tau') e^{-N_{cl} \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_{\alpha,\beta} \frac{Q_{\alpha\beta}^2}{2}(\tau, \tau')} \\ &\quad \times \int_0^{2\pi} \prod_\nu \prod_j \frac{1}{2\pi} dx_{\nu j} e^{-i\mu_{\nu j}} \int D[\phi_\nu^*, \phi_\nu] \exp \left[ \sum_\alpha B_\alpha + 4J^2 \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\nu \sum_{\alpha\beta} S_\nu^{z\alpha}(\tau) S_\nu^{z\beta}(\tau') Q_{\alpha\beta}(\tau, \tau') \right], \end{aligned} \quad (4.20)$$

onde  $Q_{\alpha\beta}(\tau, \tau')$  são campos auxiliares que surgem através da linearização e estão relacionados aos elementos da matriz das réplicas. Tem-se assim, um problema efetivo de  $n$

réplicas e de um único cluster, porém com interações entre réplicas. Dentro dessa teoria das réplicas, os campos  $Q_{\alpha,\beta}(\tau, \tau')$  possuem uma interpretação relacionada ao parâmetro de ordem VS. Para mostrar isso, a equação (4.20) é reescrita da seguinte forma

$$\begin{aligned} Z_n = & \int \prod_{\alpha,\beta} DQ_{\alpha,\beta}(\tau, \tau') \exp \left\{ -N_{cl} \left[ \frac{J^2}{2} \sum_{\alpha,\beta} \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' Q_{\alpha\beta}^2(\tau, \tau') \right. \right. \\ & - \frac{1}{N_{cl}} \ln \left[ \int_0^{2\pi} \prod_{\nu} \prod_j \frac{1}{2\pi} dx_{\nu j} e^{-i\mu_{\nu j}} \int D[\phi_{\nu}^*, \phi_{\nu}] \times \exp \left[ \sum_{\alpha} B_{\alpha} \right. \right. \\ & \left. \left. + 4J^2 \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_{\nu} \sum_{\alpha\beta} S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) S_{\nu}^{z\beta}(\tau') Q_{\alpha\beta}(\tau, \tau') \right] \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

No limite termodinâmico ( $N_{cl} \rightarrow \infty$ ), a integral sobre o funcional  $Q_{\alpha,\beta}(\tau, \tau')$  pode ser calculada pelo método "steepest descents" [17]. Então, a diferenciação funcional para  $Q_{\alpha,\beta}(\tau, \tau')$  resulta em

$$Q_{\alpha,\beta}(\tau, \tau') = \langle T S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) S_{\nu}^{z\beta}(\tau') \rangle, \quad (4.22)$$

para  $\alpha \neq \beta$ , e

$$Q_{\alpha,\alpha}(\tau, \tau') = \langle T S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) S_{\nu}^{z\alpha}(\tau') \rangle, \quad (4.23)$$

para  $\alpha = \beta$ , onde  $T$  é o ordenamento temporal e  $\langle \dots \rangle$  significa a média termodinâmica e a média configuracional. De acordo com o trabalho de Edwards e Anderson [16], a correlação  $Q_{\alpha,\beta}(\tau, \tau')$  é o parâmetro de ordem VS. Para a correlação  $Q_{\alpha,\alpha}(\tau, \tau')$ , tem-se uma autocorrelação do momento magnético total do cluster.

Neste problema, assume-se duas aproximações. A primeira considera que não há dependência temporal nos elementos de matriz  $Q_{\alpha\beta}$ , ou seja, a aproximação estática é assumida:  $Q_{\alpha\beta}(\tau, \tau') = Q_{\alpha\beta}$ . A segunda considera que o problema tem simetria de réplicas, ou seja, a fase cluster de vidro de spin pode ser caracterizada por apenas um parâmetro de ordem fora da diagonal principal, tal que

$$Q_{\alpha\beta} = \begin{cases} r, & \text{se } \alpha = \beta \\ q, & \text{se } \alpha \neq \beta \end{cases}. \quad (4.24)$$

Assim sendo, a função de partição, após somar sobre todos os índices de réplicas, fica

$$\begin{aligned}
Z_n = & \exp \left\{ -n(n-1) \frac{N_d}{2} \beta^2 J^2 q^2 - n \left( \frac{N_d}{2} \beta^2 J^2 r^2 \right) + \ln \int_0^{2\pi} \prod_{\nu} \prod_j \frac{1}{2\pi} dx_{\nu j} e^{-i\mu_{\nu j}} \right. \\
& \times \int D[\phi_{\nu}^*, \phi_{\nu}] \exp \left[ \sum_{\alpha} B_{\alpha} + 4J^2 r \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \sum_{\nu} \sum_{\alpha} S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) S_{\nu}^{z\alpha}(\tau') \right. \\
& \left. \left. + 4J^2 q \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \sum_{\nu} \sum_{\alpha \neq \beta} S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) S_{\nu}^{z\beta}(\tau') \right] \right\}, \tag{4.25}
\end{aligned}$$

onde  $q$  e  $r$  são tais que extremizam a equação (4.25). Nesta equação, nota-se que em seu último termo ainda há interações entre réplicas distintas. Isto pode ser resolvido reescrevendo este termo da forma

$$\begin{aligned}
\int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \sum_{\nu} \sum_{\alpha \neq \beta} S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) S_{\nu}^{z\beta}(\tau') = & \left( \sum_{\alpha} \int_0^{\beta} d\tau S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) \right)^2 \\
& - \sum_{\alpha} \left( \int_0^{\beta} d\tau S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) \right)^2. \tag{4.26}
\end{aligned}$$

Assim, a função de partição assume a forma

$$\begin{aligned}
Z_n = & \exp \left\{ -n(n-1) \frac{N_d}{2} \beta^2 J^2 q^2 - n \left( \frac{N_d}{2} \beta^2 J^2 r^2 \right) + \ln \int_0^{2\pi} \prod_{\nu} \prod_j \frac{1}{2\pi} dx_{\nu j} e^{-i\mu_{\nu j}} \right. \\
& \times \int D[\phi_{\nu}^*, \phi_{\nu}] \exp \left[ \sum_{\alpha} B_{\alpha} + 4J^2 r \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \sum_{\nu} \sum_{\alpha} S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) S_{\nu}^{z\alpha}(\tau') \right. \\
& \left. \left. + 4J^2 q \left( \sum_{\nu} \sum_{\alpha} \int_0^{\beta} d\tau S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) \right)^2 - 4J^2 q \sum_{\nu} \sum_{\alpha} \left( \int_0^{\beta} d\tau S_{\nu}^{z\alpha}(\tau) \right)^2 \right] \right\}. \tag{4.27}
\end{aligned}$$

Linearizando os termos quadráticos na equação (4.27), com o auxílio da equação (3.12), obtém-se

$$\begin{aligned}
Z_n = & \exp \left\{ -N_d n \left[ \frac{\beta^2 J^2}{2} (r^2 + (n-1)q^2) - \int DZ \ln \int D\xi \right. \right. \\
& \times \int_0^{2\pi} \prod_{\nu} \prod_j \frac{1}{2\pi} dx_{\nu j} e^{-i\mu_{\nu j}} \int D[\phi^*, \phi] \exp(B \\
& \left. \left. + 2J\sqrt{2(r-q)}\xi \int_0^{\beta} d\tau S^z(\tau) + 2J\sqrt{2q}Z \int_0^{\beta} d\tau S^z(\tau) \right) \right] \right\}, \tag{4.28}
\end{aligned}$$

onde  $\xi$  e  $Z$  são campos auxiliares que surgem através da linearização, e  $DZ = \frac{e^{z^2/2}}{\sqrt{2\pi}}$  e  $D\xi = \frac{e^{\xi^2/2}}{\sqrt{2\pi}}$ .

A expressão para a energia livre por cluster ( $f = \frac{F}{N_{cl}}$ ), então, fica

$$\beta f = -\lim_{n \rightarrow 0} \lim_{N_{cl} \rightarrow \infty} \frac{1}{N_{cl} n} \left[ \exp \left\{ -N_{cl} n \left[ \frac{\beta^2 J^2}{2} (r^2 - q^2) \right. \right. \right. \quad (4.29)$$

$$\begin{aligned} & - \int DZ \ln \int D\xi \int_0^{2\pi} \prod_{\nu} \prod_j \frac{1}{2\pi} dx_{\nu j} e^{-i\mu_{\nu j}} \\ & \times \left. \left. \left. \times \int D[\phi^*, \phi] \exp \left( B + h \int_0^{\beta} d\tau S^z(\tau) \right) \right] \right\} \right], \end{aligned} \quad (4.30)$$

onde  $B$  está definido na equação (4.17) sem os somatórios em  $\nu$  e  $\alpha$ , e

$$h = 2J\sqrt{2(r - q)}\xi + 2J\sqrt{2q}z. \quad (4.31)$$

Tomando o limite quando o número de réplicas tende a zero ( $n \rightarrow 0$ ), a energia livre por cluster assume a forma

$$\begin{aligned} \beta f = & \left[ \frac{\beta^2 J^2}{2} (r^2 - q^2) - \ln \int DZ \int D\xi \int_0^{2\pi} \prod_{\nu} \prod_j \frac{1}{2\pi} dx_{\nu j} e^{-i\mu_{\nu j}} \right. \\ & \left. \times \int D[\phi^*, \phi] \exp \left( B + h \int_0^{\beta} d\tau S^z(\tau) \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Substituindo  $B$ , de acordo com a equação (4.17), e  $h$ , de acordo com a equação (4.31) na equação (4.32), pode-se escrever a energia livre por cluster em termos dos operadores de spin como

$$\beta f = \frac{\beta^2 J^2}{2} (r^2 - q^2) - \ln \int DZ \int D\xi \text{Tr T} e^{-\beta \hat{H}_{ef}}, \quad (4.33)$$

para o modelo 4S. Para o modelo 2S, o operador  $\text{Tr}$  deve considerar a restrição, tal que

$$\beta f = \frac{\beta^2 J^2}{2} (r^2 - q^2) - \ln \int DZ \int D\xi \text{Tr T} e^{-\beta \hat{H}_{ef}} \prod_{j=1}^{n_s} \delta(\hat{n}_{\nu j \uparrow} + \hat{n}_{\nu j \downarrow} - 1). \quad (4.34)$$

Em ambas equações (4.33) e (4.34), reconhece-se o Hamiltoniano efetivo

$$\hat{H}_{ef} = \left( - \sum_{ij} J_{ij}^o \hat{S}_{i\nu}^z \hat{S}_{j\nu}^z - \frac{h}{2} \hat{S}_{\nu}^z - 2\Gamma \hat{S}_{\nu}^x \right). \quad (4.35)$$

Assim, tem-se um problema efetivo de um único cluster sob a influência de um campo médio gerado pelos demais clusters. Lembrando que no limite termodinâmico ( $N_{cl} \rightarrow \infty$ ), as equações (4.33) e (4.34) podem ser calculadas através do método “steepest descents”, resultando nas equações ponto de sela

$$\frac{\partial \beta f}{\partial r} = 0 \text{ e } \frac{\partial \beta f}{\partial q} = 0, \quad (4.36)$$

encontram-se as correlações

$$r = \int DZ \frac{\int D\xi \int_0^\beta d\tau \text{Tr } T 2\hat{S}(\tau) 2\hat{S}(\tau) e^{-\beta\hat{H}_{ef}}}{\int D\xi \text{Tr } e^{-\beta\hat{H}_{ef}}} , \quad (4.37)$$

que representa uma correlação entre momentos magnéticos de mesma réplica (autocorrelação), e

$$q = \int DZ \left( \frac{\int D\xi \text{Tr } 2\hat{S} e^{-\beta\hat{H}_{ef}}}{\int D\xi \text{Tr } e^{-\beta\hat{H}_{ef}}} \right)^2 , \quad (4.38)$$

que é uma correlação entre momentos magnéticos de réplicas distintas, ou seja, é o parâmetro de ordem vidro de spin. Valores não nulos de  $q$  indicam fase cluster de vidro de spin. Para uma notação simplificada, considera-se que as equações (4.37) e (4.38) já contêm a restrição para o modelo 2S. As equações (4.37) e (4.38) são resolvidas numericamente por métodos de diagonalização exata. O método numérico consiste em escolher uma base adequada para o Hamiltoniano do sistema. Em seguida, o Hamiltoniano é diagonalizado para então calcular os traços necessários para calcular as correlações de spins auto-consistentemente.

Para o caso  $\Gamma = 0$ , para o modelo 2S, recuperam-se os resultados obtidos por Soukoulis para o modelo de cluster de VS clássico [19].

## 4.1 Cálculos Analíticos

Nesta seção, discute-se como são feitos os cálculos analíticos do calor específico e da susceptibilidade linear para o modelo de cluster de vidro de spin fermiônico em um campo transverso.

### 4.1.1 Calor Específico

Nesta subseção, mostra-se como realizar o cálculo do calor específico analiticamente para o modelo de cluster de VS fermiônico. O calor específico é definido como a variação de energia interna [35], tal que

$$C_v = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right) . \quad (4.39)$$

Da relação fundamental da termodinâmica, sabe-se que a energia interna é definida como sendo [35]

$$U = F + TS , \quad (4.40)$$

onde  $F$  é a energia livre e  $S$  a entropia do sistema. Como a entropia pode ser escrita em termos da energia livre da forma

$$S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right) , \quad (4.41)$$

a energia interna, então, pode ser escrita como

$$\begin{aligned} U &= F - T \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right) \\ &= -T^2 \left[ \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{F}{T} \right) \right] = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta F) . \end{aligned} \quad (4.42)$$

Assim sendo, derivando a energia livre por cluster, definida na equação (4.33), em relação a  $\beta$ , de acordo com a equação (4.42), a energia interna por cluster fica

$$U = \beta J^2 (r^2 - q^2) + \int DZ \frac{\int D\xi \text{Tr T} \hat{H}_{ef} e^{-\beta \hat{H}_{ef}}}{D\xi \text{Tr } e^{-\beta \hat{H}_{ef}}} , \quad (4.43)$$

onde  $\hat{H}_{ef}$  é o Hamiltoniano efetivo definido de acordo com a equação (4.35). Substituindo as equações (4.35) e (4.31) em (4.43), e calculando as integrais necessárias, encontra-se a expressão da energia interna do sistema cluster de VS fermiônico

$$\begin{aligned} U &= 2\beta J^2 (r^2 - q^2) - J_{ij}^o \int DZ \frac{\int D\xi \int_0^\beta d\tau \text{Tr T} \hat{S}_{i\nu}^z \hat{S}_{j\nu}^z(\tau) e^{-\beta \hat{H}_{ef}}}{D\xi \text{Tr } e^{-\beta \hat{H}_{ef}}} \\ &\quad - 2\Gamma \int DZ \frac{\int D\xi \text{Tr T} \hat{S}_\nu^x e^{-\beta \hat{H}_{ef}}}{D\xi \text{Tr } e^{-\beta \hat{H}_{ef}}} . \end{aligned} \quad (4.44)$$

Deste modo, o calor específico, de acordo com a equação (4.39), é expresso por

$$\begin{aligned} C_v &= \frac{d}{dT} \left[ \frac{2J^2}{kT} (r^2 - q^2) \right] - \frac{d}{dT} \left[ J_{ij}^o \int DZ \frac{\int D\xi \int_0^\beta d\tau \text{Tr T} \hat{S}_{i\nu}^z \hat{S}_{j\nu}^z(\tau) e^{-\beta \hat{H}_{ef}}}{D\xi \text{Tr } e^{-\beta \hat{H}_{ef}}} \right] \\ &\quad - \frac{d}{dT} \left[ 2\Gamma \int DZ \frac{\int D\xi \text{Tr T} \hat{S}_\nu^x e^{-\beta \hat{H}_{ef}}}{D\xi \text{Tr } e^{-\beta \hat{H}_{ef}}} \right] , \end{aligned} \quad (4.45)$$

onde o primeiro termo da equação (4.45) expressa a contribuição intercluster para o calor específico, o segundo termo a contribuição intracluster e o terceiro termo surge devido à presença do campo transverso.

### 4.1.2 Susceptibilidade Linear

O cálculo da susceptibilidade magnética é feito a partir da relação [35]

$$\chi = \lim_{H \rightarrow 0} \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right) , \quad (4.46)$$

onde  $M$  é a magnetização e  $H$  um campo magnético externo aplicado, que no limite termodinâmico assume-se  $H \rightarrow 0$ . A magnetização, em termos da energia livre, é dada por

$$M = - \left( \frac{\partial F}{\partial H} \right) , \quad (4.47)$$

onde  $F$  é a energia livre do sistema. Assim, a susceptibilidade, escrita em termos da energia livre, fica

$$\chi = \lim_{H \rightarrow 0} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial H^2} \right) . \quad (4.48)$$

A energia livre para o sistema de cluster de VS fermiônico em um campo transverso é expressa pela relação (4.33), a saber,

$$\beta f = \frac{\beta^2 J^2}{2} (r^2 - q^2) - \ln \int DZ \int D\xi \text{Tr T} e^{-\beta \hat{H}_{ef}} , \quad (4.49)$$

onde  $f$  é a energia livre por cluster. Neste caso, o Hamiltoniano efetivo tem a forma

$$\hat{H}_{ef} = \left( - \sum_{ij} J_{ij}^o \hat{S}_{i\nu}^z \hat{S}_{j\nu}^z - \frac{h}{2} \hat{S}_\nu^z - 2\Gamma \hat{S}_\nu^x - H \sum_i \hat{S}_{i\nu}^z \right) , \quad (4.50)$$

onde  $h = 2J\sqrt{2(r-q)}\xi + 2J\sqrt{2q}z$  e  $H$  é um campo magnético externo aplicado. Calculando as derivadas necessárias para o cálculo de  $\chi$  a partir da equação (4.33) e tomando o limite  $H \rightarrow 0$ , encontra-se

$$\begin{aligned} \chi = \beta & \left( \int DZ \frac{\int D\xi \int_0^\beta d\tau \text{Tr T} 2\hat{S}_\nu^z 2\hat{S}_\nu^z(\tau) e^{-\beta \hat{H}_{ef}}}{\int D\xi \text{Tr } e^{-\beta \hat{H}_{ef}}} \right. \\ & \left. - \int DZ \left( \frac{\int D\xi \text{Tr T} 2\hat{S}_\nu^z e^{-\beta \hat{H}_{ef}}}{\int D\xi \text{Tr } e^{-\beta \hat{H}_{ef}}} \right)^2 \right) . \end{aligned} \quad (4.51)$$

Sabendo que

$$q = \int DZ \left( \frac{\int D\xi \text{Tr T} 2\hat{S}_\nu^z e^{-\beta \hat{H}_{ef}}}{\int D\xi \text{Tr } e^{-\beta \hat{H}_{ef}}} \right)^2 , \quad (4.52)$$

e

$$r = \int DZ \frac{\int D\xi \int_0^\beta d\tau \text{Tr T} 2\hat{S}_\nu^z 2\hat{S}_\nu^z(\tau) e^{-\beta \hat{H}_{ef}}}{\int D\xi \text{Tr } e^{-\beta \hat{H}_{ef}}} , \quad (4.53)$$

a susceptibilidade linear, então, é expressa como

$$\chi = \beta(r - q) . \quad (4.54)$$

## 4.2 Caso Particular de um Único Sítio por Cluster

Nesta seção, considera-se um caso particular do modelo de cluster de vidro de spin fermiônico na presença de um campo transverso, que corresponde a um único sítio por cluster ( $n_s = 1$ ), ou seja, não há formação de cluster e sim um único sítio individual. Esse é o caso discutido na seção (3.2), portanto, espera-se recuperar os resultados termodinâmicos obtidos naquela seção [21]. De acordo com a equação (4.35), o Hamiltoniano efetivo para o caso em questão tem a forma

$$\hat{H}_{ef} = -h\hat{S}^z - 2\Gamma\hat{S}^x, \quad (4.55)$$

pois, neste caso, a interação intracluster  $J_{ij}^o$  não faz sentido, já que há somente um sítio. A análise feita nesta seção refere-se ao modelo 4S.

Como o Hamiltoniano efetivo desse sistema está definido no espaço de Fock [27], com quatro estados por sítio, a base escolhida para o sistema é a base que representa todas as ocupações possíveis. Para o caso de um único sítio, de acordo com a notação apresentada no início deste capítulo ( $|.,.\rangle$ ), o lado esquerdo indica a ocupação de um spin para cima e o lado direito a ocupação de um spin para baixo. Abaixo estão representados os estados possíveis para o caso em questão [27]

$$\begin{aligned} |v_1\rangle &= \phi_0 = |0,0\rangle \\ |v_2\rangle &= c_{\uparrow}^{\dagger}\phi_0 = |\uparrow,0\rangle \\ |v_3\rangle &= c_{\downarrow}^{\dagger}\phi_0 = |0,\downarrow\rangle \\ |v_4\rangle &= c_{\uparrow}^{\dagger}c_{\downarrow}^{\dagger}\phi_0 = |\uparrow,\downarrow\rangle, \end{aligned} \quad (4.56)$$

onde o estado  $\phi_0 = |0,0\rangle$  é chamado estado de vácuo.

Com objetivo de encontrar a energia livre e as demais quantidades termodinâmicas, deve-se primeiro encontrar a matriz energia  $H$  nesta base. Para isso, é preciso atuar o operador  $\hat{H}_{ef}$  nos elementos da base. Por exemplo, o operador  $\hat{H}_{ef}$  atuando no elemento de base  $|v_2\rangle$ , resulta

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ef}|v_2\rangle &= -\frac{h}{2} (c_{\uparrow}^{\dagger}c_{\uparrow} - c_{\downarrow}^{\dagger}c_{\downarrow}) |\uparrow,0\rangle - \Gamma (c_{\uparrow}^{\dagger}c_{\downarrow} + c_{\downarrow}^{\dagger}c_{\uparrow}) |\uparrow,0\rangle \\ &= -\frac{h}{2} (c_{\uparrow}^{\dagger}c_{\uparrow} - c_{\downarrow}^{\dagger}c_{\downarrow}) c_{\uparrow}^{\dagger}|0,0\rangle - \Gamma (c_{\uparrow}^{\dagger}c_{\downarrow} + c_{\downarrow}^{\dagger}c_{\uparrow}) c_{\uparrow}^{\dagger}|0,0\rangle \\ &= -\frac{h}{2}|v_2\rangle - \Gamma|v_3\rangle. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Portanto, vê-se, claramente, como dito no início deste capítulo, que o campo transverso tem a capacidade de misturar os estados magnéticos puros. Isto reflete em uma matriz energia não-diagonal. No exemplo (4.57), usou-se o fato de que os operadores  $\hat{S}^z$  e  $\hat{S}^x$  em segunda quantização são escritos em termos dos operadores fermiônicos de acordo com a equação (4.3), a saber

$$\hat{S}^z = \frac{1}{2}(c_\uparrow^\dagger c_\uparrow - c_\downarrow^\dagger c_\downarrow) \text{ e } \hat{S}^x = \frac{1}{2}(c_\uparrow^\dagger c_\downarrow + c_\downarrow^\dagger c_\uparrow) ,$$

e as relações de comutação dos operadores de criação e destruição foram levadas em conta:  $[c_\lambda, c_\mu^\dagger] = \delta_{\lambda\mu}$ ,  $[c_\lambda, c_\mu] = [c_\lambda^\dagger, c_\mu^\dagger] = 0$  [27]. Procedendo da mesma forma para os elementos restantes da base, encontra-se a matriz energia  $\underline{H}$

$$\underline{H} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -h & -\Gamma & 0 \\ 0 & -\Gamma & h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.58)$$

Nota-se que, na presença de um campo transverso, a matriz energia é não-diagonal. É necessário, então, diagonalizar essa matriz para calcular o traço sobre ela, os parâmetros de ordem VS e as demais quantidades termodinâmicas. Para isso, é preciso encontrar os autovalores e autovetores dessa matriz. Os autovalores são encontrados através da equação característica [42]

$$\det(\underline{H} - \lambda \underline{I}) = 0 , \quad (4.59)$$

onde  $\underline{I}$  é a matriz identidade e  $\lambda$  um autovalor da matriz  $\underline{H}$ ; e os autovetores são encontrados pela equação de autovetores [42]

$$\hat{H}|\Phi_i\rangle = \lambda_i|\Phi_i\rangle , \quad (4.60)$$

onde  $|\Phi_i\rangle$  é um autovetor de  $\hat{H}$  e  $\lambda_i$  seu autovalor correspondente. Diagonalizando a matriz energia, encontra-se

$$\underline{H}' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\Delta} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{\Delta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} , \quad (4.61)$$

onde  $\Delta = \Gamma^2 + h^2$ .

A matriz transformação de base é obtida a partir dos autovetores encontrados para a matriz  $\underline{H}$ , isto é, os autovetores são colocados como colunas desta matriz. Logo, a matriz transformação é

$$\underline{U} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\Gamma}{K_1} & \frac{\Gamma}{K_2} & 0 \\ 0 & \frac{-(\sqrt{\Delta}+h)}{K_1} & \frac{(\sqrt{\Delta}-h)}{K_2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.62)$$

onde

$$K_1 = [2(\Gamma^2 + h^2 + \sqrt{\Delta}h)]^{1/2} \quad \text{e} \quad K_2 = [2(\Gamma^2 + h^2 - \sqrt{\Delta}h)]^{1/2}. \quad (4.63)$$

O operador  $\hat{S}^z$  pode ser escrito em termos dessa nova base através da matriz transformação  $\underline{U}$ , que relaciona um operador escrito em uma base a outra pela relação [42]

$$\langle a^{(k)} | \hat{A} | a^{(l)} \rangle = \langle a^{(k)} | b^{(l)} \rangle, \quad (4.64)$$

onde  $|a'\rangle$  são os elementos da base antiga,  $|b'\rangle$  os elementos da base nova e  $\hat{A}$  o operador [42]. No caso em questão, o operador no qual deve-se fazer a mudança de base é o operador  $\hat{S}^z$ . Assim sendo, o operador  $\hat{S}^z$  escrito na nova base é representado pela seguinte matriz

$$\underline{S}'_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-h}{\sqrt{\Delta}} & \frac{\Gamma}{\sqrt{\Delta}} & 0 \\ 0 & \frac{\Gamma}{\sqrt{\Delta}} & \frac{h}{\sqrt{\Delta}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.65)$$

Lembrando que, de acordo com as equações (4.37) e (4.38), os parâmetros de ordem são expressos por

$$r = \int DZ \frac{\int D\xi \int_0^\beta \text{Tr } T 2\hat{S} 2\hat{S}(\tau) e^{-\beta\hat{H}_{ef}}}{\int D\xi \text{Tr } e^{-\beta\hat{H}_{ef}}} \quad (4.66)$$

e

$$q = \int DZ \left( \frac{\int D\xi \text{Tr } T 2\hat{S} e^{-\beta\hat{H}_{ef}}}{\int D\xi \text{Tr } e^{-\beta\hat{H}_{ef}}} \right)^2, \quad (4.67)$$

e calculando os traços necessários a partir das equações (4.61) e (4.65) encontra-se

$$r = \int DZ \frac{\int D\xi \left( \frac{h^2}{\Delta} \cosh \beta \sqrt{\Delta} + \frac{\beta^2 \Gamma^2}{\Delta^{3/2}} \sinh \beta \sqrt{\Delta} \right)}{\int D\xi (1 + \cosh \beta \sqrt{\Delta})} \quad (4.68)$$

e

$$q = \int DZ \left( \frac{\int D\xi \frac{h}{\sqrt{\Delta}} \sinh \beta \sqrt{\Delta}}{\int D\xi (1 + \cosh \beta \sqrt{\Delta})} \right)^2. \quad (4.69)$$

Esses resultados para os parâmetros  $q$  e  $r$  concordam com os obtidos na seção 3.2, com base no trabalho de Theumann et al. [21] para o VS fermiônico sem cluster. No caso particular do modelo 2S, o traço considera somente os estados magnéticos  $|v_2\rangle$  e  $|v_3\rangle$  e portanto, a matriz energia de interesse é da ordem  $2 \times 2$  (ver bloco central da matriz da equação (4.58)). Os resultados para os parâmetros de ordem, então, são

$$q = \int DZ \left( \frac{\int D\xi \frac{h}{\sqrt{\Delta}} \sinh \beta \sqrt{\Delta}}{\int D\xi \cosh \beta \sqrt{\Delta}} \right)^2, \quad (4.70)$$

e

$$r = \int DZ \frac{\int D\xi \left( \frac{h^2}{\Delta} \cosh \beta \sqrt{\Delta} + \frac{\beta^2 \Gamma^2}{\Delta^{3/2}} \sinh \beta \sqrt{\Delta} \right)}{\int D\xi \cosh \beta \sqrt{\Delta}}, \quad (4.71)$$

que correspondem aos resultados obtidos por Theumann et al. [21] para o modelo 2S.

### 4.3 Caso Geral

Para o caso geral, com  $n_s > 1$ , onde há presença de clusters, são utilizados procedimentos numéricos para calcular a energia livre, os parâmetros de ordem VS e as demais quantidades termodinâmicas. Esses procedimentos consistem em escolher uma base adequada para o sistema (tal base é formada por todas as configurações possíveis de ocupação nos sítios do cluster), calcular a matriz do Hamiltoniano efetivo (equação (4.35)), diagonalizá-la, para então resolver as equações acopladas dos parâmetros de ordem (equações (4.37) e (4.38)) e as demais quantidades termodinâmicas, como a susceptibilidade linear e o calor específico.

Uma dificuldade numérica computacional encontrada para o problema de cluster de VS está em considerar muitos sítios no cluster. Isso porque, para o modelo 4S, a matriz do Hamiltoniano efetivo tem dimensão  $2^{2n_s} \times 2^{2n_s}$  e, para o modelo 2S, a dimensão dessa matriz é  $2^{n_s} \times 2^{n_s}$ , onde  $n_s$  é o número de sítios no cluster. Portanto, quando há muitos sítios

no cluster, a dimensão da matriz do Hamiltoniano efetivo torna-se muito grande, o que dificulta sua diagonalização exata e torna o cálculo das quantidades termodinâmicas inviável frente ao custo computacional. Em particular, quando  $\Gamma = 0$ , a matriz do Hamiltoniano efetivo é diagonal, o que facilita os cálculos numéricos das quantidades termodinâmicas.

# Capítulo 5

## Resultados

Nesse capítulo, são apresentados resultados obtidos numericamente para as quantidades termodinâmicas, bem como diagramas de fase de temperatura por campo transverso, os quais mostram a competição entre a fase paramagnética e a fase cluster de vidro de spin. Nesse trabalho, os resultados termodinâmicos estão limitados ao modelo 2S, à exceção ao diagrama de fase para  $n_s = 1$ , o qual também é analisado para o modelo 4S. Os resultados termodinâmicos são obtidos variando o número de sítios dentro do cluster ( $n_s$ ) e as intensidades das interações ferromagnéticas intraclusters ( $J_o$ ). Os resultados para as quantidades termodinâmicas são analisados sem a presença de um campo transverso  $\Gamma$  e em sua presença. Os diagramas de fase de temperatura por  $\Gamma$  são calculados variando a interação intracluster  $J_o$  e o tamanho do cluster  $n_s$ . O parâmetro de ordem vidro de spin ( $q$ ) e a autocorrelação entre momentos magnéticos de clusters de mesma réplica ( $r$ ) também são analisados numericamente nesta seção. Aqui, as grandezas  $J_o$ ,  $T$  e  $\Gamma$  são dadas em unidades de  $J$ .

No modelo em questão, considera-se que os sítios nos clusters são distribuídos de tal modo que sua configuração seja o mais próximo de uma rede quadrada e as interações intraclusters ( $J_o$ ) são constantes e somente entre primeiros vizinhos. A base, para cada tamanho de cluster, é formada por todas as possíveis configurações de ocupação nos sítios.

Na seção (5.1), são discutidos o parâmetro de ordem VS e a autocorrelação do momento magnético do cluster ( $r = \langle \hat{S}_\alpha^z \hat{S}_\alpha^z \rangle$ ). Essas quantidades são analisadas variando a intensidade da interação ferromagnética intracluster, para um tamanho de cluster  $n_s$  fixo, e também variando  $n_s$  mantendo a interação intracluster constante. Os casos citados são analisados sem um campo magnético transverso aplicado  $\Gamma$  e também na presença de  $\Gamma$ .

Na seção (5.2), são analisados os gráficos do calor específico em função da temperatura

variando a interação intracluster, para um dado tamanho de cluster, e variando o tamanho de cluster, mantendo  $J_o$  constante. O comportamento do calor específico é analisado também sem a presença de um campo transverso e, em sua presença, para os casos citados.

A susceptibilidade linear é discutida na seção (5.3) para valores de interação intracluster distintos e vários valores de  $n_s$ . A influência do campo transverso sob a susceptibilidade linear também é analisada.

Na seção (5.4), são apresentados os resultados obtidos para os diagramas de fase de temperatura por campo transverso, para o caso onde não há formação de cluster ( $n_s = 1$ ) [21] e para diferentes tamanhos de cluster. Os diagramas de fase também são analisados para um  $n_s$  fixo e variando-se a interação intracluster. Em todos os resultados obtidos neste capítulo, a interação intracluster admitida é a interação ferromagnética ( $J_o > 0$ ) entre primeiros vizinhos.

## 5.1 Parâmetros de Ordem Vidro de Spin

Os comportamentos do parâmetro de ordem vidro de spin  $q$  e da autocorrelação do momento magnético do cluster  $r$  são analisados em função da temperatura  $T$  para diversos tamanhos de cluster, diferentes intensidades de interações ferromagnéticas intracluster e também na presença e na ausência de um campo transverso  $\Gamma$  aplicado. Para propósitos numéricos, os valores de  $J$  são escolhidos de tal modo que  $T_f = 1$  para  $\Gamma = 0$ , onde  $T_f$  é a temperatura de transição para a fase cluster de VS. Os resultados discutidos nesta seção são obtidos para o modelo 2S.

Para o caso de um único sítio ( $n_s = 1$ ), sem a formação de cluster e sem a presença de um campo transverso ( $\Gamma = 0$ ), recuperam-se os resultados termodinâmicos obtidos para o modelo SK [15, 21], como pode ser visto na figura (5.1(a)) (curvas azuis - linha pontilhada). Essas curvas representam o parâmetro de ordem VS  $q$  e a correlação  $r$ . Analisando o parâmetro  $r$  sem a formação de cluster e sem campo magnético transverso aplicado, observa-se que ele permanece constante para qualquer valor de temperatura ( $r = 1$ ), onde o parâmetro  $r$  independe da temperatura, recuperando os resultados clássicos [15]. O parâmetro de ordem VS, para o mesmo caso ( $n_s = 1$  e  $\Gamma = 0$ ), é zero a altas temperaturas (fase paramagnética) e assume valores maiores que zero na temperatura de congelamento  $T_f$  e abaixo dela (fase cluster de vidro de spin). Este parâmetro é usado para caracterizar

a fase cluster de VS, isto é, para  $q = 0$  tem-se fase paramagnética e para  $q \neq 0$  a fase cluster de VS.

As curvas restantes na figura (5.1(a)) representam os resultados obtidos para os parâmetros  $q$  e  $r$  aumentando o número de sítios dentro do cluster, mas ainda sem a presença do campo transverso ( $\Gamma = 0$ ). Nessa figura, observa-se que aumentando o número de sítios no cluster, o comportamento do parâmetro de ordem  $q$  permanece o mesmo (linhas pretas - linha contínua para  $n_s = 3$  e vermelha - linha tracejada para  $n_s = 6$ ), isto é, o parâmetro de ordem VS é diferente de zero abaixo da temperatura de congelamento  $T_f$  e é nulo para temperaturas acima de  $T_f$ . Entretanto, o parâmetro  $r$  altera seu comportamento na presença de cluster. Isso pode ser visto na figura (5.1(a)), onde estão plotados os gráficos do parâmetro  $r$  em função da temperatura para  $n_s = 3$  (curva preta - linha contínua) e  $n_s = 6$  (curva vermelha - linha tracejada). Nota-se que aumentando o tamanho do cluster, o parâmetro  $r$  passa a diminuir monotonicamente com a temperatura. Isto se deve ao fato de que como há mais de um sítio por cluster, a correlação  $r$  pode assumir outros valores além de 1, contrário ao caso sem cluster, onde  $r = 1$  independente da temperatura [15]. Todos os resultados obtidos nessa figura são realizados para uma intensidade de interação intracluster da ordem  $J_o = 1$ .

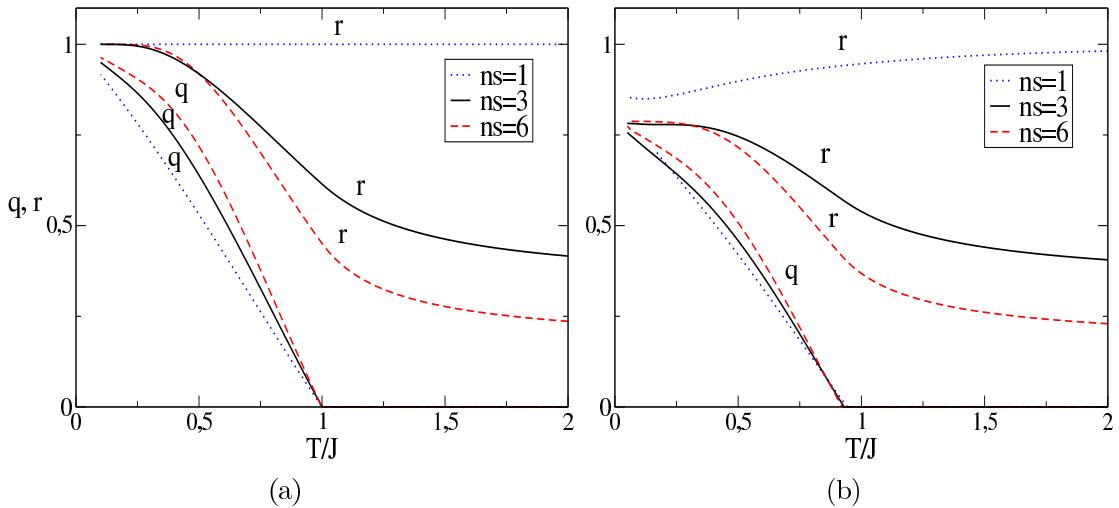


Figura 5.1: (a) Gráficos dos parâmetros  $q$  e  $r$  para  $J_o = 1$  e  $\Gamma = 0$ , nos casos em que não há cluster ( $n_s = 1$ ) e para os tamanhos de cluster  $n_s = 3$  e  $n_s = 6$ . (b) Gráficos dos parâmetros  $q$  e  $r$  para  $J_o = 1$  e  $\Gamma = 0,5$ , nos casos em que não há cluster ( $n_s = 1$ ) e para os tamanhos de clusters  $n_s = 3$  e  $n_s = 6$ .

Pode-se notar também na figura (5.1(a)) que, ao aumentar o tamanho do cluster mantendo a interação intracluster constante ( $J_o = 1$ ), a correlação  $r$  diminui. Isso porque,

como são consideradas interações entre primeiros vizinhos, quando se aumenta o tamanho do cluster aumenta o número de primeiros vizinhos, logo, cada spin deve obedecer outras interações, fazendo com que a probabilidade dos spins a se alinharem ferromagneticamente com todos os vizinhos diminua.

Os parâmetros  $q$  e  $r$  também são analisados na presença de um campo transverso da ordem  $\Gamma = 0,5$  para os casos anteriores, isto é, para o caso onde não há formação de cluster ( $n_s = 1$ ) e para os tamanhos de cluster  $n_s = 3$  e  $n_s = 6$ , com  $J_o = 1$ . Estes resultados estão representados na figura (5.1(b)). Nessa figura, observa-se que o parâmetro de ordem VS mantém o mesmo comportamento observado sem a presença de campo transverso, ou seja, é nulo acima da temperatura de congelamento e é diferente de zero em  $T_f$  e abaixo dela. Porém, sua temperatura de transição, isto é, quando o parâmetro de ordem VS deixa de ser zero, é diminuída em relação ao gráfico com  $\Gamma = 0$  (figura 5.1(b)), curvas azul - linha pontilhada para  $n_s = 1$ , preto - linha contínua para  $n_s = 3$  e vermelho - linha tracejada para  $n_s = 6$ ). Observa-se também na figura (5.1(b)), que o parâmetro  $r$ , mesmo para o caso sem formação de cluster (curva azul - linha pontilhada), não assume o valor constante ( $r = 1$ ). O campo transverso  $\Gamma$ , como visto na seção (3.2), tem como função inverter os spins do sistema. Desse modo, ele faz com que os estados magnéticos puros se misturem, como consequência,  $r \leq 1$  [21]. Para os casos em que há formação de cluster ( $n_s = 3$  e  $n_s = 6$ ), aplicando-se o campo transverso, o parâmetro  $r$  diminui em relação aos resultados com  $\Gamma = 0$ . No limite de alta temperatura, os valores do parâmetro  $r$  tendem aos valores obtidos sem a presença de campo transverso. Isso porque, no limite de altas temperaturas, as flutuações térmicas são mais relevantes do que as flutuações quânticas.

Na figura (5.2), tem-se os gráficos dos parâmetros  $q$  e  $r$  em função da temperatura mantendo o número de sítios no cluster fixo em  $n_s = 6$  e variando a interação intracluster  $J_o$  sem a presença de um campo transverso (5.2(a)) e na presença de um campo magnético transverso (5.2(b)). Nessa figura, o valor de  $J$  foi escolhido de modo que  $T_f = 1$  para  $\Gamma = 0$  e interação intracluster  $J_o = 1$ . Na figura (5.2(a)), observa-se, para o parâmetro de ordem  $q$ , que à medida que se aumenta a interação ferromagnética intracluster a temperatura de transição também aumenta. Isso porque, quando aumenta-se a interação intracluster espera-se que a orientação ferromagnética entre os spins dentro do cluster seja fortalecida. Sendo assim, é mais fácil fazer com que todos os spins no cluster se alin-

hem ferromagneticamente. Consequentemente, o momento magnético do cluster torna-se maior, favorecendo as interações magnéticas intercluster. Assim, é necessário uma temperatura maior para destruir a fase cluster de VS. Nessa mesma figura, nota-se que, ao aumentar a interação intracluster  $J_o$ , o parâmetro  $r$  aumenta também, e o cluster torna-se mais coeso.

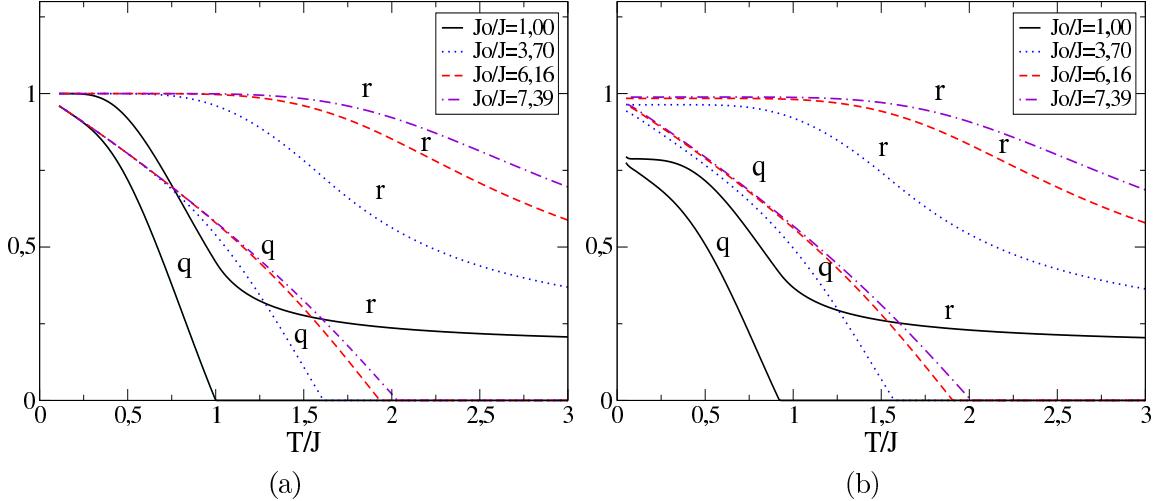


Figura 5.2: (a) Gráficos dos parâmetros  $q$  e  $r$  para  $n_s = 6$ , para diferentes valores de  $J_o$  e com  $\Gamma = 0$ . (b) Gráficos dos parâmetros  $q$  e  $r$  para  $n_s = 6$  com  $J_o$  variável para  $\Gamma = 0, 5$ .

Na figura (5.2(b)), tem-se os gráficos dos parâmetros  $q$  e  $r$  para os mesmos casos anteriores, porém, na presença de um campo transverso da ordem de  $\Gamma = 0, 5$ . Observa-se, para o parâmetro de ordem VS, que na presença do campo transverso, a temperatura de transição diminui, isto é, a fase cluster de VS ocorre para temperaturas mais baixas na presença de um campo transverso. A curva do parâmetro  $r$  também é diminuída em relação às curvas sem campo transverso. Esses comportamentos indicam que o aumento do campo transverso destrói a fase cluster de VS. Novamente, no limite de altas temperaturas, os valores de  $r$  tendem aos respectivos valores obtidos sem a presença do campo transverso.

## 5.2 Calor Específico

Nessa seção, é analisado o comportamento do calor específico para diferentes tamanhos de clusters, bem como o seu comportamento na ausência e na presença de um campo magnético transverso e a influência da interação intracluster sobre o calor específico. Os resultados analisados nessa seção foram obtidos para o modelo 2S e para interações ferromagnéticas intracluster ( $J_o > 0$ ).

Na figura (5.3), tem-se os gráficos do calor específico ( $C_v$ ) para diferentes intensidades de interação intracluster ( $J_o$ ), para um cluster de tamanho fixo  $n_s = 6$ , quando não há um campo transverso aplicado (fig. 5.3(a)) e quando este está presente (fig. 5.3(b)). Na figura (5.3(a)), onde  $\Gamma = 0$ , observa-se o efeito do aumento da interação intracluster  $J_o$  sobre o comportamento do calor específico. Para isso, o valor numérico de  $J$  foi ajustado de modo que a temperatura de transição  $T_f$  seja igual a 1, para os diferentes valores de  $J_o$ . Para  $J_o = 1,00$  (valor baixo de  $J_o$ ), ocorre apenas um máximo na curva do calor específico a uma temperatura ligeiramente abaixo da temperatura de transição  $T_f$ , resultado contrário ao esperado para sistemas físicos de VS (máximo acima de  $T_f$  e nenhuma anomalia na temperatura de transição [17]). Quando  $J_o$  é aumentado para 3,80, há um deslocamento do máximo de  $C_v$  para temperaturas acima da temperatura de congelamento  $T_f$  e uma pequena descontinuidade em  $T_f$ . Aumentando ainda mais a interação intracluster  $J_o$  (para os valores  $J_o = 6,00$  e  $J_o = 8,40$ ), observa-se uma separação maior entre o máximo arredondado na curva do calor específico, que ocorre a uma temperatura  $T_o$  acima de  $T_f$  e uma pequena descontinuidade na temperatura de transição  $T_f = 1$ . Isso quer dizer, o aumento da interação intracluster  $J_o$  evidencia a contribuição de duas interações para o comportamento do calor específico. A primeira, que pode ocorrer em uma temperatura  $T_o$  acima da temperatura de congelamento, devido a correlações ferromagnéticas de curto alcance e que é fortemente dependente de  $J_o$  (interação intracluster). A segunda, na temperatura de congelamento, devido à transição para a fase cluster de vidro de spin (interação intercluster). Esses resultados são qualitativamente semelhantes aos resultados obtidos por Soukoulis [19]. Para  $J_o$  pequeno, a contribuição da interação intracluster para o calor específico é relativamente pequena e ocorre em temperaturas nas quais os efeitos das interações intracluster e intercluster estão sobrepostos. Aumentando-se a interação intracluster, essa contribuição passa a ser maior e há uma separação entre os dois máximos do  $C_v$ , um que ocorre a uma temperatura  $T_o$  acima de  $T_f$  e outro na temperatura de transição. Além disso, observa-se que aumentando a interação intracluster, o segundo máximo em  $T_o$  torna-se mais arredondado. Esse comportamento também é evidenciado na figura (5.4), onde estão representados os gráficos para o calor específico em função da temperatura para um cluster de tamanho  $n_s = 3$ , sem a presença de campo transverso para os valores de interação intracluster  $J_o = 11,2$  (fig. 5.4(a)), na qual o máximo

arredondado ocorre a uma temperatura  $T_o = 2,15 T_f$ , e para  $J_o = 19,5$  (fig. 5.4(b)), onde o máximo devido à contribuição intracluster encontra-se em  $T_o = 3,94 T_f$ . Nas figuras (5.3) e (5.4), observa-se que aumentando a interação intracluster o calor específico diminui. Isso ocorre, pois o calor específico está relacionado à entropia [43, 44]. Sendo assim, quando se aumenta a interação intracluster, a desordem (entropia) diminui e, por consequência, o calor específico também diminui.

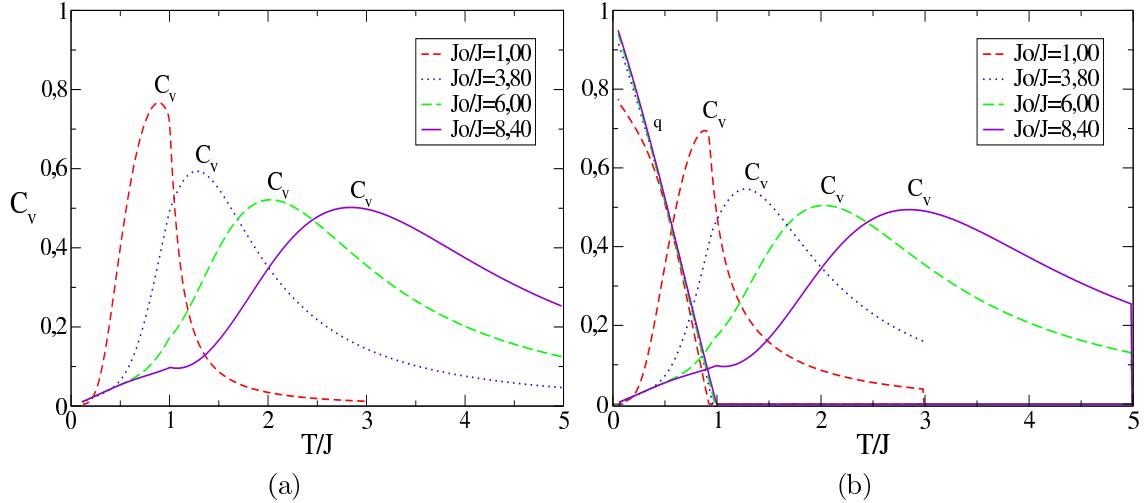


Figura 5.3: (a) Gráficos do calor específico em função da temperatura para  $n_s = 6$ , diferentes interações intracluster  $J_o$  para  $\Gamma = 0$ . (b) Gráficos do calor específico em função da temperatura e do parâmetro de ordem VS para  $n_s = 6$ ,  $J_o$  variável com  $\Gamma = 0,5$ .

Os gráficos do calor específico em função da temperatura para  $n_s = 6$ , com os mesmos valores de interação intracluster  $J_o$  usados na figura (5.3(a)), porém na presença de um campo transverso da ordem de  $\Gamma = 0,5$ , são mostrados na figura (5.3(b)). O objetivo desta figura é analisar o comportamento do calor específico na presença de um campo transverso. Nesse gráfico, estão plotados também os parâmetros de ordem VS para cada valor de  $J_o$ . Para as curvas dos parâmetros de ordem VS, observa-se, como discutido na seção 5.1, que, na presença de um campo transverso, a temperatura de transição diminui. Para o calor específico, assim como no gráfico da figura (5.3(a)), nota-se que também há a ocorrência de um máximo arredondado a uma temperatura  $T_o$  (máximo devido à contribuição intracluster) e uma pequena descontinuidade em  $T_f$ , indicando também duas contribuições para o calor específico: a contribuição intracluster e a contribuição intercluster. Com a presença do campo transverso, observa-se que o máximo no calor específico em  $T_o$  diminui. Essa característica torna-se mais evidente a baixas temperat-

uras, onde as flutuações quânticas são mais relevantes. Observa-se, também, que há um ligeiro deslocamento deste máximo para a direita. Com relação ao máximo na temperatura de transição, este sofre um deslocamento para a esquerda. Portanto, na presença de um campo transverso, para o mesmo valor de  $J_o$ , os dois máximos no calor específico se afastam, tornam-se mais separados.

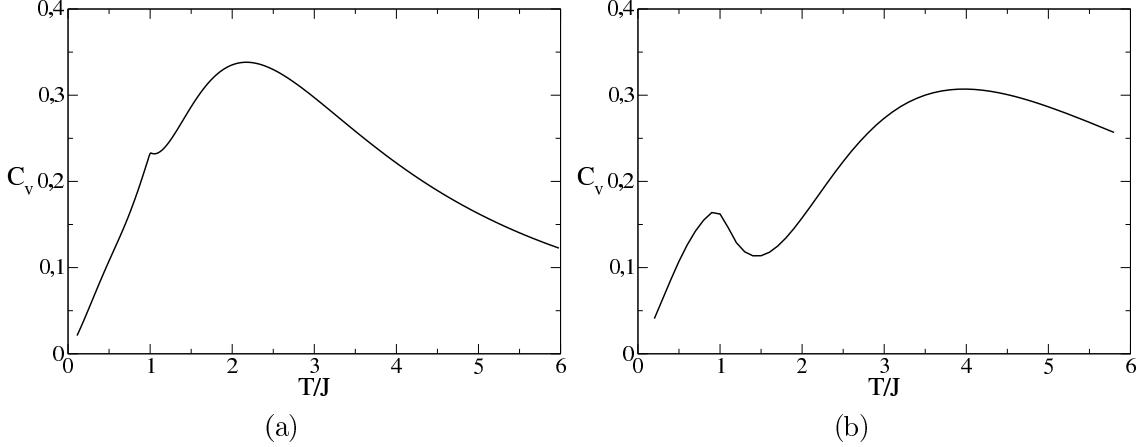


Figura 5.4: (a) Gráfico do calor específico em função da temperatura para  $n_s = 3$ ,  $J_o = 11,2$ , máximo devido à interação intracluster em  $T_o = 2,15 T_f$ . (b) Gráfico do calor específico em função da temperatura para  $n_s = 3$ ,  $J_o = 19,5$ , máximo devido à contribuição intracluster em  $T_o = 3,94 T_f$ .

Na figura (5.5), são apresentados os gráficos do calor específico para um valor fixo de interação intracluster ( $J_o = 8,40$ ) para os tamanhos de clusters  $n_s = 3$ ,  $n_s = 6$  e  $n_s = 8$ , sem a presença de campo transverso aplicado (fig. 5.5(a)) e em sua presença (fig. 5.5(b)). Para analisar o comportamento do número de sítos no cluster ( $n_s$ ) sobre o calor específico, os valores de  $J$  foram escolhidos de tal modo que a temperatura de transição seja  $T_f = 1$  para  $\Gamma = 0$  para cada valor de  $n_s$ . Na figura (5.5(a)), para  $n_s = 3$ , observa-se um máximo arredondado a uma temperatura acima de  $T_f$  e uma pequena descontinuidade na temperatura de transição. Para valores maiores de  $n_s$  ( $n_s = 6$  e  $n_s = 8$ ), há uma separação maior entre esses dois máximos. Portanto, para uma mesma interação  $J_o$ , o aumento do tamanho dos clusters torna mais evidente a contribuição intracluster.

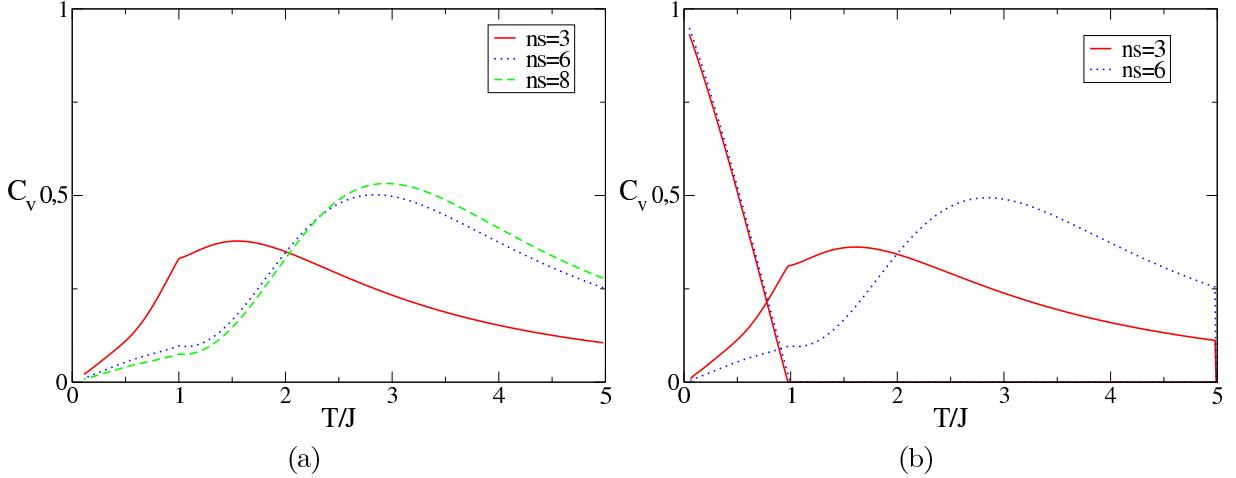


Figura 5.5: (a) Gráficos do calor específico em função da temperatura para diferentes tamanhos de clusters, com  $J_o = 8, 40$  e  $\Gamma = 0$ . (b) Gráficos do calor específico em função da temperatura e do parâmetro de ordem VS  $q$  para diferentes tamanhos de clusters, com  $J_o = 8, 40$  e com  $\Gamma = 0, 5$ .

Na figura (5.5(b)), tem-se os gráficos do calor específico para os mesmos tamanhos de clusters usados na figura (5.5(a)), porém em presença de um campo transverso da ordem de  $\Gamma = 0, 5$ . Os parâmetros de ordem VS também são mostrados nessa figura e, como discutido na seção 5.1, nota-se uma diminuição na temperatura de transição na presença de campo transverso. Nas curvas para o calor específico, observa-se um arredondamento maior em  $T_o$  e um ligeiro deslocamento deste máximo à direita. Nota-se, também, um ligeiro deslocamento para a esquerda da descontinuidade em  $T_f$ . Sendo assim, observa-se uma separação maior entre o máximo causado pela formação dos clusters, máximo em  $T_o$ , e a descontinuidade na temperatura de transição.

Na figura (5.6), são mostrados os gráficos do calor específico, para valores distintos de interação ferromagnética intracluster e de tamanhos de cluster sem a presença de campo transverso (figura 5.6(a)) e na presença de um campo da ordem de  $\Gamma = 1, 0$  (figura 5.6(b)). Os gráficos são feitos de tal modo que a relação  $T_o = 1.3 T_f$  é mantida quando o número de sítios no cluster e as interações intracluster são alterados para os casos com  $\Gamma = 0$  (figura 5.6(a)). O valor numérico de  $J$  foi ajustado de modo que  $T_f = 1$  para  $\Gamma = 0$ , para os distintos valores de  $n_s$ . Observa-se na figura (5.6(a)) que, aumentando-se o número de sítios no cluster ( $n_s$ ), é preciso diminuir a interação intracluster para manter o mesmo comportamento, ou seja, máximo arredondado devido à contribuição intracluster em  $T_o = 1.3 T_f$ . É importante notar que, para tamanhos de clusters maiores

( $n_s = 6$  e  $n_s = 9$ ), a descontinuidade na temperatura de transição  $T_f$  gradativamente diminui. Desse modo, o comportamento de  $C_v$  corresponde ao comportamento esperado para um sistema físico de VS, ou seja, para tamanhos de clusters maiores o máximo está a uma temperatura  $T_o$  acima de  $T_f$  e não apresenta nenhuma anomalia na temperatura de transição.

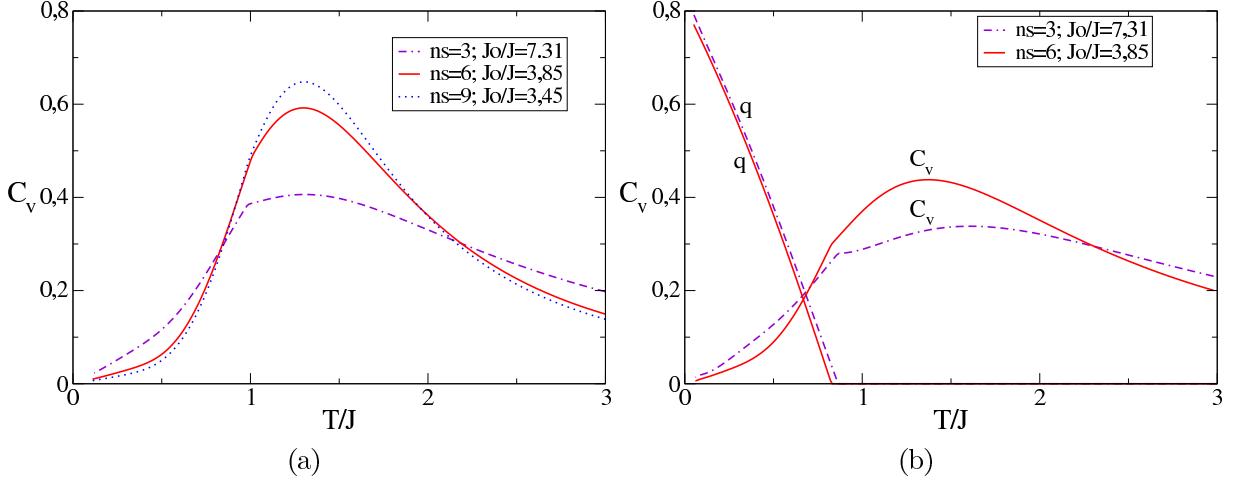


Figura 5.6: (a) Gráficos do calor específico em função da temperatura para diferentes tamanhos de clusters, com  $J_o$  ajustado de modo que o máximo arredondado esteja em  $T_o = 1,3$   $T_f$  para  $\Gamma = 0$ , onde  $T_f = 1$ . (b) Curvas do calor específico para  $n_s = 3$  e  $n_s = 6$  para os mesmos valores de  $J_o$  porém com  $\Gamma = 1,0$ . Nesta figura, os parâmetros de ordem são mostrados indicando a temperatura de transição para cada caso.

Na figura (5.6(b)), estão representadas as curvas do calor específico e do parâmetro de ordem VS para  $\Gamma = 1,0$  para os tamanhos de clusters  $n_s = 3$  e  $n_s = 6$ . Nas curvas dos parâmetros de ordem VS, como mencionado anteriormente, há uma diminuição na temperatura de transição (quando  $q$  deixa de ser zero). Para as curvas do calor específico, para os mesmos valores de interação introcluster dos casos sem campo transverso, nota-se que, na presença de um campo transverso, a distância entre o máximo arredondado em  $T_o$  e a descontinuidade em  $T_f$  aumenta. Isso indica que a presença de efeitos quânticos no problema desloca o máximo em  $T_o$  para temperaturas maiores e a temperatura de transição para temperaturas menores, fazendo com que o máximo em  $T_o$  na curva de  $C_v$  ocorra para temperaturas muito acima de 20 – 30% de  $T_f$ .

### 5.3 Susceptibilidade Magnética

Outra grandeza termodinâmica analisada para o modelo quântico de cluster de VS fermiônico é a susceptibilidade magnética linear. Essa é analisada variando a interação ferromagnética intracluster  $J_o$ , para um tamanho de cluster  $n_s$  fixo, e também variando  $n_s$  mantendo a interação  $J_o$  constante. Esses casos são investigados sem um campo transverso  $\Gamma$  aplicado e na presença de um campo transverso. Os casos citados são analisados para o modelo 2S.

Na figura (5.7), estão representadas as curvas obtidas para a susceptibilidade linear com uma interação intracluster  $J_o = 1$ , nos casos onde não há formação de cluster ( $n_s = 1$ ) e quando o tamanho dos clusters é  $n_s = 3$  e  $n_s = 6$ , com  $\Gamma = 0$  (fig. 5.7(a)) e, para os mesmos casos na presença de um campo transverso (fig. 5.7(b)). Para propósitos numéricos, na figura (5.7(a)), o valor numérico de  $J$  é escolhido de modo que a temperatura de transição seja  $T_f = 1$  para os tamanhos de clusters em questão. Nessa figura, observa-se o comportamento esperado para um sistema de VS, isto é, a curva da susceptibilidade apresenta um pico bem definido na temperatura de transição  $T_f$ . Este pico indica a transição entre as fases paramagnéticas ( $q = 0$ ) e a fase cluster de VS ( $q > 0$ ).

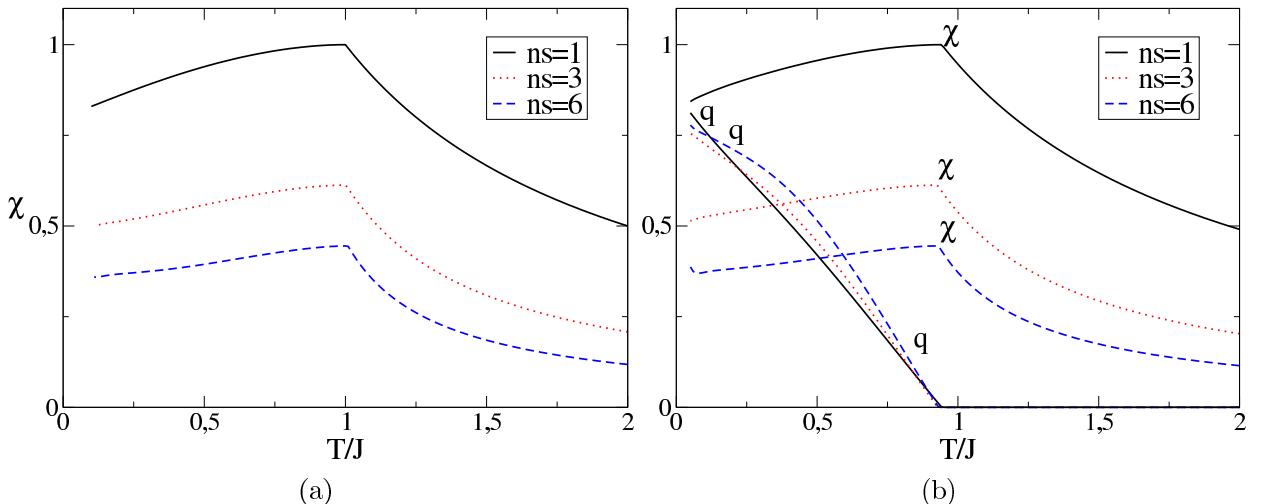


Figura 5.7: (a) Gráficos da susceptibilidade linear em função da temperatura, com  $J_o = 1$  e  $\Gamma = 0$ , para o caso onde não há formação de cluster ( $n_s = 1$ ), e para tamanhos de cluster  $n_s = 3$  e  $n_s = 6$ . (b) Gráficos da susceptibilidade linear em função da temperatura e dos parâmetros de ordem VS, com  $J_o = 1$  e  $\Gamma = 0,5$ , para o caso sem cluster ( $n_s = 1$ ) e para  $n_s = 3$  e  $n_s = 6$ .

A figura (5.7(b)) é plotada para o mesmo caso da figura (5.7(a)), isto é, com  $J_o = 1$  para os números de sítios dentro do cluster  $n_s = 1$ ,  $n_s = 3$  e  $n_s = 6$ , porém na presença

de um campo transverso da ordem de  $\Gamma = 0,5$ . Nessa figura, também estão representados os parâmetros de ordem VS para cada tamanho de cluster considerado. Para as curvas dos parâmetros de ordem VS, observa-se uma diminuição na temperatura de transição quando  $\Gamma$  é aplicado, como esperado (ver seção 5.1). A susceptibilidade linear, mesmo na presença do campo transverso, mantém o seu comportamento, isto é, apresenta um pico bem característico na temperatura de transição  $T_f$ .

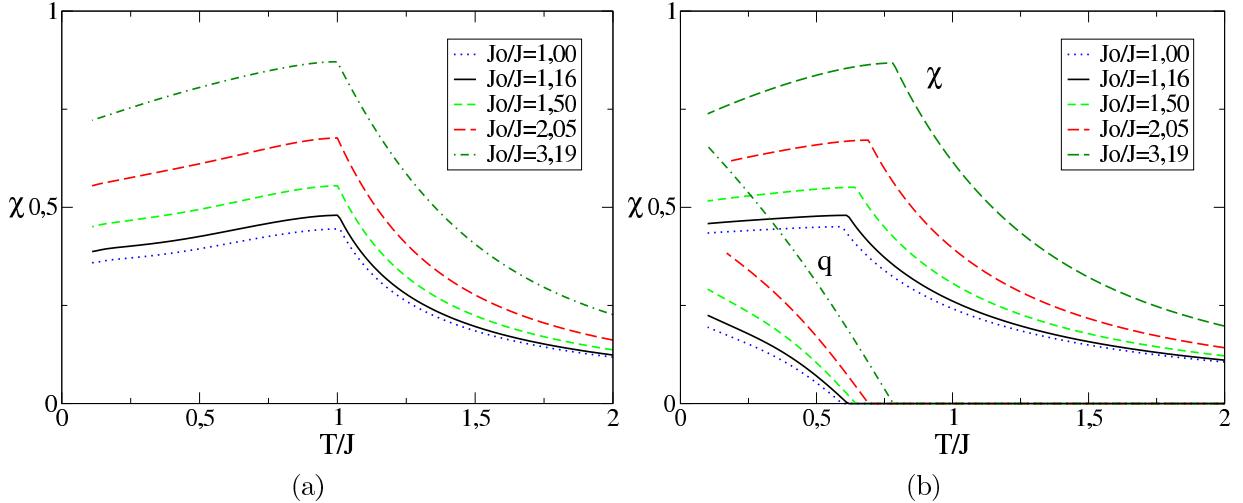


Figura 5.8: (a) Gráficos da susceptibilidade linear em função da temperatura para o tamanho de cluster  $n_s = 6$ , diferentes intensidades de interação intracluster  $J_o$ , com  $\Gamma = 0$ . (b) Gráficos da susceptibilidade linear em função da temperatura para  $n_s = 6$ , com  $J_o$  variável e  $\Gamma = 1,0$ .

Na figura (5.8), são mostrados os gráficos da susceptibilidade linear para diferentes intensidades de interação intracluster  $J_o$  para o tamanho de cluster fixo em  $n_s = 6$ , quando  $\Gamma = 0$  (fig. 5.8(a)) e na presença de um campo transverso igual à  $\Gamma = 1,0$  (fig. 5.8(b)). Nota-se, na figura (5.8(a)), que a mesma característica na susceptibilidade para todos os valores de  $J_o$  é mantida, ou seja, a susceptibilidade apresenta um pico bem marcado na temperatura de transição. Portanto, o comportamento da susceptibilidade linear não é afetado, mesmo quando há formação de clusters, o que concorda com os resultados de Soukoulis [19]. Na figura (5.8(b)), onde  $\Gamma = 1,0$ , são apresentadas as curvas para a susceptibilidade linear e os parâmetros de ordem VS correspondentes. Para os parâmetros de ordem, novamente observa-se que a temperatura de congelamento diminui quando é aplicado um campo transverso. Para as curvas da susceptibilidade, mesmo na presença de um campo transverso, o máximo característico na temperatura de transição é mantido. Portanto, o comportamento da susceptibilidade magnética não é afetado na

presença de um campo transverso.

## 5.4 Diagramas de Fase

Os diagramas de fase de temperatura por campo transverso são obtidos para o caso onde não há formação de cluster, isto é, para  $n_s = 1$ , no modelo de dois estados (modelo 2S) e no modelo de quatro estados (modelo 4S). Para tamanhos de clusters maiores ( $n_s = 3$  e  $n_s = 6$ ), os diagramas de fase são realizados somente para o modelo 2S. A influência da interação intracluster  $J_o$  sobre os diagramas de fase, bem como a influência do tamanho dos clusters, também são investigadas para o modelo 2S. Nessa seção, é considerada a interação intracluster ferromagnética para todos os casos apresentados.

Para o caso  $n_s = 1$ , os diagramas de fase obtidos a partir do modelo de cluster de VS quântico concordam com os resultados obtidos por Theumann et al. [21] (figura 5.9(a)). As linhas críticas marcadas separam a fase paramagnética, onde  $q = 0$ , e a fase vidro de spin, onde  $q > 0$ . Para valores de campo transverso maiores, os modelos 2S e 4S convergem para um mesmo ponto crítico quântico [21], que corresponde ao valor crítico do campo transverso  $\Gamma_c = 2\sqrt{2}J$ . Observa-se, nessa figura, para valores pequenos de campo transverso, que diminuindo a temperatura a partir de uma fase paramagnética chega-se a uma fase VS. Porém, para valores maiores de campo transverso, a temperatura de transição é menor. Isso indica que é preciso diminuir ainda mais a temperatura para obter a fase VS; aumentando mais ainda o campo transverso não há transição para a fase VS. Isto significa que o aumento do campo transverso destrói a fase VS, assim como o aumento da temperatura. O mesmo comportamento é observado para os modelos 2S e 4S. Entretanto, para o modelo 4S, a linha crítica, a qual indica a transição entre as fases paramagnéticas e a fase VS, ocorre para temperaturas menores do que a linha crítica para o modelo 2S.

Aumentando o número de sítios no cluster para  $n_s = 3$ , para o modelo 2S, observa-se o mesmo comportamento na linha crítica de transição entre a fase paramagnética e, nesse caso, a fase cluster de vidro de spin (figura 5.9(b)). As linhas críticas marcam a transição entre as fases paramagnéticas, a altas temperaturas, e a fase cluster de VS, abaixo de  $T_f$ . Para este caso,  $J$  foi escolhido de modo que  $T_f = 1$  quando  $\Gamma = 0$ . Novamente a linha crítica do modelo 2S converge para um ponto crítico quântico para valores maiores de

Γ. Observa-se também nessa figura, que diminuindo a temperatura a partir de uma fase paramagnética, para  $\Gamma$  pequeno, chega-se a uma fase cluster de VS. Aumentando o valor de  $\Gamma$ , a temperatura de transição é diminuída, assim como no caso sem a formação de clusters, e aumentando ainda mais este parâmetro, a fase cluster de VS é destruída.

A influência da interação intracluster sobre os diagramas de fase de temperatura por campo transverso também é analisada. Esses diagramas são obtidos para os tamanhos de cluster  $n_s = 3$  (figura 5.10(a)) e  $n_s = 6$  (figura 5.10(b)), para diferentes intensidades de interações ferromagnéticas intracluster e para o modelo 2S. Para propósitos numéricos, o valor de  $J$  é escolhido de modo que a temperatura de congelamento seja igual à  $T_f = 1$  para  $\Gamma = 0$  nos casos citados. Nota-se, nas figuras (5.10(a)) e (5.10(b)), que aumentando a interação intracluster, a fase cluster de vidro de spin também aumenta. Isto é, aumentando  $J_o$ , a temperatura na qual ocorre a transição da fase paramagnética para a fase cluster de VS é maior, sendo assim, a fase cluster de VS inicia para temperaturas mais elevadas. Observa-se também que, com o aumento da interação intracluster, a fase cluster de VS é mantida para valores maiores de  $\Gamma$ . Isto é, são necessárias temperaturas mais elevadas e  $\Gamma$  maiores para destruir a fase cluster de VS.

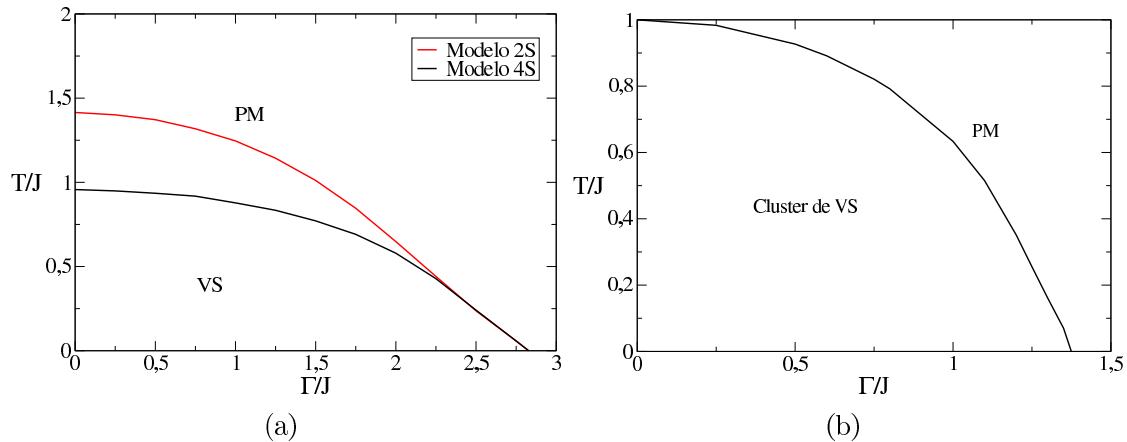


Figura 5.9: (a) Diagramas de fase temperatura versus campo transverso para os modelos 2S e 4S para  $n_s = 1$ . (b) Diagramas de fase temperatura versus campo transverso para o modelo 2S para  $n_s = 3$ ,  $J_o = 1$ .

Na figura (5.10(a)), em comparação com a figura (5.10(b)), nota-se que aumentando o número de sítios no cluster (de  $n_s = 3$  para  $n_s = 6$ ), para os respectivos valores de interações intracluster, a fase cluster de vidro de spin aumenta, ou seja, é preciso temperaturas e campos transversos maiores para destruir a fase cluster de VS.

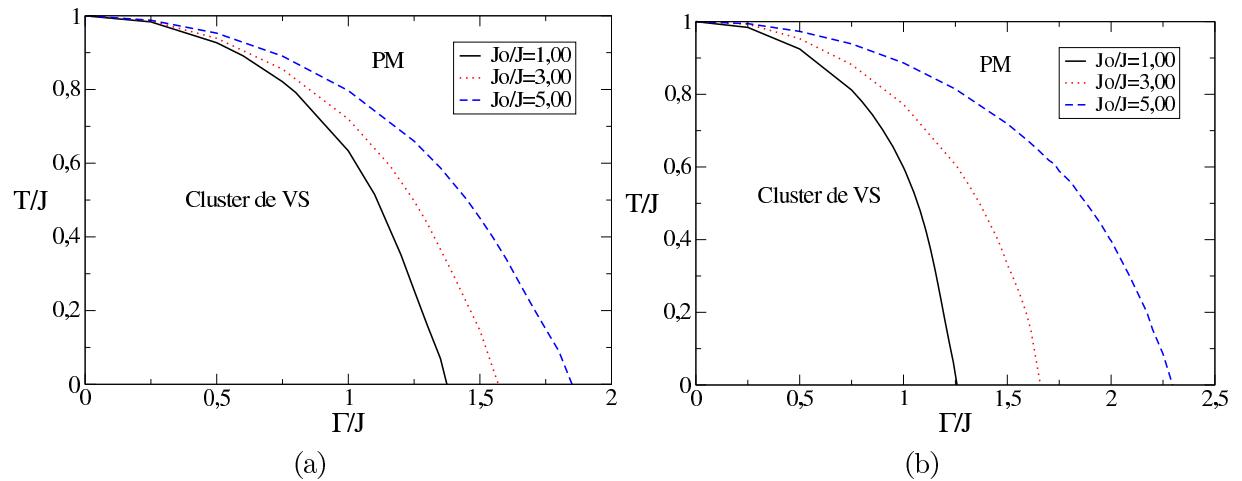


Figura 5.10: (a) Diagramas de fase temperatura versus campo transverso para  $n_s = 3$ , distintos valores de  $J_o$  e para o modelo 2S. (b) Diagramas de fase temperatura por campo transverso para  $n_s = 6$ , com  $J_o$  variável para o modelo 2S.

# Capítulo 6

## Conclusão

Nesse trabalho, considerou-se um modelo teórico de cluster de vidro de spin fermiônico em um campo magnético transverso  $\Gamma$ , cujos operadores de spin são escritos em segunda quantização em termos de combinações bilineares de operadores fermiônicos [24]. Esse modelo na presença de um  $\Gamma$  é um problema quântico devido à não-comutatividade dos operadores de spin e, portanto, necessita de ferramentas da mecânica quântica em seu tratamento. O modelo considera interações aleatórias de alcance infinito entre momentos magnéticos de clusters distintos (interação intercluster), que seguem uma distribuição de probabilidades Gaussiana semelhante a do modelo SK. Além disso, são consideradas interações ferromagnéticas  $J_o$  entre spins do mesmo cluster (interações intracluster). O método das réplicas com aproximação de simetria de réplicas [15], bem como a aproximação estática [11] são empregados para o tratamento das interações interclusters do problema de cluster de VS fermiônico em presença de um campo transverso. O modelo efetivo resultante desse tratamento é então resolvido numericamente por meio de técnicas de diagonalização exata. No presente trabalho, são analisados os resultados para o parâmetro de ordem VS ( $q$ ), a autocorrelação do momento magnético total do cluster ( $r$ ), a susceptibilidade linear ( $\chi$ ), o calor específico ( $C_v$ ) e diagramas de fase  $T$  versus  $\Gamma$  para diferentes intensidades de interações intracluster  $J_o$ , tamanhos de cluster  $n_s$  e campos transversos.

O comportamento do parâmetro de ordem  $q$  foi investigado para diferentes tamanhos de clusters com uma dada interação intracluster fixa (figura 5.1), e para diferentes intensidades de interações intraclusters com um definido tamanho de cluster (figura 5.2). Esse parâmetro foi investigado sem a presença de um campo transverso e em sua presença. Para o parâmetro de ordem VS, obteve-se os seguintes resultados:  $q$  é nulo para temper-

aturas acima de  $T_f$  (temperatura de congelamento dos momentos magnéticos dos clusters) e deixa de ser nulo na temperatura de transição e abaixo dela, para todos os casos estudados. A transição entre a fase paramagnética, a altas temperaturas, e a fase cluster de VS pode ser identificada através desse parâmetro. Para  $q = 0$  tem-se a fase paramagnética e para  $q \neq 0$ , a fase cluster de VS. Na presença de um campo transverso, observa-se que a temperatura de transição  $T_f$  diminui em relação ao caso onde  $\Gamma = 0$ . A autocorrelação de momento magnético total do cluster  $r$ , foi investigada para os mesmos casos citados acima (diferentes  $J_o$ ,  $n_s$  e  $\Gamma$ ). Essa correlação é sempre igual a 1 para  $n_s = 1$  e  $\Gamma = 0$ , ou seja, quando não há formação de clusters e nem a presença de campo transverso. Entretanto, para um cluster de tamanho qualquer ( $n_s = 3$  ou  $n_s = 6$ , por exemplo, ver figura (5.1(a))), e também quando há um campo transverso aplicado (ver figura 5.1(b)), esse comportamento é alterado e  $r$  passa a depender da temperatura. Isso porque, quando há mais de um sítio no cluster e/ou quando  $\Gamma > 0$ , a correlação  $r$  pode assumir outros valores além de 1. Para um dado tamanho de cluster e variando-se a interação ferromagnética intracluster observa-se que, à medida que essa interação aumenta,  $r$  também aumenta. Isso ocorre, pois, quando a interação intracluster é aumentada, a orientação ferromagnética entre os spins dentro do cluster é fortalecida, tornando o cluster mais coeso.

Nas curvas da susceptibilidade linear obteve-se um pico bem característico na temperatura de transição para todos os casos investigados, isto é, para diferentes  $J_o$ ,  $n_s$  e para  $\Gamma = 0$  e  $\Gamma \neq 0$ . Mantendo uma dada interação ferromagnética intracluster constante e variando o tamanho do cluster, o comportamento da susceptibilidade linear não é alterado, e a curva de  $\chi$  apresenta um pico bem marcado em  $T_f$ . Do mesmo modo, se o tamanho do cluster é mantido fixo e  $J_o$  é variado, o mesmo comportamento ainda é observado: pico característico na temperatura de transição. Esse comportamento é mantido tanto na presença de um  $\Gamma$  quanto em sua ausência. Esses resultados concordam com o comportamento esperado para a susceptibilidade magnética de um sistema físico de VS, onde ocorre um pico bem característico em  $T_f$  [2, 17].

Para um cluster de tamanho pequeno ( $n_s = 3$ ), a curva do calor específico pode apresentar um máximo arredondado a uma temperatura  $T_o$ , acima de  $T_f$ , e uma pequena descontinuidade na temperatura de transição. Entretanto, para tamanhos de clusters maiores ( $n_s = 6$  e  $n_s = 9$ , por exemplo, ver figura (5.6)), o gráfico do calor específico pode

apresentar um máximo arredondado a uma temperatura  $T_o$  e nenhuma marca em  $T_f$ , onde  $T_o \sim 1.2 - 1.4 T_f$ , como esperado para um sistema físico de VS. Para um cluster de tamanho fixo e variando a interação ferromagnética intracluster  $J_o$ , observa-se que para  $J_o$  pequenos, a curva de  $C_v$  apresenta um máximo abaixo de  $T_f$  (comportamento contrário ao esperado para um sistema físico de VS). Aumentando  $J_o$ , o máximo em  $C_v$  desloca-se para temperaturas acima de  $T_f$  e aumentando ainda mais a interação ferromagnética intracluster observa-se dois máximos em  $C_v$ : um máximo arredondado em  $T_o$  e uma descontinuidade em  $T_f$ . Assim, nota-se que o comportamento de  $C_v$  depende da interação  $J_o$  e do tamanho do cluster. Na presença de um  $\Gamma$ , o máximo arredondado em  $T_o$  desloca-se para a direita e a temperatura  $T_f$  para a esquerda. Dessa forma, a presença de um campo transverso aumenta a distância entre as temperaturas  $T_o$  e  $T_f$ . Isso significa que a presença de efeitos quânticos desloca o máximo no calor específico para temperaturas acima de  $1.2 - 1.4 T_f$ .

Através do modelo proposto, foram obtidos diagramas de fase de temperatura por campo transverso, os quais investigam as transições de segunda ordem entre a fase paramagnética e a fase cluster de VS. Esses diagramas mostram que diminuindo a temperatura a partir de uma fase paramagnética, encontra-se uma fase cluster de VS, para temperaturas e campos transversos baixos. Aumentando o campo transverso, as temperaturas nas quais ocorrem a transição para a fase cluster de VS tornam-se menores. Para valores de campo transverso ainda maiores, a fase cluster de VS deixa de existir. Isso quer dizer que a linha de transição  $T_f$  decresce para um ponto crítico quântico quando  $\Gamma$  aumenta. Aumentando o tamanho do cluster, a temperatura de transição é aumentada e, é necessário um campo transverso maior para destruir a fase cluster de VS. Aumentando a interação intracluster  $J_o$ , observa-se, pelos diagramas de fase, que a fase cluster de VS também aumenta. Portanto, são necessárias temperaturas e  $\Gamma$  maiores para destruir a fase cluster de VS.

Assim, conclui-se que o modelo de cluster de VS fermiônico em presença de um campo transverso consegue melhorar os resultados termodinâmicos do problema. Em outras palavras, o modelo melhora os resultados de  $C_v$  e mantém o comportamento da susceptibilidade linear em relação ao modelo de VS de Ising em um campo transverso sem cluster. Essas melhorias se devem à presença da interação de curto alcance  $J_o$  e ao tamanho dos

clusters  $n_s$ . O comportamento dos diagramas de fase mostram que a linha crítica que separa as fases paramagnética e a fase cluster de VS converge para um ponto crítico quântico. Além disso, os efeitos quânticos introduzidos pelo  $\Gamma$  deslocam o máximo em  $T_o$  na curva de  $C_v$  para temperaturas maiores e a temperatura de transição  $T_f$  para temperaturas menores. Esse resultado sugere que o comportamento observado na curva do calor específico para o sistema físico de  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ , para pequenas concentrações, onde  $T_o$  está muito acima de  $T_f$  [31, 32], pode ser devido à presença de efeitos quânticos.

Como trabalho futuro, é possível englobar outros efeitos no sistema de cluster de VS fermiônico, como efeito Kondo [9]. É possível investigar também o mesmo modelo, porém considerando interações intracluster antiferromagnéticas [18]. A estabilidade da fase cluster de VS [37] também poderia ser investigada em um trabalho futuro. Outro ponto para um trabalho futuro, caso a fase cluster de VS seja instável, seria usar passos de quebra de simetria de réplicas para restabelecer a estabilidade da fase cluster de VS [38]. Além disso, teorias que vão além da aproximação estática [45], poderiam ser utilizadas para estudos futuros do modelo quântico de cluster de VS fermiônico.

## Apêndice A

# Integrais de Caminho Fermiônicas

Neste apêndice, é apresentado o formalismo das integrais de caminho fermiônicas, utilizado ao longo da dissertação, com base na referência [27].

Antes de introduzir de fato as integrais de caminho fermiônicas deve-se definir os estados coerentes. Estados coerentes são autoestados dos operadores de destruição. Devido às propriedades de anticomutação dos operadores de destruição, é conveniente utilizar números que também possuam essas propriedades de anticomutação, ou seja, números que anticomutam. Esses números são chamados de variáveis de Grassmann, que podem ser relacionadas aos operadores de criação e destruição da forma:

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

onde  $c_\alpha^\dagger$  e  $c_\alpha$  são operadores de criação e destruição, respectivamente, e  $\phi_\alpha^*$  e  $\phi_\alpha$  são geradores da álgebra de Grassmann associadas aos operadores de criação e destruição, respectivamente. Conhecendo as variáveis de Grassmann, é possível definir o espaço generalizado de Fock como o conjunto de combinações lineares dos estados do espaço de Fock com coeficientes na álgebra de Grassmann. Qualquer vetor de estado no espaço generalizado de Fock pode ser expandido da forma:

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

onde  $\chi_\alpha$  são variáveis de Grassmann e  $|\phi\rangle$  vetores do espaço de Fock. A relação de clausura para os estados coerentes é dada por

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

onde  $\phi_\alpha^*$  e  $\phi_\alpha$  são variáveis de Grassmann e  $|\phi\rangle$  e  $\langle\phi|$  são estados coerentes. Essa relação permite escrever qualquer vetor do espaço generalizado de Fock em termos dos estados coerentes.

Para um entendimento melhor das integrais de caminho fermiônicas, é necessário introduzir o operador ordenamento temporal. Considere um sistema que em um tempo inicial  $t_i$  está em um autoestado  $|\Psi_\alpha(t_i)\rangle$  do Hamiltoniano  $\hat{H}$ . Sendo assim, o Hamiltoniano está sujeito a um campo externo dependente do tempo

$$\hat{H}_U(t) = \hat{H} + U(t)\hat{O}_1 , \quad (\text{A.4})$$

onde o campo está ligado ao sistema através de um operador  $\hat{O}_1$  e os estados e operadores estão na representação de Shrödinger. Uma representação conveniente para o operador evolução temporal é o ordenamento temporal do exponencial. O ordenamento temporal do produto de um conjunto de operadores de criação e destruição dependentes do tempo, denotados por  $\{O_\alpha\}$ , é definido

$$T[O_{\alpha_1}(t_1)O_{\alpha_2}(t_2)...O_{\alpha_n}(t_n)] = \varsigma^P O_{\alpha p_1}(t_{p_1})O_{\alpha p_2}(t_{p_2})...O_{\alpha p_n}(t_{p_n}) , \quad (\text{A.5})$$

onde  $\varsigma$  é  $-1$  ou  $1$  para Férmions ou Bósons respectivamente e  $P$  é a permutação de  $1, 2, \dots, n$  que ordena o tempo cronologicamente

$$t_{p_1} > t_{p_2} > \dots > t_{p_n} , \quad (\text{A.6})$$

e que ordena os operadores de criação à esquerda dos operadores de destruição (ordem normal). O ordenamento temporal da exponencial é definido por

$$T e^{-\int_{t_a}^{t_b} dt A(t)} = \lim_{M \rightarrow \infty} e^{-\varepsilon A(t_M)} e^{-\varepsilon A(t_{M-1})} \dots e^{-\varepsilon A(t_1)} e^{-\varepsilon A(t_0)} , \quad (\text{A.7})$$

onde  $\varepsilon = \frac{t_b - t_a}{M}$  e  $t_n = t_a + n\varepsilon$ . Usando o ordenamento temporal do exponencial, o operador evolução temporal pode ser escrito como

$$\hat{U}(t, t_i) = T e^{-i \int_{t_i}^t \hat{H}_U(t') dt'} . \quad (\text{A.8})$$

O desenvolvimento feito até aqui será útil para escrever a função de partição para um sistema de muitos corpos em termos dos estados coerentes. A função de partição para um sistema de muitos corpos é definida como

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} , \quad (\text{A.9})$$

onde  $\hat{H} = \hat{H}(c_\alpha^\dagger, c_\alpha)$  é um Hamiltoniano escrito em segunda quantização,  $\mu$  é o potencial químico,  $\beta$  o inverso da temperatura e  $\hat{N}$  é o operador número, que faz a contagem de partículas,  $\hat{N} = \sum_\alpha c_\alpha^\dagger c_\alpha$ . O traço pode ser escrito com estados coerentes fermiônicos da forma

$$Tr \hat{A} = \sum_n \langle n | \hat{A} | n \rangle , \quad (A.10)$$

onde  $\{|n\rangle\}$  é um conjunto de estados no espaço de Fock. Introduzindo a relação de clausura (A.3) antes do operador  $\hat{A}$  na equação (A.10), encontra-se:

$$\begin{aligned} Tr \hat{A} &= \sum_n \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \langle n | \phi \rangle \langle \phi | \hat{A} | n \rangle \\ &= \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \langle -\phi | \hat{A} \sum_n |n\rangle \langle n | \phi \rangle \\ &= \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \langle -\phi | \hat{A} | \phi \rangle , \end{aligned} \quad (A.11)$$

onde  $\phi_\alpha^*$  e  $\phi_\alpha$  são variáveis de Grassmann e  $|\phi\rangle$  e  $\langle\phi|$  são estados coerentes. Logo, a função de partição (A.9), pode ser escrita em termos dos estados coerentes da forma

$$Z = \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \langle -\phi | e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} | \phi \rangle . \quad (A.12)$$

O Hamiltoniano também deve estar escrito em termos das variáveis de Grassmann. Para isso, deve-se introduzir o conceito de um operador  $\hat{O}(c^\dagger, c)$  em ordem normal, com os operadores de criação à esquerda dos operadores de destruição. A notação de um operador em ordem normal é  $:\hat{O}(c^\dagger, c):$ . Supondo  $\hat{H}(c^\dagger, c)$  em ordem normal e expandindo a exponencial desse operador, tem-se

$$\begin{aligned} e^{[\varepsilon \hat{H}(c^\dagger, c)]} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[\varepsilon \hat{H}(c^\dagger, c)]^n}{n!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varepsilon^n : [\hat{H}(c^\dagger, c)]^n :}{n!} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\varepsilon^n [\hat{H}(c^\dagger, c)]^n}{n!} - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\varepsilon^n : [\hat{H}(c^\dagger, c)]^n :}{n!} \\ &= :e^{[\varepsilon \hat{H}(c^\dagger, c)]}:+ \varepsilon^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varepsilon^n}{(n+2)!} \left\{ [\hat{H}(c^\dagger, c)]^{n+2} - :[\hat{H}(c^\dagger, c)]^n : \right\} . \end{aligned} \quad (A.13)$$

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

$$\langle \phi | e^{\varepsilon \hat{H}(c^\dagger, c)} | \phi' \rangle = \langle \phi | \left[ :e^{\varepsilon \hat{H}(c^\dagger, c)}:+ O(\varepsilon^2) \right] | \phi' \rangle , \quad (A.14)$$

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

$$\langle \phi | \hat{A}(c^\dagger, c) | \phi' \rangle = e^{\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \hat{A}(\phi_\alpha^*, \phi'_\alpha), \quad (\text{A.15})$$

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

$$\langle \phi | e^{\varepsilon \hat{H}(c^\dagger, c)} | \phi' \rangle = e^{\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} e^{\sum_\alpha \varepsilon H(\phi_\alpha^*, \phi'_\alpha)} + O(\varepsilon^2), \quad (\text{A.16})$$

onde o Hamiltoniano agora é escrito em termos de variáveis de Grassmann e é assumida uma aproximação da ordem de  $\varepsilon^2$ .

Os elementos de matriz do operador evolução temporal na base dos estados coerentes fermiônicos são representados por

$$U(\phi_\alpha^* t_f; \phi_\alpha t_i) = \langle \phi_\alpha t_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(c^\dagger, c)(t_f - t_i)} | \phi_\alpha t_i \rangle. \quad (\text{A.17})$$

comparando essa expressão com o último termo da equação (A.12) e impondo as condições de contorno antiperiódicas,  $\phi_\alpha t_i = \phi_\alpha$  e  $\phi_\alpha^* t_f = -\phi_\alpha^*$ , é possível identificar  $\beta$  como um tempo imaginário:  $\beta = \frac{i(t_f - t_i)}{\hbar}$ . Considerando  $it = \tau$  e assumindo unidades de  $\hbar = 1$ ,  $\beta = \tau_f - \tau_i$ , e a função de partição pode ser escrita

$$Z = \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \langle -\phi | e^{-(\tau_f - \tau_i)(\hat{H} - \mu \hat{N})} | \phi \rangle. \quad (\text{A.18})$$

O intervalo de tempo imaginário  $\beta$  pode ser dividido em  $M$  fatias iguais de tempo de largura  $\varepsilon$ , ou seja,

$$\varepsilon = \frac{\tau_f - \tau_i}{M}. \quad (\text{A.19})$$

Assumindo  $\tau_i = 0$ , o que implica  $\tau_f = M\varepsilon$ , a função de partição pode ser representada por

$$Z = \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \langle -\phi | \left( \exp [-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})] \right)^M | \phi \rangle. \quad (\text{A.20})$$

Assumindo  $M$  grande e introduzindo  $M - 1$  vezes o operador unitário (equação (A.3)), pode-se separar cada etapa da evolução do tempo imaginário, estabelecendo índices  $k$  ( $k = 1, 2, \dots, M - 1$ ) que especificam a ordem cronológica. Assim, a função de partição fica

$$\begin{aligned} Z = & \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_\alpha d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha e^{-\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha} \int \prod_{k=1}^{M-1} \prod_\alpha d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} e^{-\sum_{k=1}^{M-1} \sum_\alpha \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k}} \\ & \times \langle -\phi | \exp [-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})] | \phi_{M-1} \rangle \langle \phi_{M-1} | \dots \\ & \times \dots | \phi_1 \rangle \langle \phi_1 | \exp [-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})] | \phi \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Admitindo condições de contorno antiperiódicas,  $\phi_{\alpha,0} = \phi_\alpha$  e  $\phi_{\alpha,M}^* = -\phi_\alpha^*$ , e definindo  $\phi_\alpha \equiv -\phi_{\alpha,M}$ , a expressão anterior assume a forma

$$\begin{aligned} Z &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} e^{-\sum_{k=1}^M \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k}} \\ &\quad \times \langle -\phi | \exp [-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})] | \phi_{M-1} \rangle \prod_{k=2}^{M-1} \langle \phi_k | \exp [-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})] | \phi_{k-1} \rangle \\ &\quad \times \langle \phi_1 | \exp [-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})] | \phi \rangle . \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Devido à não-comutatividade dos operadores de criação e destruição na equação acima, não é possível calcular os elementos de matriz diretamente. Para isso, supondo que  $\hat{H}(c^\dagger, c)$  está em ordem normal, utiliza-se o resultado encontrado na equação (A.16) e encontra-se

$$\begin{aligned} Z &\approx \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} e^{-\sum_{k=1}^M \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k}} \\ &\quad \times \langle -\phi | : \exp [-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})] : | \phi_{M-1} \rangle \exp \left\{ \sum_{k=2}^{M-1} \sum_{\alpha} [\phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1} \right. \\ &\quad \left. - \varepsilon(H(\phi_{\alpha,k}^*; \phi_{\alpha,k-1}) - \mu \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1})] \right\} \\ &\quad \times \langle \phi_1 | : \exp [-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})] : +O(\varepsilon^2) | \phi \rangle . \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

Usando as condições de contorno antiperiódicas e a definição  $\phi_\alpha \equiv -\phi_{\alpha,M}$ , pode-se escrever a equação (A.23) como

$$\begin{aligned} Z &\approx \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k} \\ &\quad \times \exp \left\{ \varepsilon \sum_{k=1}^M \sum_{\alpha} \left[ \phi_{\alpha,k}^* \left( \frac{\phi_{\alpha,k} - \phi_{\alpha,k-1}}{\varepsilon} - \mu \phi_{\alpha,k-1} \right) + H(\phi_{\alpha,k}^*; \phi_{\alpha,k-1}) \right] \right\} , \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

onde termos de ordem de  $\varepsilon^2$  são desprezados. Dessa forma, a função de partição está escrita em termos de variáveis de Grassmann. A expressão (A.24) pode ser escrita em uma notação de trajetória, onde associa-se  $\phi_\alpha^*(\tau)$  e  $\phi_\alpha(\tau)$  com variáveis deslocadas por um passo  $\phi_{\alpha,k}^*$  e  $\phi_{\alpha,k-1}$ , respectivamente. Isso permite substituir  $H(\phi_{\alpha,k}^*; \phi_{\alpha,k-1})$  por  $H(\phi_\alpha^*(\tau); \phi_\alpha(\tau))$ . No limite  $M \rightarrow \infty$ , o somatório em  $k$  pode ser substituído por uma integral em  $\tau$ , com  $\frac{\phi_{\alpha,k} - \phi_{\alpha,k-1}}{\varepsilon} = \frac{\phi_\alpha(\tau) - \phi_\alpha(\tau - \varepsilon)}{\varepsilon}$  sendo identificada como  $\frac{\partial}{\partial \tau} \phi(\tau)$ . Assim, a

expressão (A.24) fica

$$\begin{aligned} Z &= \int_{\phi_\alpha(\beta)=\phi_\alpha(0)} D(\phi_\alpha^*(\tau)\phi_\alpha(\tau)) \\ &\times \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \left( \sum_\alpha \phi_\alpha^*(\tau) \left( \frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) \phi_\alpha(\tau) + H(\phi_\alpha^*(\tau), \phi_\alpha(\tau)) \right) \right\} , \quad (\text{A.25}) \end{aligned}$$

onde usou-se a notação

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

O formalismo das integrais de caminho fermiônicas possibilita o cálculo da função de partição para modelos fermiônicos, tais como os descritos na seção (3.2) e no capítulo (4).

# Referências Bibliográficas

- [1] Mydosh; J. A., *Disordered magnetism and spin glasses*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, volume 157-158, p. 606-610, maio 1996.
- [2] Binder; K., Young; A. P., *Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions.*, Rev. Mod. Phys., v. 58, n. 4, p. 801-976, out. 1986.
- [3] Dotsenko; V., *An introduction to the Theory of Spin Glasses and Neural Networks*, World Scientific, 1994.
- [4] Dagotto; E., *Complexity in Strongly Correlated Electronic Systems*, Science AAAS, v. 309, p. 257, julho de 2005.
- [5] Marcano; N., Gómez Sal; J. C., De Teresa; J. M., Algarabel; P. A., Paulsen; C., Iglesias; J. R., *Mesoscopic Magnetic States in Metallic Alloys with Strong Electronic Correlations: A Percolative Scenario for  $CeNi_{1-x}Cu_x$* , Physical Review Letters, PRL 98, 166406, abril 2007.
- [6] Marcano; N., *Inhomogeneidades Intrínsecas en el Sistema de Electrones Fuertemente Correlacionados:  $CeNi_{1-x}Cu_x$* , Tese de Doutoramento Universidad de Cantabria, dez. 2004.
- [7] Qu; Z., Spinu; L., Yuan; H., Dobrosavljevic; V., Bao; W., Lynn; J. W., Nicklas; M., Peng; J., Liu; T., Fobes; D., Flesch; E., Mao; Z. Q., *Unusual heavy-mass nearly ferromagnetic state with a surprisingly large Wilson ratio in the double layered ruthenates  $(Sr_{1-x}Ca)Ru_2O_7$* , Physical Review B, v. 78, n. 180407 p. 1-4, Nov. 2008.
- [8] Westerkamp; T., Deppe; M., Küchler; R., Brando; M., Geibel; C., Gegenwart; P., Pikul; A. P., Steglich; F., *Kondo-Cluster-Glass State near a Ferromagnetic Quantum Phase Transition*, Physical Review Letters, PRL 102, 206404, maio de 2009.

- [9] Zimmer; F. M., Magalhães; S. G., Coqblin; B., *A theoretical study of the cluster glass-Kondo-magnetic disordered alloys*, Physica B, v. 404, p. 2972-2974, 2009.
- [10] Coqblin; B., Núñez-Regueiro; M. D., Theumann; A., Iglesias; J. R., Magalhães; S. G., *Theory of the Kondo lattice: competition between Kondo effect and magnetic order*, Phylosophical Magazine, v. 86, p.2567-2580, jun. 2006.
- [11] Bray; A. J., Moore; M. A., *Replica theory of quantum spin glasses*, Journal of Physics C: Solid State Physics, v. 13, n. 60, p. L655-L660, jul. 1980.
- [12] Sachdev; S., *Quantum Phase Transitions*, Cambridge University Press, 1999.
- [13] Wu; W., Ellman; B., Rosenbaum; T. F., *From Classical to Quantum Glass*, Physical Review Letters, v. 67, n. 15, p. 2076-2079, out. 1991.
- [14] Wu; W., Pitko; D., Rosenbaum; T. F., *Quenching of the nonlinear susceptibility at a  $T=0$  spin glass transition*, Physical Review Letters, v. 71, n. 12, p. 1919-1922, set. 1993.
- [15] Sherrington; D., Kirkpatrick; S., *Infinite-ranged models of spin-glasses*, Physical Review B, v. 17, n. 11, p. 4384-4403, jun. 1978.
- [16] Edwards; S. F., Anderson; P. W., *Theory of Spin Glasses*, Journal of Physics F, v. 5, n. 5, p. 965-974, 1975.
- [17] Fischer; K. H., Hertz; J. A., *Spin glasses*, Cambridge, 1991.
- [18] Soukoulis; C. M., Levin; K., *Cluster mean-field model of the spin glasses: static properties*, Physical Review B, v. 18, n. 3, p. 1439-1445, ago. 1978.
- [19] Soukoulis; C. M., *Thermodynac properties of concentrated spin glasses: A cluster mean-field theory*, Physical Review B, v. 18, n. 7, p. 3757-3759, out. 1978.
- [20] Kim; D. H., Kim; J. J., *Infinite-range Ising spin glass with a transverse field under the static approximation*, Physical Review B, v. 66, n. 5, p. 054432, ago. 2002.
- [21] Theumann; A., Schmidt; A. A., Magalhães; S. G., *The Ising spin glass in a transverse field revisited. Results of two fermionic models*, Physica A, v. 311, p. 498-506, fev. 2002.

- [22] Zimmer; F. M., Magalhães; S. G., *One-step replica symmetry breaking solution for a fermionic Ising spin glass in a transverse field*, Physical Review B, v. 74, n. 1, p. 012202, jul. 2006.
- [23] Zimmer; F. M., Magalhães; S. G., *One-step replica symmetry breaking solution for a highly asymmetric two-sublattice fermionic Ising spin glass model in a transverse field*, Physical Review B, v.76, p. 014203, jul. 2007.
- [24] Theumann; A., Gusmão; M. V., *Quantum Ising spin-glass*, Physics Letters A, v. 105, n. 6, p. 311-314, out. 1984.
- [25] Theumann; A., Coqblin; B., Magalhães; S. G., Schmidt; A. A. , *Spin-glass freezing in Kondo-lattice compounds*, Phys. Rev. B, v. 63, n. 54409, jan. 2001.
- [26] Magalhães; S. G., Schmidt; A. A., *Fermionic Heisenberg model for spin glasses with BCS pairing interaction*, Phys. Rev. B, v. 62, n. 11686, maio 2000.
- [27] John W. Negele; Henri Orland, *Quantum Many-Particle Systems*, Addison-Wesley, 1988.
- [28] Ochoa; J. C. M., *Estudo das Propriedades Estruturais e Magnéticas do Sistema  $Zn_{1-x}Mn_xIn_2Se_4$* , Tese de Doutoramento Universidade de São Paulo, 2004.
- [29] Reich; D. H., Ellman; B., Yang; J., Rosenbaum; T. F., *Dipolar magnets and glasses: Neutron-scattering, dynamical, and calorimetric studies*, Physical Review B, v. 42, p. 4631, set. 1990.
- [30] Wenhao; Wu, Bitko; D., Rosenbaum; T. F., *Quenched of the Nonlinear Susceptibility at a  $T = 0$  Spin Glass Transition*, Physical Review Letters, v. 71, p. 1919, set. 1993.
- [31] Quilliam; J. A., Mugford; C. G. A., Gomez; A., Kycia; S. W., Kycia; J. B., *Specific Heat of the Dilute Ising Magnet  $LiHo_xY_{1-x}F_4$* , Physical Review Letters, v. 98, p. 037203, jan. 2007.
- [32] Quilliam; J. A., Meng; S., Mugford; C. G. A., Kycia; J. B., *Evidence of Spin Glass Dynamics in Dilute  $LiHo_xY_{1-x}F_4$* , Physical Review Letters, v. 101, p. 187204, out. 2008.

- [33] Ghosh; S., Rosenbaum; T. F., Aeppli; G, Coppersmith; S. N., *Entangled quantum state of magnetic dipoles*, Nature, v. 425, p. 48, set. 2003.
- [34] Ramirez; A. P., *Strongly Geometrically Frustrated Magnets*, Annual Reviews Mater. Sci., 1994.
- [35] Pathria; R., K., *Statistical Mechanics*, second edition, Butterworth Heinemann, 1996.
- [36] Sherrington; D., Kirkpatrick; S., *Solvable model of Spin-Glass*, Physical Review Letters, v. 35, p.1792-1795, oct. 1975.
- [37] de Almeida; J. R. L., Thouless; P. W., *Stability of the Sherrington-Kirkpatrick solution of a spin glass model*, Journal of Physics A, v. 11, p. 983-990, maio 1978.
- [38] Parisi; G., *The order parameter for spin glasses: a function on the interval 0-1*, Journal of Physics A, v. 13, n. 3, p. 1101-1112, mar. 1980.
- [39] Wiethoel; W., Sherrington; D., *The transverse Ising model: fermionic representation and functional integral approach*, Journal of Physics C: Solid State Physics, v. 19, p.6983-6991, junho de 1986.
- [40] Oppermann; R., Muller-Groeling; A., *From localized to itinerant spin glasses: Grassmann field theory and mean-field solutions*, Nuclear Physics B, v. 401, p.507-547, jan. 1993.
- [41] Popov; V. N., Fedotov; S. A., *The functional-integration method and diagram technique for spin systems*, Soviet Physics, v. 67, n. 3, p. 535-541, mar. 1988.
- [42] Sakurai; J. J., Tuan; S. F., *Modern Quantum Mechanics Revised Edition*, Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- [43] Callen; H. B., *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, 2<sup>a</sup> ed. John Wiley & Sons, 1985.
- [44] Mário José de Oliveira, *Termodinâmica*, Ed. Livraria da Física USP.
- [45] Ye; J., Sachdev; S., Read; N., *Landau theory of quantum spin glasses of rotors and Ising spins*, Phys. Rev. B, v. 52, n. 1, p. 384-410, jul. 1995.