

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Efeitos induzidos por campo aleatório bimodal e  
gaussiano nos modelos de van Hemmen clássico e  
fermiônico

TESE DE DOUTORADO

Isabela Corrêa Berger

Porto Alegre, RS, Brasil

2018

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE FÍSICA  
Programa de Pós-Graduação em Física

# Efeitos induzidos por campo aleatório bimodal e gaussiano nos modelos de van Hemmen clássico e fermiônico <sup>3</sup>

Isabela Correa Berger

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul sob orientação do Prof. Dr. Sergio Garcia Magalhaes, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutora em Física.

Porto Alegre  
Maio de 2018.

---

<sup>3</sup>Trabalho Financiado pela Comissão para o Aperfeiçoamento de Pessoal de Ensino Superior (CAPES).

## Agradecimentos

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

A Deus, por tudo que tem feito na minha vida e pelas oportunidades oferecidas;

À minha família, que é a minha base, meu orgulho. Aos meus pais, Marcos e Josana, pelo apoio e suporte em todos os momentos da minha vida. À Erika, minha filhota amada, pelo amor incondicional e, principalmente, por compreender e aceitar todas as horas de ausência.

Ao meu noivo Diogo, pela paciência, carinho e apoio durante a conclusão desta etapa tão importante;

Ao meu orientador Sergio Garcia Magalhães, pela excelente orientação, dedicação e pela oportunidade de concluir o doutorado;

Ao nosso colaborador, o professor Rubem Erichsen Jr., pela disponibilidade, discussões e contribuições ao trabalho;

Aos colegas da sala M204, pela parceria e ajuda quando precisei;

Aos membros da banca examinadora pelas contribuições à tese;

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

Um muito obrigada a todos que de alguma forma estiveram comigo nesta caminhada!

# *Sumário*

**Resumo**

**Abstract**

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	p. 8
<b>2</b>	<b>Conceitos gerais</b>	p. 12
2.1	Vidro de Spin . . . . .	p. 12
2.1.1	Conceito e caracterização experimental . . . . .	p. 12
2.1.2	Modelos teóricos que descrevem um sistema VS . . . . .	p. 17
2.2	Campo aleatório . . . . .	p. 25
2.3	Transições de fases e Pontos Multicríticos . . . . .	p. 26
2.4	Transições Inversas . . . . .	p. 29
2.4.1	Transições inversas em modelos clássicos . . . . .	p. 30
2.4.2	Transições inversas em modelos fermiônicos . . . . .	p. 32
<b>3</b>	<b>Modelo clássico de van Hemmen com anisotropia de campo cristalino</b>	p. 37
3.1	Cálculo da média configuracional sobre as variáveis $\xi$ e $\eta$ . . . . .	p. 41
3.2	Campo aleatório $h_i$ seguindo uma distribuição bimodal . . . . .	p. 42
3.3	Resultados . . . . .	p. 43
3.3.1	$J_0 \neq 0$ . . . . .	p. 45
3.3.2	$J_0 = 0$ . . . . .	p. 50

<b>4</b>	<b>Modelo de van Hemmen de Vidro de Spin de Ising Fermiônico</b>	p. 60
4.1	Cálculo da média configuracional sobre as variáveis $\xi$ e $\eta$ . . . . .	p. 63
4.2	Campo aleatório $h_i$ seguindo uma distribuição gaussiana . . . . .	p. 64
4.3	Resultados . . . . .	p. 65
<b>5</b>	<b>Considerações finais</b>	p. 74
5.1	Perspectivas . . . . .	p. 77
	<b>Apêndice A – Expansão de Landau</b>	p. 79
	<b>Apêndice B – Integrais de Caminho Fermiônicas</b>	p. 81
	<b>Referências Bibliográficas</b>	p. 87

# Resumo

Neste trabalho utilizam-se duas adaptações do modelo originalmente proposto por van Hemmen com o intuito de investigar os efeitos de um campo aleatório  $h_i$  sob as transições de fases: um modelo com spin 1 estudado na versão clássica e um modelo na formulação fermiônica. A escolha do modelo de van Hemmen está relacionada ao fato de que não é necessário utilizar o método das réplicas para tratar a desordem. No primeiro caso, o modelo clássico conta com um campo cristalino ( $D$ ) que favorece energeticamente os estados não interagentes. As interações aleatórias  $J_{ij}$  são responsáveis por introduzir desordem e frustração ao problema. Tanto as variáveis aleatórias quanto o campo aleatório seguem uma distribuição de probabilidades bimodal. Analisando o comportamento dos parâmetros de ordem e da energia livre, diagramas de fases da temperatura pelo acoplamento ferromagnético  $J_0$  e pelo campo cristalino  $D$  para diferentes valores de  $h_i$  foram construídos. Os resultados indicam que a presença do campo aleatório tende a reduzir o ponto tricrítico das transições de fases e, para determinado valor de  $h_i$ , uma nova solução da fase vidro de spin (VS) pode ser favorecida. Além disso, para valores relativamente altos de  $h_i$ , o problema apresenta pontos multicríticos nas transições de fase. Também busca-se investigar nesse modelo se o mesmo é capaz de apresentar algum tipo de transição inversa (TI). As TI são uma classe de transições de fases altamente contraintuitivas, em que uma fase usualmente ordenada tem entropia maior que uma fase desordenada. Elas se manifestam nos diagramas de fases através de uma reentrância da fase desordenada-ordenada-desordenada conforme a temperatura diminui. Embora o modelo apresente diversos pontos tricríticos na transição PM/VS, nenhum tipo de transição reentrante foi observada, não havendo, portanto, nenhuma evidência de transição inversa no sistema. Já o modelo analisado na formulação fermiônica conta com um potencial químico ( $\mu$ ), que controla a diluição magnética relacionada ao favorecimento dos sítios duplamente ocupados ou vazios, e com um campo magnético transversal  $\Gamma$ , que introduz flutuações quânticas ao problema. Nesse caso, as interações de spin  $J_{ij}$  e o campo aleatório seguem uma distribuição gaussiana. A introdução do campo  $h_i$ , a nível de campo médio, permite investigar as TI sob os efeitos de uma desordem que não é uma fonte de frustração. Os resultados mostram uma transição reentrante da fase VS para a fase paramagnética (PM) na ausência de  $\Gamma$  e  $h_i$ . A reentrância aparece para um certo intervalo de  $\mu$ , em que se encontra uma fase PM a baixas temperaturas com menor entropia do que a fase VS, caracterizando a transição do tipo congelamento inverso (CI). No entanto o CI é gradualmente suprimido quando os efeitos  $h_i$  são intensificados. Além disso, o CI é completamente destruído pelas flutuações quânticas provenientes do  $\Gamma$ . Dessa forma, a desordem combinada com a diluição pode apresentar um cenário favorável à ocorrência de CI, enquanto o campo aleatório e as flutuações quânticas agem contra este tipo de transição.

Palavras-chave: Desordem. Vidro de Spin. Campo aleatório. Transições inversas.

# *Abstract*

In this work, two adaptations to the original model proposed by van Hemmen are used with the aim of investigating the effects of a random field  $h_i$  under the phase transitions: a model studied in the classical version and a model in the fermionic formulation. The van Hemmen model was chosen because the disorder can be treated without the use of the replica method. In the first case, the classic model has a crystal field ( $D$ ) which energetically favors the non-interacting states. The random interactions  $J_{ij}$  are responsible for introduce disorder and frustration to the problem. Both random field and random variables follow a bimodal probability distribution. Analyzing the behavior of the order parameters and the free energy, phase diagrams of temperatura  $T$  versus the ferromagnetic coupling  $J_0$  and  $T$  versus the crystal field  $D$  for different values of  $h_i$  were build. The results indicate that the presence of the random field tends to reduce the tricritical point of the phase transitions. For a given value of  $h_i$ , a new solution of phase spin glass (SG) can be favored. In addition, for sufficiently high enough values of  $h_i$  the problem presents multicritical points in phase transitions. It is also intended to investigate if this model is able to present some kind of inverse transition (IT). IT is a class of highly nonintuitive phase transitions in that the usual ordered phase has more entropy than the disordered one. The IT manifests in the phase diagrams as a reentrance of the disordered-ordered-disordered phase according to the temperature decreases. Although the model presents several tricritical points in the transition  $PM/SG$ , no type of reentrant transition was observed. Therefore, there is no evidence of inverse transition in this model. The model analyzed in the fermionic formulation has a chemical potential ( $\mu$ ), which has the role of controlling the magnetic dilution related to favoring double-occupation or empty sites. This model also counts with a transverse magnetic field  $\Gamma$ , which introduces quantum fluctuations to the problem. In this case, the spin interactions  $J_{ij}$  and random field follow a Gaussian distribution. The introduction of the  $h_i$  allows the investigation of IT under the effects of a disorder that is not a source of frustration. The results show a reentrant transition from the SG phase to the PM phase in the absence of  $\Gamma$  and  $h_i$ . The reentrance appears for a certain range of  $\mu$ , in which there is a PM phase at low temperatures with lower entropy than the SG phase, characterizing the inverse freezing (IF) transition. However, IF is gradually suppressed when the effects  $h_i$  are intensified. Moreover, the IF is completely destroyed by quantum fluctuations from  $\Gamma$ . Thus, the disorder combined with the dilution may present the favorable scenario to the occurrence of IF, while the random field and the fluctuations quantum mechanics act against this kind of transition.

Key words: Disorder. Spin Glass. Random Field. Inverse Transitions.

# Abreviaturas

- BC ... Blume-Capel
- CI ... Congelamento Inverso
- DI ... Derretimento Inverso
- FE ... Ferromagnética
- GS ... Ghatak-Sherrington
- NM ... Não Magnética
- PCQ ... Ponto Crítico Quântico
- PM ... Paramagnética
- RF ... Random Field
- SK ... Sherrington-Kirkpatrick
- TI ... Transição Inversa
- vH ... van Hemmen
- VS ... Vidro de Spin
- VSIF ... Vidro de Spin de Ising Fermiônico

# 1 Introdução

Sistemas de spins com desordem estão entre as áreas mais fascinantes da física, devido não somente à sua relevância para o entendimento de sistemas reais, mas também porque têm dado origem a métodos teóricos que podem ser aplicados em biologia, economia, etc. Dentre esses sistemas, destacam-se os vidros de spin (VS) e os modelos com campo aleatório. Em particular, a interpolação dessas duas manifestações de desordem é um problema altamente não trivial. A maioria das investigações teóricas desses sistemas de spins foram modeladas por meio das variáveis de Ising, sendo os dois modelos mais estudados na literatura de magnetismo desordenado os modelos RFIM (do inglês, *Random Field Ising Model*) e os modelos ISG (do inglês, *Ising Spin Glass*) (FISCHER; HERTZ, 1991; BINDER; YOUNG, 1986).

Um exemplo dessa interpolação pode ser encontrado em um antiferromagneto diluído na presença de um campo aleatório uniforme, como  $Fe_xZn_{1-x}F_2$  ou  $Fe_xMg_{1-x}Cl_2$  (BELANGER, 1997). Especificamente, o sistema apresenta um comportamento para campo aleatório para  $x > 0.42$ , ou um comportamento vidro de spin, para  $x \sim 0.25$ , enquanto que, para concentrações intermediárias ( $0.25 < x < 0.42$ ), observa-se que ambos os comportamentos dependem da magnitude do campo magnético externo aplicado, sendo RFIM para pequenos campos e VS para campos maiores (BELANGER, 1997).

Recentemente, surgiram indicações que essa interpolação poderia ser encontrada também em outros compostos, como aqueles usualmente descritos em termos de modelos quânticos, como  $LiHo_xY_{1-x}F_4$  e  $CeNi_{1-x}Cu_x$ . Por exemplo, no composto  $LiHo_xY_{1-x}F_4$ , sugere-se que a aplicação de um campo uniforme transversal às variáveis de Ising (ao longo da direção  $z$ ), poderia gerar um campo aleatório e, conseqüentemente, suprimir a fase VS (SCHECHTER; STAMP, 2005; SCHECHTER; LAFLORENCIE, 2006; Tabei et al., 2006; MAGALHAES et al., 2011; MORAIS et al., 2012b).

Do ponto de vista teórico, muitos trabalhos vêm investigando as possíveis alterações na fase VS devido à presença de campos aleatórios. Na grande maioria desses trabalhos,

o estudo das interações de alcance infinito se concentra em sistemas de Ising, o chamado modelo de Sherrington-Kirkpatrick (SK). Neste modelo, a solução VS é tratada com o método das réplicas, combinada com campo aleatório seguindo diferentes tipos de desordem.

Entretanto a solução do modelo SK pelo método das réplicas pode ser muito complicada, apresentando algumas dificuldades, como por exemplo, a instabilidade na solução VS com a simetria de réplicas. Neste caso, a fase VS mostra uma quebra de ergodicidade altamente não trivial com a energia livre, exibindo uma estrutura complicada com um número infinito de vales, o que poderia dificultar bastante a escolha da solução VS correta na transição de primeira ordem PM/VS (MAGALHAES et al., 2009). Nesse sentido, outros modelos magnéticos desordenados, menos complexos, foram propostos para descrever características da fase VS. Dentre eles, destaca-se o modelo de van Hemmen (HEMMEN, 1982; HEMMEN et al., 1983), pois o mesmo é capaz de apresentar desordem, devido às interações aleatórias ferro e antiferromagnéticas, e frustração, devido à competição entre as interações. Dessa forma, pode-se assumir que o modelo de van Hemmen contém desordem e frustração, que são os ingredientes básicos para o surgimento da fase VS, no qual abaixo de uma temperatura de transição  $T_f$ , os spins estão congelados em direções completamente aleatórias. Justamente por essas razões, o modelo de van Hemmen foi escolhido como ferramenta base deste estudo.

Um dos principais objetivos do presente trabalho é analisar os efeitos do campo aleatório sobre as transições de fases no modelo de van Hemmen. É importante ressaltar que uma abordagem recente do problema VS com campo aleatório foi desenvolvida em (NOGUEIRA et al., 2007), em um modelo de spin  $1/2$  que considera um sistema de dois estados ( $S = \pm 1$ ). Com base nisso, propõe-se uma outra adaptação ao modelo de van Hemmen de spin 1, com a adição de um termo de anisotropia associado a um campo cristalino, cuja função é favorecer energeticamente os estados não interagentes ( $S = 0$ ), combinado com o campo aleatório. Ou seja, um modelo de três estados, onde a anisotropia é responsável pelo aumento do número de fases possíveis para obtenção das fases do estado fundamental. Um fato importante com relação aos possíveis efeitos do campo cristalino combinado com o campo aleatório, é que estes podem contribuir para originar pontos multicríticos nos diagramas de fases (KAUFMAN; KANNER, 1990).

Uma outra abordagem do modelo de van Hemmen foi desenvolvida estudando-o dentro de uma formulação fermiônica (ZIMMER et al., 2012; BERGER, 2012), que trata de modelos que permitem quatro autoestados por sítio: dois magnéticos e dois não magné-

ticos. No entanto na formulação fermiônica, o modelo VS de van Hemmen apresentou, sob certas condições, uma transição inversa (TI), que se manifesta como uma reentrância no diagrama de fases, quando ocorre uma sequência de transições de fases desordenada-ordenada-desordenada, ao se reduzir a temperatura.

As TI podem ser observadas através da entropia de um sistema, pois nesses casos, a entropia da fase ordenada é maior que a da fase desordenada (SCHUPPER; SHNERB, 2004, 2005; CRISANTI; LEUZZI, 2005). Portanto há uma inversão no conteúdo entrópico entre as fases envolvidas no sistema, afirmando a característica não trivial desse tipo de transição, pois a inversão entrópica não ocorre em transições de fases usuais.

O Congelamento Inverso (CI) e o Derretimento Inverso (DI) pertencem a essa classe de transições não usuais, ocorrendo, respectivamente, na transição entre uma fase líquida e uma fase tipo vidro (CI), e entre uma fase líquida e uma estrutura cristalina (DI) sob aumento da temperatura (SCHUPPER; SHNERB, 2004, 2005; CRISANTI; LEUZZI, 2005). Embora contraintuitivo, o fenômeno das transições inversas tem sido encontrado em diversos sistemas físicos reais conhecidos, como por exemplo, cristais líquidos (CLADIS et al., 1977, 1981), filmes finos magnéticos (PORTMANN et al., 2001), supercondutores de altas temperaturas (AVRAHAM et al., 2001) e isótopos de Hélio  $He^3$  e  $He^4$  (SCHUPPER; SHNERB, 2005).

Nesse sentido, o que se propõe agora é justamente investigar as transições inversas que podem ocorrer entre as fases PM e VS, ou seja, transições do tipo congelamento inverso, considerando os efeitos de um campo aleatório, na presença de campos cristalino e transverso. Por isso, serão estudados dois modelos neste trabalho: i) um modelo VS clássico, que conta a anisotropia de um campo cristalino; e ii) um modelo VS fermiônico, que conta com um potencial químico, responsável por controlar a diluição magnética relacionada ao favorecimento dos sítios duplamente ocupados ou vazios, e um campo magnético, que introduz flutuações quânticas ao problema.

No ensemble grande canônico, pode-se fazer uma ligação entre os modelos clássico e fermiônico através do mapeamento entre o campo cristalino e o potencial químico, respectivamente (FELDMANN; OPPERMANN, 1999). O potencial químico é introduzido para controlar a ocupação média de férmions por sítio, que pode, conseqüentemente, favorecer sítios não magnéticos. Dessa forma, tanto o potencial químico quanto o campo cristalino favorecem energeticamente os estados não interagentes, o que poderia favorecer a fase paramagnética em baixas temperaturas e, conseqüentemente, induzir uma TI.

Assumindo que as interações desordenadas que geram frustração sejam ingredientes

essenciais para o surgimento de congelamento inverso num sistema VS de van Hemmen, então busca-se descobrir se o tipo de desordem proveniente do campo aleatório reforça tal tipo de comportamento.

Os modelos aqui estudados contam com três termos de desordem: dois dados pelas variáveis aleatórias  $\xi_i$  e  $\eta_i$  das interações desordenadas de van Hemmen ( $J_{ij} = J/N[\xi_i\eta_j + \xi_j\eta_i]$ ), e outro proveniente do campo aleatório  $h_i$ . No modelo clássico, a média sobre a desordem será feita seguindo uma distribuição bimodal, enquanto que, no modelo fermiônico, utilizar-se-á a distribuição gaussiana. A escolha das distribuições de probabilidade foi feita de acordo com testes e resultados previamente obtidos para ambos os casos. Devido à relevância entre eles, foi definido que o modelo VS clássico estaria sujeito a uma distribuição discreta, enquanto que o modelo fermiônico, a uma distribuição contínua.

O trabalho está estruturado como segue: No capítulo 1, é feita uma introdução ao trabalho desenvolvido. O capítulo 2 está destinado aos conceitos gerais, englobando a caracterização da fase vidro de spin, com alguns exemplos de modelos magnéticos usados para descrevê-la, bem como uma breve apresentação sobre campos aleatórios, transições de fase e pontos multicríticos e transições inversas. Nesse último, também serão apresentados modelos teóricos capazes de apresentar esse tipo de comportamento não usual. A versão clássica do modelo proposto será discutida no capítulo 3, que traz, além da apresentação do modelo, os cálculos analíticos realizados e os resultados obtidos. O capítulo 4 se refere à versão fermiônica do modelo proposto, trazendo os cálculos realizados para obtenção dos parâmetros de ordem e os respectivos resultados. No capítulo 5, as considerações finais.

## 2 *Conceitos gerais*

Neste capítulo, são descritas algumas das principais características encontradas em sistemas vidro de spin, observadas em alguns modelos teóricos usados para descrever tal fase. Também será feita uma breve introdução ao problema do campo aleatório e as transições de fases e os pontos multicríticos. Além disso, serão abordadas as características das transições inversas e alguns modelos teóricos que apresentam tal comportamento.

### 2.1 Vidro de Spin

#### 2.1.1 Conceito e caracterização experimental

Vidro de Spin é uma fase magnética caracterizada pelo congelamento aleatório dos spins abaixo de uma temperatura de transição  $T_f$  (do inglês, *Freezing Temperature*) (MY-DOSH, 1996). A palavra congelada, associada à fase VS, indica momentos magnéticos locais não nulos, ou seja,  $m_i = \langle S_i \rangle \neq 0$ , em que  $\langle \dots \rangle$  representa uma média térmica. Porém, a magnetização total  $M = N^{-1} \sum_i m_i$  sobre todos os sítios deve ser nula (FISCHER; HERTZ, 1991). A aleatoriedade das interações magnéticas resulta em dois ingredientes básicos para o surgimento da fase VS, que são a desordem e a frustração.

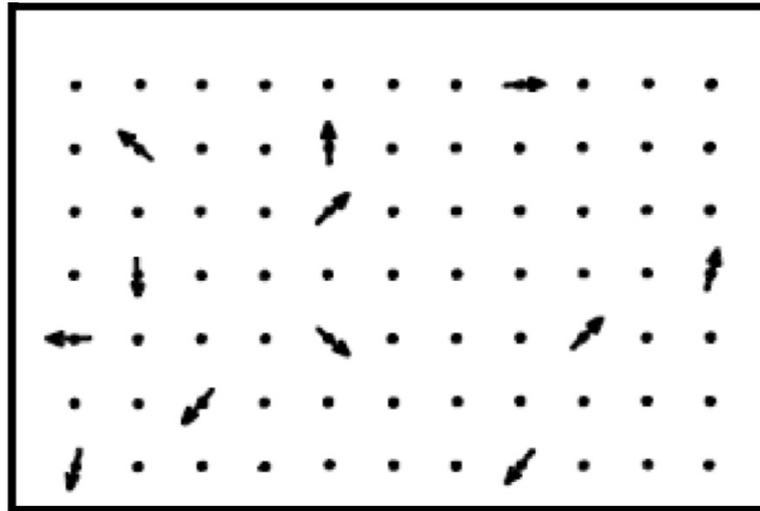


Figura 2.1: Representação de um sistema vidro de spin.

O modelo de Edwards e Anderson (EDWARDS; ANDERSON, 1975) foi o pioneiro, do ponto de vista teórico, introduzindo o parâmetro de ordem

$$q_{EA} = \sum_i \left[ \langle S_i \rangle^2 \right] \quad (2.1)$$

para caracterizar a fase vidro de spin. Na equação (2.1),  $\langle \dots \rangle$  e  $[\dots]$  representam a média térmica e a média sobre a desordem, respectivamente.

Sistemas físicos que apresentam um comportamento vidro de spin têm sido relatados desde a década de 70 em ligas magnéticas diluídas em metais hospedeiros, que possuem propriedades particulares, nos quais se pode citar a existência de um estado metaestável e altamente irreversível, sem ordenamento espacial de longo alcance convencional (ferro ou antiferromagnético) abaixo de  $T_f$  (BINDER; YOUNG, 1986). Para tanto, foram desenvolvidas ligas a partir de átomos magnéticos (Fe, Mn) como sendo impurezas magnéticas diluídas em metais hospedeiros (Au, Ag, Cu, Pt). Observou-se que os momentos das impurezas produziam uma polarização magnética nos elétrons de condução do metal hospedeiro, fazendo com que os outros spins das impurezas tentassem se alinhar ao longo do campo magnético local gerado por essa polarização. Devido à disposição aleatória das impurezas, algumas interações são positivas, favorecendo o alinhamento paralelo dos spins, e algumas negativas, favorecendo o alinhamento antiparalelo. Como resultado, o sistema apresenta interações competitivas aleatórias (FISCHER; HERTZ, 1991). Além disso, o espalhamento dos elétrons de condução pela presença dos momentos magnéticos das impurezas possibilita uma interação de troca indireta que descreve um caráter oscilatório, conhecida como interação RKKY. A origem do nome para essa fase magnética

pode ser atribuída a Bryan Coles que, no final da década de 60, fez uma comparação entre o desordenamento magnético das impurezas com vidros estruturais convencionais, que também apresentam uma fase congelada “amorfa” e cujas posições de seus constituintes não têm uma ordem espacial definida (VIANA, 2002), e sugeriu então o nome vidro de spin. Considerando que os momentos magnéticos são distribuídos aleatoriamente, não é possível encontrar uma única configuração de spins que possa satisfazer simultaneamente todas as interações entre os mesmos. Esse é o conceito de frustração, outra característica fundamental da fase VS.

Para compreender o que é frustração, parte-se da seguinte afirmação: a distribuição da interação aleatória  $J_{ij}$  é formada por ligações ferromagnéticas (positivas) e antiferromagnéticas (negativas), ou seja, interações competitivas. Dessa forma, é possível que nem todas as interações  $J_{ij}$  do sistema sejam satisfeitas simultaneamente. Essa incapacidade do sistema em satisfazer todas as ligações ao mesmo tempo é denominada frustração, e seu conceito foi introduzido por Toulouse, em 1977, para os sistemas vidros de spin.

A figura 2.2 representa uma parte de uma rede quadrada. As interações entre os spins são independentes e iguais a  $\pm J$ . Observa-se que, quando o número de interações negativas ( $-J$ ) é par, não há conflito entre as interações, conforme mostra a figura 2.2(a). Ou seja, todas as interações são satisfeitas e a rede é não frustrada. Porém, se o número de interações negativas ( $-J$ ) for ímpar, o sistema não consegue satisfazer todas as ligações ao mesmo tempo, pois há mais de uma configuração possível para o mesmo estado, como pode ser visto na figura 2.2(b), que representa uma rede frustrada.

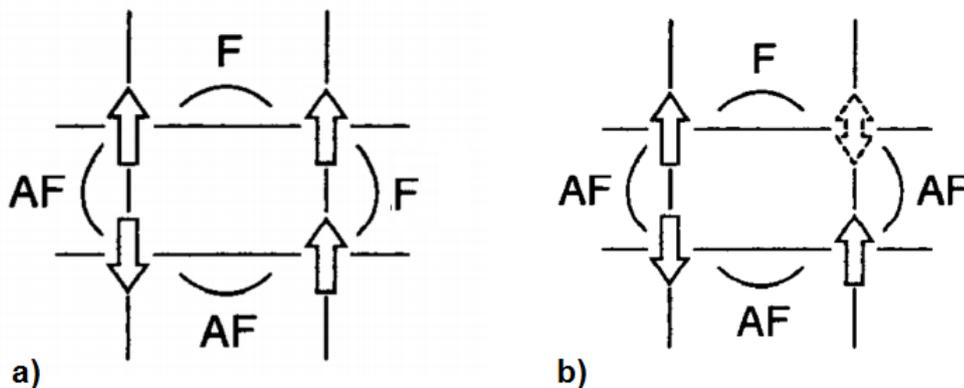


Figura 2.2: Representação de uma rede quadrada a) não frustrada e b) frustrada. Figuras adaptadas de (RAMIREZ, 1994).

Toulouse apresentou, ainda, uma interpretação geométrica para o problema da frus-

tração: definindo a função  $\Phi$ , denominada função frustração, como

$$\Phi = \pm 1, \quad (2.2)$$

que representa o contorno fechado de uma rede quadrada qualquer, com ligações que fazem parte deste contorno. Se  $\Phi = 1$ , todos os spins em torno da rede podem ser organizados de modo a satisfazer as quatro ligações. Porém, se  $\Phi = -1$ , isso não é possível, e pelo menos uma das ligações não é satisfeita. Dessa forma, o sistema é considerado frustrado. E, apenas neste último caso, é que existe então a possibilidade de existência da fase VS (VANNIMENUS; TOULOUSE, 1977).

Os ingredientes desordem e frustração, juntos levam ao surgimento de um estado fundamental multidegenerado, ou seja, várias configurações de quase equilíbrio associadas a mínimos locais de energia, separados por barreiras de energia livre e que podem estar relacionados à quebra de ergodicidade (BINDER; YOUNG, 1986). Em um sistema ergódico, todos os estados de mesma energia têm igual probabilidade de serem ocupados. Acima de uma temperatura  $T_f$ , observa-se uma fase paramagnética e o sistema é ergódico, pois está em equilíbrio e se encontra com probabilidade proporcional a  $\exp(-E/k_B T)$  em qualquer uma das suas configurações possíveis do espaço de fase (PATHRIA, 1996). Já abaixo de  $T_f$ , ocorre uma quebra na ergodicidade do sistema, em que o espaço de fases é dividido em muitos vales separados por barreiras infinitamente altas de energia livre, tornando cada vale termodinamicamente inacessível aos outros (DOTSENKO, 1994).

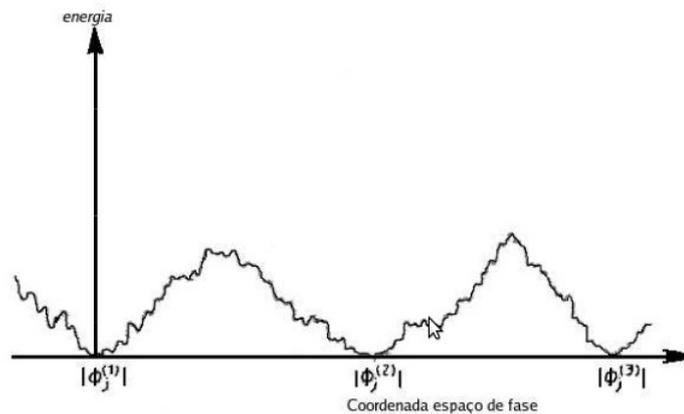


Figura 2.3: Representação da energia livre de um sistema vidro de spin ( $T < T_f$ ) em função de uma coordenada do espaço de fases (BINDER; YOUNG, 1986).

A figura 2.3 ilustra esse modo de representação do espaço de fases, denominado complexo cenário da energia livre. Ao reduzir a temperatura ( $T < T_f$ ), novas quebras de ergodicidade acontecem em cada vale (DOTSENKO, 1994), ocasionando uma fragmen-

tação do espaço de fases com um número ainda maior de vales menores. Mas quando ( $T > T_f$ ), a estrutura de muitos vales desaparece, ocorrendo um único mínimo para a energia livre. Experimentalmente, a fase VS pode apresentar um pico na susceptibilidade magnética decorrendo de efeitos de magnetização espontânea local não nula. Conforme pode ser visto na figura 2.4, o pico acentuado na temperatura de transição  $T_f$  representa a transição de segunda ordem entre as fases PM e VS. Além disso, o pico da susceptibilidade é fortemente dependente da frequência do campo magnético aplicado. Mesmo não sendo mostrado na figura abaixo, se a frequência do campo aplicado for reduzida, a temperatura de congelamento também diminuirá (FISCHER; HERTZ, 1991).

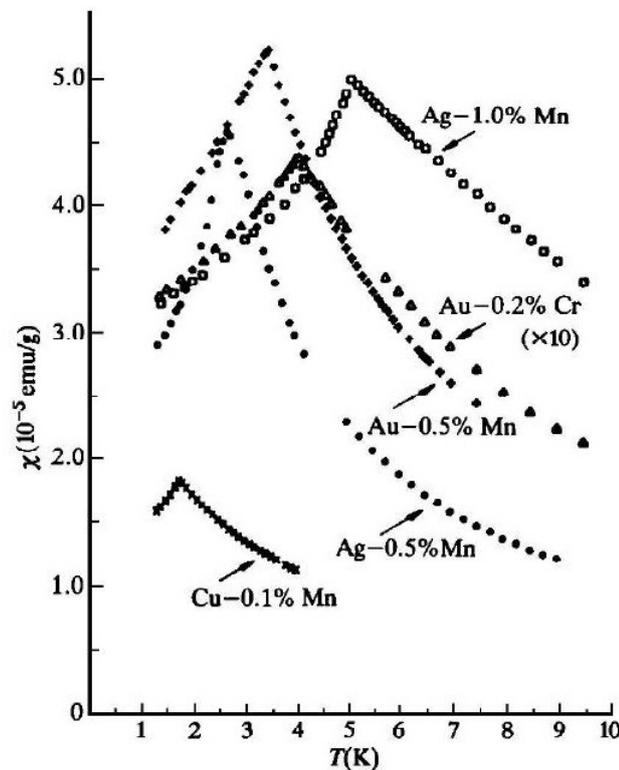


Figura 2.4: Suscetibilidade magnética como função da temperatura para alguns compostos VS. O pico na susceptibilidade marca uma transição entre as fases PM e VS (FISCHER; HERTZ, 1991).

A magnetização pode apresentar comportamentos diferentes dependendo de como realizada a medida. Por exemplo, quando se resfria a amostra sem campo magnético aplicado (ZFC, do inglês, *Zero Field Cooling*), a magnetização apresenta um comportamento diferente daquele esperado quando a mesma é resfriada com campo aplicado (FC, do inglês, *Field Cooling*) (MYDOSH, 1996; BINDER; YOUNG, 1986). A figura 2.5 mostra o gráfico da magnetização em função da temperatura para um composto VS. O ciclo (1 → 2 → 3 → 4 → 5) representa o sistema sendo resfriado a ZFC. Primeiramente,

resfria-se a amostra partindo de  $T \gg T_f$  até  $T \ll T_f$  ( $1 \rightarrow 2$ ), em seguida aplica-se um campo baixo e a magnetização assume valores positivos ( $2 \rightarrow 3$ ). A temperatura aumenta e a curva de magnetização segue para ( $3 \rightarrow 4 \rightarrow 5$ ). Porém, quando se resfria a amostra com campo externo constante aplicado, a magnetização segue o caminho ( $5 \rightarrow 4$ ), para depois desligá-lo. Mas, para  $T < T_f$  ela segue ( $4 \rightarrow 6$ ), sendo praticamente independente da temperatura (MYDOSH, 1996).

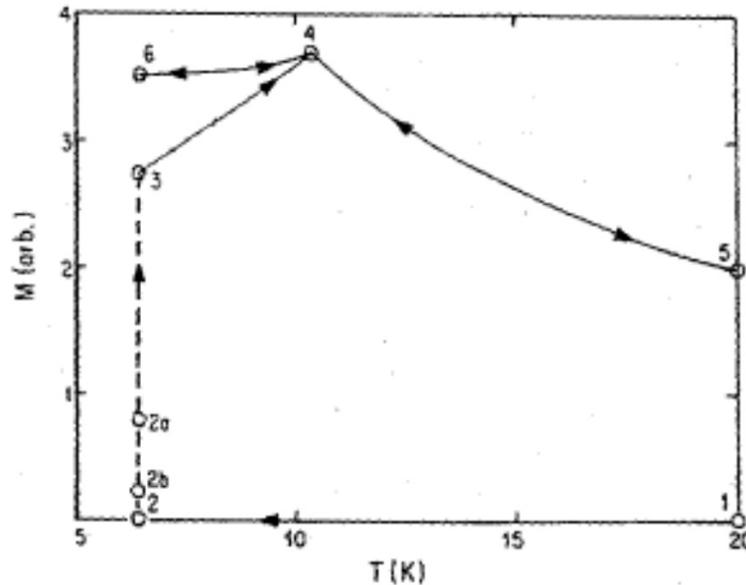


Figura 2.5: Gráfico da magnetização em função da temperatura para o composto AgMn. O ciclo ( $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 5$ ) refere-se ao resfriamento a campo nulo (ZFC), e o ciclo ( $5 \rightarrow 4 \rightarrow 6 \rightarrow 4 \rightarrow 5$ ) ao FC (MYDOSH, 1996).

## 2.1.2 Modelos teóricos que descrevem um sistema VS

### Modelo Sherrington-Kirkpatrick (SK)

Um dos modelos mais conhecidos e utilizados na literatura para estudar um sistema VS é o modelo de Sherrington-Kirkpatrick (KIRKPATRICK; SHERRINGTON, 1978), descrito pelo Hamiltoniano

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j \quad (2.3)$$

com as variáveis clássicas de spin  $S_i = \pm 1$ . A soma sobre  $i, j$  é feita sobre todos os pares de spins  $S_i S_j$  e  $J_{ij}$  é a variável aleatória responsável por gerar desordem e frustração no problema. Essa interação desordenada segue uma distribuição de probabilidades contínua,

ou seja, uma distribuição gaussiana (KIRKPATRICK; SHERRINGTON, 1978), dada por

$$P(J_{ij}) = \left[ \left( \frac{N}{\sqrt{2\pi J^2}} \right)^{1/2} \right] \exp \left[ \frac{-N(J_{ij})^2}{2J^2} \right], \quad (2.4)$$

em que  $J$  é a largura da distribuição. No modelo SK, a desordem introduzida pela variável  $J_{ij}$  pode ser tratada com o uso do método das réplicas (FISCHER; HERTZ, 1991) que, tratado a nível de campo médio, reduz o problema original a um problema efetivo de um único sítio sob a influência de um campo gerado pelos demais spins. Nesse modelo, a energia livre por spin  $f(J_{ij}) = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{N\beta} \ln Z(J_{ij})$  depende de uma configuração particular de  $J_{ij}$  e, portanto, uma média sobre distribuição de probabilidades deve ser tomada, seguindo

$$\langle \langle f(J_{ij}) \rangle \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta N} \langle \langle \ln Z(J_{ij}) \rangle \rangle = -\frac{1}{\beta} \int dJ_{ij} P(J_{ij}) \ln Z(J_{ij}), \quad (2.5)$$

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

Porém o cálculo da média sobre a desordem torna-se complicado devido à dependência de  $\ln Z(J_{ij})$  em relação à variável  $J_{ij}$ . Para solucionar esse problema, pode-se utilizar o método das réplicas, que consiste no procedimento abaixo:

$$\ln x = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{x^n - 1}{n}, \quad (2.6)$$

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

A função de partição pode ser escrita como

$$Z = \text{tr} e^{-\beta H}, \quad (2.7)$$

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

Apesar de ser amplamente estudado por apresentar uma solução analítica exata para o problema VS, essa solução depende do método das réplicas, que pode apresentar dificuldades pela instabilidade na solução VS com a simetria de réplicas. Em outras palavras, o uso deste artifício para resolver a desordem resulta em uma fase VS cuja solução pode apresentar uma quebra de ergodicidade altamente não trivial com a energia livre, exibindo a complicada estrutura de muitos vales. Além disso, entre as fases PM e VS pode aparecer uma transição de primeira ordem, dificultando a escolha da solução vidro de spin correta tanto na solução com simetria de réplicas, quanto na solução em que essa simetria é quebrada (MAGALHAES et al., 2009).

Nesse sentido, outros modelos magnéticos desordenados, menos complexos, foram propostos para descrever características da fase VS. Entre eles, destaca-se o modelo de van Hemmen (HEMMEN, 1982; ZIMMER et al., 2012; MORAIS et al., 2016b; NOGUEIRA et al., 2007), que apresenta uma solução mais simples e não utiliza réplicas para tratar a desordem, e que será discutido com mais detalhes na seção seguinte.

### Modelo vidro de spin de van Hemmen

O modelo proposto por van Hemmen (HEMMEN, 1982; HEMMEN et al., 1983) é um modelo simples, de alcance infinito, que contém aleatoriedade e frustração, capaz de reproduzir características de um vidro de spin sem utilizar o método das réplicas. O Hamiltoniano que descreve tal modelo é dado por

$$H_N = -\frac{J_0}{N} \sum_{(i,j)} S_i S_j - \sum_{(i,j)} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i, \quad (2.8)$$

no qual  $N$  spins de Ising ( $S_i = \pm 1$ ) interagem em pares  $(i, j)$  e com um campo magnético externo  $H$ . As interações ferromagnéticas (FE) e antiferromagnéticas (AF) são representadas por  $J_0 > 0$  e  $J_0 < 0$ , respectivamente. O termo  $J_{ij}$  representa as interações desordenadas, e é dado por:

$$J_{ij} = \frac{J}{N} [\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i], \quad (2.9)$$

em que  $\xi_i$  e  $\eta_i$  são variáveis aleatórias independentes identicamente distribuídas em torno de zero e uma variância finita (HEMMEN, 1982; HEMMEN et al., 1983).

Sobre os tipos de diluição que um sistema magnético pode comportar, podemos citar dois deles: *annealed* e *quenched*. Na diluição *annealed*, independente de ser de sítio ou de ligação, a aleatoriedade varia em toda a rede em função de grandezas como temperatura, campo externo, concentração, etc., organizando-se para manter mínima a energia livre. Nesse caso, o sistema não apresenta frustração, e conseqüentemente, a fase VS dificilmente será encontrada. Por outro lado, a diluição *quenched* é aquela em que a aleatoriedade é fixa, ou seja, as interações positivas e negativas estão aleatoriamente distribuídas na rede e, uma vez escolhidas suas localizações, elas serão fixas. Nesse caso, existe a possibilidade de o sistema ser frustrado e, portanto, apresentar a fase VS (SILVA, 2007). Segundo (DOTSENKO, 1994), a desordem do modelo de van Hemmen pode ser considerada como *quenched*.

O modelo de van Hemmen pode ser estudado através do uso de duas distribuições de probabilidades independentes para as variáveis aleatórias  $\xi_i$  e  $\eta_i$ , sendo elas a distribuição

bimodal,

$$P(x_i) = \frac{1}{2} [\delta(x_i - 1) + \delta(x_i + 1)] \quad (2.10)$$

e a distribuição gaussiana,

$$P(x_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{x_i^2}{2}\right], \quad (2.11)$$

onde em ambos os casos  $x_i$  representa  $\xi_i$  ou  $\eta_i$ .

Como citado anteriormente, o modelo de VH apresenta desordem, devido à aleatoriedade das interações, e frustração, devido à competição entre as interações positivas e negativas, de forma que nem todas as interações podem ser satisfeitas simultaneamente. Quando o acoplamento ferromagnético é nulo ( $J_0 = 0$ ), observa-se dois subsistemas desacoplados: um ferromagnético, em que as interações aleatórias entre os spins são positivas, e um antiferromagnético, com interações negativas (HEMMEN, 1982; HEMMEN et al., 1983). Quando  $J_0 > 0$  e a distribuição bimodal é utilizada, uma fase mista é observada no diagrama de fases, em que tanto o parâmetro de ordem VS  $q \neq 0$ , quanto a magnetização  $m \neq 0$ . Isso pode estar relacionado ao fato de que cada um dos subsistemas é composto pela metade do total de spins do sistema e as interações aleatórias entre eles têm o mesmo peso. Entretanto, quando se utiliza da distribuição gaussiana para o cálculo da média configuracional, cada subsistema é composto por spins nos quais as ligações não são constantes. Por isso não se pode afirmar que a interação aleatória seja sempre mais intensa que o acoplamento ferromagnético da fase VS, como acontece na distribuição bimodal. Esse fator colabora com uma fase VS pura em temperaturas muito baixas, não sendo possível observar uma fase mista no diagrama de fases construído a partir dessa distribuição (HEMMEN, 1982; HEMMEN et al., 1983).

A figura 2.6 exhibe os diagramas de fases da temperatura em função do acoplamento ferromagnético para cada uma das distribuições de probabilidades discutidas acima.

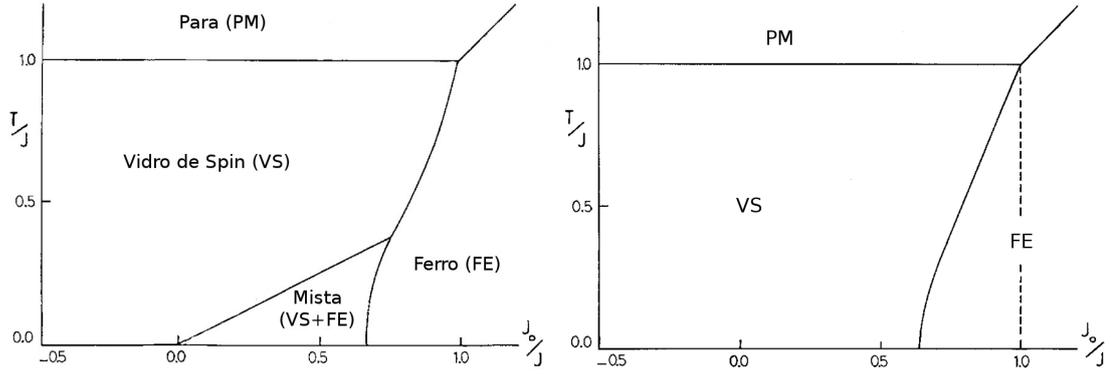


Figura 2.6: Diagrama de fases da temperatura  $T/J$  em função do acoplamento ferromagnético  $J_0/J$  (a) para a distribuição bimodal ( $\xi$  e  $\eta = \pm 1$ ). (b) para a distribuição gaussiana. Figuras adaptadas de (HEMMEN et al., 1983).

A figura 2.6(a), que representa a distribuição bimodal, a fase mista (VS+FE) é observada abaixo da fase VS para valores relativamente baixos de  $J_0$ , mas a mesma não é vista na figura 2.6(b) que representa a distribuição gaussiana.

A função de partição  $Z_N$  contém todas as informações do sistema e, para o modelo em questão, é dada por  $Z_N = \sum_{S_i} \exp(\beta H_N)$ ,

$$Z_N = \sum_{S_i} \exp \left[ \frac{k_1}{N} \sum_{i \neq j} S_i S_j + \frac{k_2}{N} \sum_{i \neq j} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i) S_i S_j + k_3 \sum_i S_i \right] \quad (2.12)$$

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

Com a variável de spin  $S_i = \pm 1$  pode-se fazer uso das seguintes relações:

$$\left( \sum_i S_i \right)^2 = \sum_i S_i^2 + 2 \sum_{i \neq j} S_i S_j \implies \sum_{i \neq j} S_i S_j = \frac{1}{2} \left[ \left( \sum_i S_i \right)^2 - \sum_i S_i^2 \right] \quad (2.13)$$

e

$$\left[ \sum_i (\xi_i + \eta_i) S_i \right]^2 = \left( \sum_i \xi_i S_i \right)^2 + \left( \sum_i \eta_i S_i \right)^2 + 2 \sum_i \xi_i \eta_i S_i^2 + 2 \sum_{i \neq j} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i) S_i S_j, \quad (2.14)$$

de forma que

$$\sum_{i \neq j} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i) S_i S_j = \frac{1}{2} \left\{ \left[ \sum_i (\xi_i + \eta_i) S_i \right]^2 - \left( \sum_i \xi_i S_i \right)^2 - \left( \sum_i \eta_i S_i \right)^2 - 2 \sum_i \xi_i \eta_i S_i^2 \right\}. \quad (2.15)$$

Aplicando as expressões (2.13) e (2.15) na equação (2.12), tem-se

$$Z_N = \sum_{S_i} \exp \left[ \frac{k_1}{2N} \left( \left( \sum_i S_i \right)^2 - \sum_i S_i^2 \right) + \frac{k_2}{2N} \left\{ \left[ \sum_i (\xi_i + \eta_i) S_i \right]^2 - \left( \sum_i \xi_i S_i \right)^2 + \left( \sum_i \eta_i S_i \right)^2 - 2 \sum_i \xi_i \eta_i S_i^2 + k_3 \sum_i S_i \right\} \right]. \quad (2.16)$$

Ao rearranjar os termos da equação (2.16), obtém-se

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{S_i} \exp \left[ \sum_i \left( -\frac{k_1}{2N} - \frac{k_2}{N} \xi_i \eta_i \right) S_i^2 \right] \exp \left[ \frac{k_1}{2N} \left( \sum_i S_i \right)^2 \right] \\ &\times \exp \left[ \frac{k_2}{N} \left( \sum_i (\xi_i + \eta_i) S_i \right)^2 \right] \exp \left[ -\frac{k_2}{2N} \left( \sum_i \xi_i S_i \right)^2 \right] \\ &\times \exp \left[ -\frac{k_2}{2N} \left( \sum_i \eta_i S_i \right)^2 \right] \exp \left[ k_3 \sum_i S_i \right]. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Utilizando a identidade gaussiana (transformação de Hubbard-Stratonovich)

$$\exp(\lambda a^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{-x^2}{2} + a\sqrt{2\lambda}x \right) dx \quad (2.18)$$

para tratar os termos quadráticos da equação (2.17), tem-se:

$$\begin{aligned} Z_N &= \frac{N^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp -\frac{N}{2} (x^2 + y^2 + z^2 + v^2) \\ &\times \exp \sum_i \left[ \sqrt{k_1} x S_i + \sqrt{k_2} y (\xi_i + \eta_i) S_i + \sqrt{-k_2 z} \xi_i S_i + \sqrt{-k_2 v} \eta_i S_i \right] dx dy dz dv, \end{aligned} \quad (2.19)$$

tomando uma mudança de variável  $x = \sqrt{N}x'$ , tal que  $x' = x, y, z$  e  $v$ .

Reorganizando os termos de forma mais clara, assume-se que

$$L_i = -\frac{k_1}{2N} - \frac{k_2}{N} \xi_i \eta_i \quad (2.20)$$

e

$$K_i = \sqrt{k_1}x + \sqrt{k_2}[(\xi_i + \eta_i)y + j(\xi_i z + \eta_i v) + k_3], \quad (2.21)$$

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

$$Z_N = \frac{N^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp -\frac{N}{2}(x^2 + y^2 + z^2 + v^2) \\ \times \sum_{S_i} \exp \left[ \sum_i L_i S_i^2 + K_i S_i \right] dx dy dz dv. \quad (2.22)$$

Resolvendo o último termo da equação (2.22):

$$\sum_{S_i} \exp \left[ \sum_i L_i S_i^2 + K_i S_i \right] = \sum_{S_1} \exp(L_1 S_1^2 + K_1 S_1) \exp(L_2 S_2^2 + K_2 S_2) \dots \\ = \prod_i \sum_{S_i} \exp(L_i S_i^2 + K_i S_i), \quad (2.23)$$

uma vez que  $L_i$  e  $K_i$  são funções de  $\xi_i$  e  $\eta_i$ , e que  $S_i = \pm 1$ , então:

$$\sum_{S_i} \exp \left[ \sum_i (L_i S_i^2 + K_i S_i) \right] = \prod_i 2 \exp(L_i) \cosh(K_i). \quad (2.24)$$

Através das propriedades:  $\exp[\ln(a)] = a$  e  $\ln(\prod_i b_i) = \sum_i \ln b_i$ , pode-se chegar à

$$\ln \left[ \prod_i 2 \exp(L_i) \cosh(K_i) \right] = \sum_i \ln(2 \exp(L_i) \cosh(K_i)), \quad (2.25)$$

e, dessa forma, realizar a substituição da equação (2.25) em (2.22),

$$Z_N = \frac{N^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp -\frac{N}{2}(x^2 + y^2 + z^2 + v^2) \\ \times \exp \left[ \sum_i \ln(2 \exp(L_i) \cosh(K_i)) \right] dx dy dz dv. \quad (2.26)$$

Como as variáveis aleatórias e independentes  $\xi_i$  e  $\eta_i$  podem ser contínuas ou discretas, essas podem seguir tanto a distribuição gaussiana quanto a distribuição bimodal. Cada parcela do somatório da equação (2.26) se torna uma integral em  $\xi$  e  $\eta$  com peso  $P(\xi, \eta) = P(\xi)P(\eta)$ . Assim, tem-se  $N$  integrais, que representam os  $N$  sítios da rede (VIANA, 2002).

Para resolver a expressão da energia livre, que é dada por

$$f(\xi, \eta) = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta N} \ln Z_N(\xi, \eta), \quad (2.27)$$

$$f(\xi, \eta) = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta N} \ln \frac{N^2}{4\pi^2} \int \int \int \int \exp \left\{ -N \left[ \left( \frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2} + \frac{z^2}{2} + \frac{v^2}{2} \right) - \frac{1}{N} \sum_i \ln [2 \exp(L_i) \cosh(K_i)] \right] \right\} dx dy dz dv, \quad (2.28)$$

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

Após alguns passos matemáticos, é possível resolver o cálculo da média configuracional da energia livre do sistema, a partir da relação

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

obtendo-se a expressão

$$f(\xi, \eta) = \frac{1}{\beta} \left[ \frac{1}{2} (k_1 m^2 + 2k_2 q_1 q_2) - \int \int \ln(2 \cosh K) P(\xi, \eta) d\xi d\eta \right], \quad (2.30)$$

ao assumir que as variáveis de spin  $S_i = \pm 1$ , com  $K = k_1 m + k_2 q(\xi_i + \eta_i) + k_3$ , lembrando que  $k_1 = \beta J_0$ ,  $k_2 = \beta J$  e  $k_3 = \beta H$ , definidos anteriormente.

No ensemble canônico, a magnetização por spin é definida como:

$$m = \langle S_i \rangle = \text{tr}(S_i \exp(-\beta H)), \quad (2.31)$$

ou, reescrevendo:

$$m = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial K} (\ln Z_N) = -\frac{\partial}{\partial K} (\beta f) \frac{\partial K}{\partial H} = -\frac{\partial}{\partial K} (\beta f). \quad (2.32)$$

De qualquer forma,

$$m = \int \int \tanh K P(\xi, \eta) d\xi d\eta. \quad (2.33)$$

De forma análoga ao passo anterior, é preciso determinar os parâmetros de ordem da fase vidro de spin. Para isso, tem-se que

$$q_1 = \frac{1}{N} \langle \langle \sum_i \xi_i \langle S_i \rangle \rangle \rangle \quad \text{e} \quad q_2 = \frac{1}{N} \langle \langle \sum_i \eta_i \langle S_i \rangle \rangle \rangle, \quad (2.34)$$

e essas duas expressões também podem ser reescritas da forma

$$q_1 = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \varphi_1} (\ln Z_N) = -\frac{\partial}{\partial \varphi_1} \beta f, \quad \varphi_1 = \sqrt{k_2} (y + jz) \quad (2.35)$$

$$q_2 = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \varphi_2} (\ln Z_N) = -\frac{\partial}{\partial \varphi_2} \beta f, \quad \varphi_2 = \sqrt{k_2} (y + jv). \quad (2.36)$$

Logo,

$$q_1 = \int \int \xi \tanh KP(\xi, \eta) d\xi d\eta \quad (2.37)$$

e

$$q_2 = \int \int \eta \tanh KP(\xi, \eta) d\xi d\eta. \quad (2.38)$$

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

$$f = \frac{1}{\beta} \left[ \frac{1}{2}(k_1 m^2 + 2k_2 q^2) - \int \int \ln(2 \cosh KP(\xi, \eta)) d\xi d\eta \right] \quad (2.39)$$

e o parâmetro de ordem vidro de spin

$$q = \frac{1}{2} \int \int (\xi + \eta) \tanh KP(\xi, \eta) d\xi d\eta, \quad (2.40)$$

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

## 2.2 Campo aleatório

A presença de desordem em sistemas de spins desperta muito interesse nessa linha de pesquisa, pois representa um desafio permanente no entendimento das propriedades físicas que emergem a partir da interpolação entre a desordem e a interação de muitos spins (MORAIS et al., 2016a).

O modelo de Ising com campo aleatório, RFIM (do inglês, *Random Field Ising Model*), é um modelo bastante investigado na área do magnetismo, principalmente quando associado com Modelos Vidro de Spin. A combinação dessas duas manifestações altamente não triviais de desordem (RF + VS), lidera as pesquisas em sistemas de spins justamente por não se tratar somente de possibilidades teóricas. Um exemplo dessa combinação pode ser encontrada em um antiferromagneto diluído na presença de um campo aleatório uniforme, como  $Fe_x Zn_{1-x} F_2$  e  $Fe_x Mg_{1-x} Cl_2$  (BELANGER, 1997).

Um aspecto curioso nesse composto está relacionado com a interpolação entre comportamentos RFIM e vidros de spin. Nesse caso, o comportamento RFIM será encontrado quando a concentração  $x$  assumir valor  $x > 0.42$ , já para  $x \sim 0.25$  o que se observa é um comportamento VS. Entretanto, para concentrações intermediárias,  $0.25 < x < 0.42$ , ambos os comportamentos RFIM e VS são observados, sugerindo uma dependência da magnitude do campo magnético externo aplicado, sendo RFIM para baixos valores de campo e VS

para altos (IMRY; MA, 1975; SOARES et al., 1994; BELANGER, 1997; NOGUEIRA et al., 1998; MAGALHAES et al., 2011). Recentemente, houve a especulação de que esta interpolação entre RFIM e VS também poderia ser encontrada em outros compostos, como naqueles usualmente descritos por modelos quânticos, como  $LiHo_xY_{1-x}F_4$  e  $CeNi_{1-x}Cu_x$ . Por exemplo, no composto  $LiHo_xY_{1-x}F_4$ , sugere-se que a aplicação de um campo transversal (ao longo da direção  $z$ ) poderia gerar um campo aleatório e, conseqüentemente, suprimir a fase VS (SCHECHTER; STAMP, 2005; SCHECHTER; LAFLORENCIE, 2006; TABEI et al., 2006; MAGALHAES et al., 2011; MORAIS et al., 2012b). Já no composto  $CeNi_{1-x}Cu_x$ , a substituição do  $Ni$  por  $Cu$  gera uma competição altamente não trivial entre efeito Kondo e magnetismo, em que também sugere-se a indução de campos aleatórios (MARCANO et al., 2007).

Em uma aproximação de campo médio para o RFIM, a natureza das transições de fases depende da distribuição associada com o campo aleatório. Para a distribuição bimodal, sugere-se que as transições de fases sejam contínuas nas regiões de altas temperaturas, tornando-se de primeira ordem para valores suficientemente altos de campo aleatório em baixas temperaturas (AHARONY, 1978; NOGUEIRA et al., 2007). Já para a distribuição Gaussiana, a transição de fase será de segunda ordem, ou seja, contínua (SCHNEIDER; PYTTE, 1977). Teoricamente, estudos de sistemas VS sob influência de campo aleatório foram desenvolvidos, em sua grande maioria, em nível de campo médio, para modelos de interações de alcance infinito (MAGALHAES et al., 2011). Nos capítulos seguintes serão apresentados os modelos propostos neste trabalho, justamente por se tratar de modelos de vidro de spin na presença de um campo aleatório  $h_i$  sujeito às distribuições de probabilidades discreta e contínua.

## 2.3 Transições de fases e Pontos Multicríticos

O comportamento das transições de fase de um dado sistema pode ser analisado através de um diagrama de fases, que delimita a região de existência de cada fase. A variação de algum parâmetro, como por exemplo a temperatura, pode provocar uma competição entre a agitação térmica (resultando em uma desordem no sistema) e o acoplamento dos momentos magnéticos responsável por manter o sistema ordenado. Em resposta à essas variações é que ocorrerão as transições de fase.

### Pontos Multicríticos

Como já citado anteriormente, as transições de fase podem ocorrer em resposta às

mudanças sofridas por alguma variável no sistema, como temperatura, pressão, campo magnético, etc. Chama-se **ponto crítico** o ponto que marca o final de coexistência de duas fases distintas, que é quando suas energias livres tornam-se idênticas. Nesse caso, pode-se ilustrar o comportamento do sistema em um diagrama de fase, com um ponto crítico separando a fase ordenada da fase desordenada (CHAIKIN; LUBENSKY, 1995).

### Ponto tricrítico

Pode-se examinar as transições de primeira ordem induzidas pela existência de termos de terceira ordem na expansão da energia livre no parâmetro de ordem. As transições de primeira ordem também aparecem quando a simetria do Hamiltoniano impede a existência de termos de terceira ordem. Considerando a expansão da energia livre de Landau:

$$f = \frac{1}{2}r\phi^2 + u_4\phi^4 + u_6\phi^6, \quad (2.41)$$

com  $r = a(T - T^*)$ . Há duas situações possíveis:

i) Se  $u_4 > 0$ , o termo  $u_6$  pode ser desprezado e acontece uma transição de segunda ordem com  $r_c = 0$  e  $T_c = T^*$ .

ii) Se  $u_4 < 0$ , o termo  $u_6$  deve ser considerado, assumindo que  $u_6 > 0$  para manter a estabilidade termodinâmica do sistema. Nesse caso, dois mínimos secundários aparecem simetricamente em relação a  $\phi = 0$  conforme  $T$  diminui. Quando as energias livres dos mínimos secundários em  $\phi \neq 0$  atravessam o eixo  $T = 0$ , então existe uma transição de primeira ordem.

A figura 2.7 representa o comportamento da energia livre com o parâmetro de ordem para diversas temperaturas.

A temperatura de transição de primeira ordem pode ser encontrada a partir das seguintes condições:

$$f(r_c, \phi) = 0 \quad \text{e} \quad \partial f(r_c, \phi) / \partial \phi = 0, \quad (2.42)$$

em que  $\phi = 0$  é uma solução. Para as outras soluções se obtém  $\phi = \pm \frac{|u_4|^{1/2}}{2u_6}$ .

Dessa forma,

$$r_c = a(T_c - T^*) = 0 \quad \text{se} \quad u_4 > 0 \quad (2.43)$$

ou

$$r_c = a(T_c - T^*) = \pm \frac{|u_4|^{1/2}}{2u_6} \quad \text{se} \quad u_4 < 0 \quad (2.44)$$

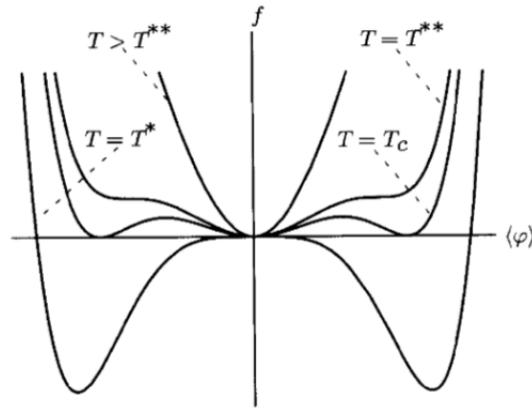


Figura 2.7: Energia livre  $f$  em função do parâmetro de ordem  $\phi$ .  $T_c$  representa a temperatura de transição de primeira ordem.  $T^*$  e  $T^{**}$  os limites de metaestabilidade para aquecimento e resfriamento, respectivamente. Figura adaptada de (CHAIKIN; LUBENSKY, 1995).

O diagrama que descreve a equação no plano  $r - u_4$  está esquematizado na figura 2.8 abaixo.

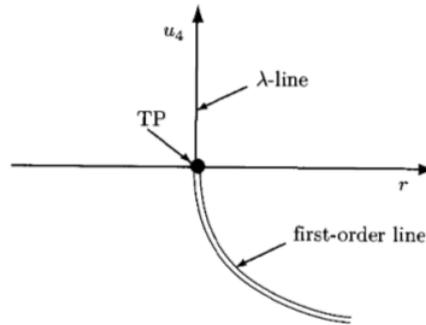


Figura 2.8: Diagrama de fase para a energia livre. A transição de segunda ordem é representada pela linha *lambda*, em que  $r = 0$ ,  $u_4 > 0$ . A linha dupla representa a transição de primeira ordem e o ponto TP é o ponto tricrítico. (CHAIKIN; LUBENSKY, 1995).

O ponto tricrítico foi encontrado experimentalmente em misturas  $He^3$ - $He^4$  (SCHUPPER; SHNERB, 2004) e também em modelos teóricos, como o Modelo de Ising com campo aleatório (COSTABILE et al., 2015) e Blume-Capel (BLUME, 1966; CAPEL, 1966).

### Ponto bicrítico

Seja a energia livre de Landau de um sistema com dois parâmetros de ordem  $\phi_1$  e  $\phi_2$ , dada por:

$$f = \frac{1}{2}r(\phi_1^2 + \phi_2^2) - \frac{1}{2}g(\phi_1^2 - \phi_2^2) + u_1\phi_1^4 + u_2\phi_2^4 + 2u_{12}\phi_1^2\phi_2^2. \quad (2.45)$$

Se  $u_1u_2 < u_{12}^2$ , então há uma linha de transição de primeira ordem ao longo de  $g = 0$ ,

com  $r < 0$  separando a fase em que  $\phi_1 \neq 0$  e  $\phi_2 = 0$  da fase com  $r > 0$  e  $\phi_1 = 0$  e  $\phi_2 \neq 0$ . O ponto bicrítico acontece quando duas linhas distintas de transição contínua se encontram no ponto  $r = 0$  e  $g = 0$ .

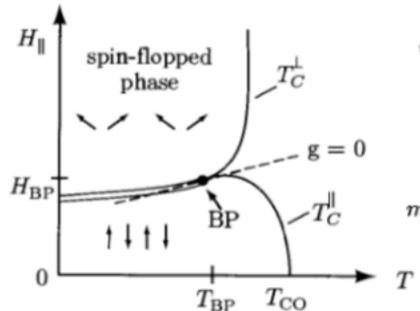


Figura 2.9: Diagrama de fase  $T \times H$  em que  $BP$  representa o ponto bicrítico. (CHAIKIN; LUBENSKY, 1995).

### Ponto crítico terminal ou *critical end point*

Além dos pontos já citados anteriormente, um diagrama de fases também pode apresentar um ponto crítico terminal, ou como será mencionado nessa tese, *critical end point*. Este ponto corresponde à interseção de uma linha contínua que separa a fase paramagnética de uma das fases ferromagnéticas com uma linha de primeira ordem que separa a fase PM da outra fase ordenada.

## 2.4 Transições Inversas

As transições inversas (TI) fazem parte de uma classe de transições de fases altamente não trivial, que apresenta, como uma característica essencial, uma fase usualmente ordenada em temperaturas mais altas que uma fase desordenada. Dessa forma, pode-se dizer que há uma inversão no conteúdo entrópico do sistema, visto que a fase ordenada apresenta uma entropia maior que a fase desordenada. De fato, existem diversos sistemas físicos reais que podem apresentar uma TI, como por exemplo, os supercondutores de altas temperaturas (AVRAHAM et al., 2001), polímeros (RUTH; RASTOGI, 2004) e filmes finos magnéticos (PORTMANN et al., 2001), entre outros.

Dentre as classificações das transições inversas estão o derretimento e o congelamento inverso. O derretimento inverso (DI) se dá através da transição entre uma fase líquida a baixas temperaturas e uma fase cristalina em altas temperaturas que, em sistemas magnéticos, correspondem respectivamente às fases PM e FE (SCHUPPER; SHNERB, 2004). Já o congelamento inverso (CI) é uma transição entre uma fase líquida e uma fase

vidro conforme aumenta a temperatura, que nesse caso correspondem à fase PM e VS, respectivamente (CRISANTI; LEUZZI, 2005).

A fim de se esclarecer que condições um modelo deve ter para apresentar algum tipo de TI, dois modelos clássicos teóricos se destacam na literatura: o modelo de Blume-Capel (BC) (BLUME, 1966; CAPEL, 1966) e o modelo desordenado de Ghatak-Sherrington (GS) (GHATAK; SHERRINGTON, 1977). Ambos são modelos de três estados contendo dois mecanismos competitivos: um termo de interação e um campo cristalino, que favorecem, respectivamente, estados magnéticos e não magnéticos. Não muito distante, outra classe de modelos foi usada para estudar as transições inversas: os modelos de Vidro de Spin de Ising Fermiônico (VSIF). Abaixo, uma breve descrição sobre eles.

### 2.4.1 Transições inversas em modelos clássicos

#### Modelo Blume-Capel

O modelo clássico de Blume-Capel (BLUME, 1966; CAPEL, 1966) pode ser usado como exemplo para estudar as transições inversas. Este modelo é definido pelo Hamiltoniano

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + D \sum_{i=1}^N S_i^2 \quad (2.46)$$

com  $S_i = 0, \pm 1$ .

Nota-se que esse modelo não contém desordem. Porém, há duas interações competindo: uma interação de troca  $J$  que favorece os estados  $S = \pm 1$  (interagentes) e um campo cristalino  $D$  que favorece os estados  $S = 0$  (não interagentes). Nesse caso,  $J$  é responsável por introduzir um acoplamento ferromagnético que pode levar ao surgimento da fase FE. Por outro lado,  $D$  favorece a fase PM em temperaturas baixas. Então, esse modelo inclui uma condição básica do derretimento inverso: a preferência energética dos estados não interagentes quando  $D$  é grande.

O modelo BC pode apresentar derretimento inverso, porém, em uma aproximação de campo médio, isso só acontece se um termo de degenerescência for introduzido artificialmente ao problema. Esse termo é adicionado através do parâmetro de degenerescência  $r = l/k \geq 1$  (em que  $l$  define a degenerescência dos estados com  $S = \pm 1$  e  $k$  a degenerescência dos estados  $S = 0$ ) cuja função é favorecer o aumento entrópico da fase ordenada (SCHUPPER; SHNERB, 2004, 2005). Ou seja, o DI não aparece espontaneamente no modelo BC, por isso, é necessário introduzir uma vantagem entrópica para que isso ocorra.

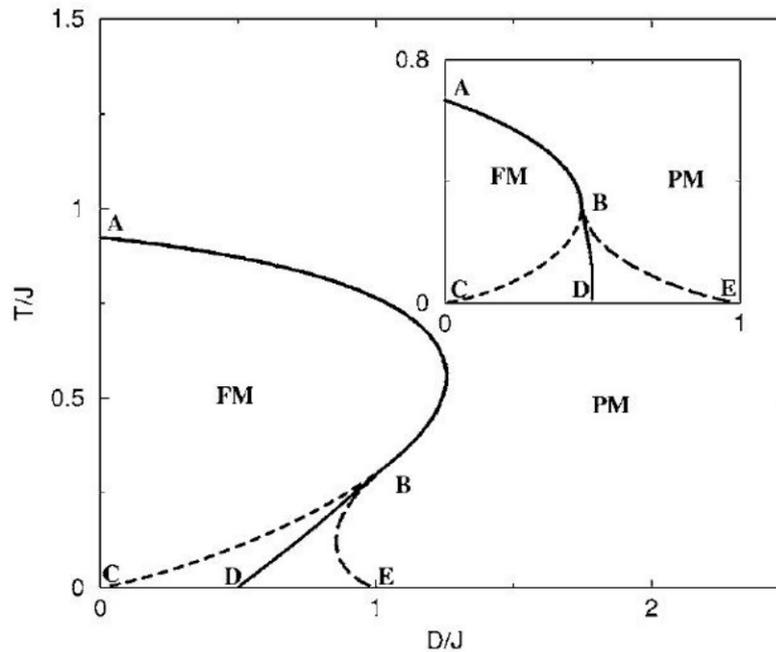


Figura 2.10: Diagrama de fases do modelo Blume-Capel da temperatura  $T$  em função do campo cristalino  $D$ , para  $r = 1$  na figura menor, que não apresenta derretimento inverso, e para  $r = 6$  na figura principal, que exibe derretimento inverso (SCHUPPER; SHNERB, 2004, 2005).

A figura (2.10) exibe os resultados do modelo BC. A linha AB representa uma transição de segunda ordem entre as fases PM e FE. B é o ponto tricrítico e BD a transição de primeira ordem. As linhas BC e BE definem o limite de validade das soluções PM e FE, respectivamente. Se olharmos para a imagem menor, que são os resultados originais do modelo, ou seja, sem vantagem entrópica, nota-se que não há ocorrência de uma transição inversa. Porém, ao observar a figura maior, percebe-se que a fase FE ocupa maior área no diagrama de fases, fato que reflete a vantagem entrópica dos estados  $S = \pm 1$ . Se BD é a transição de primeira ordem entre as fases, o diagrama indica a presença de derretimento inverso, pois com o aumento da temperatura a partir da fase PM (desordenada), se obtém uma fase FE (ordenada).

### Modelo Ghatak-Sherrington

Já o modelo GS (GHATAK; SHERRINGTON, 1977) é capaz de reproduzir algumas características do congelamento inverso, contudo sem a necessidade de introduzir vantagem entrópica através da degenerescência dos estados interagentes. O Hamiltoniano que

define tal modelo é dado por

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j + D \sum_{i=1}^N S_i^2 \quad (2.47)$$

com  $S = \pm 1, 0$  e a interação de troca  $J_{ij}$  é uma variável aleatória que segue uma distribuição de probabilidade gaussiana. O termo aleatório  $J_{ij}$  é responsável por introduzir desordem e frustração ao problema, levando assim ao surgimento da fase VS.

Particularmente, o termo de desordem introduz também uma complicação ao problema, que ocorre no cálculo de sua média e deve ser realizado utilizando o método das réplicas (SCHUPPER; SHNERB, 2005), conforme brevemente discutido na seção 2.1.2 Eq.(2.6). Nesse caso, a fase VS mostra uma quebra de ergodicidade altamente não trivial com a energia livre mostrando uma estrutura complicada com a existência de um número infinito de vales. Tanto na solução com simetria de réplicas quanto na solução com quebra de simetria é difícil escolher a solução VS correta (COSTA et al., 1994). Isso poderia induzir ao erro no posicionamento da linha reentrante, crucial ao estudo do congelamento inverso.

## 2.4.2 Transições inversas em modelos fermiônicos

É conhecido que o modelo clássico GS tem uma estreita relação com o modelo VSIF em uma aproximação estática. Nesse último, os operadores de spin são escritos como uma combinação linear dos operadores fermiônicos de criação e destruição que atuam um espaço com quatro autoestados por sítio ( $|00\rangle, |\uparrow 0\rangle, |0 \downarrow\rangle, |\uparrow \downarrow\rangle$ ). Particularmente, a termodinâmica de ambos modelos são mapeadas exatamente pela relação entre a constante de anisotropia  $D$  e o potencial químico  $\mu$  do modelo GS e VSIF, respectivamente (FELDMANN; OPPERMANN, 1999).

Nos modelos fermiônicos, o potencial químico  $\mu$  tem a função de controlar a ocupação média de férmions por sítio e introduzir flutuações de carga (flutuações no número de ocupação). Devido a essas flutuações, o modelo VSIF, no ensemble grande canônico, mostra o surgimento de transições de primeira ordem para altos valores  $\mu$ .

Na figura 2.11, pode-se analisar a vizinhança do ponto tricrítico (PTC). O diagrama  $T \times \mu$  apresenta uma transição de segunda ordem ocorrendo acima do PTC (curva a), enquanto abaixo do PTC, transições de primeira ordem surgem sobre a curva c.

Segundo a referência (FELDMANN; OPPERMANN, 1999), as propriedades dos mo-

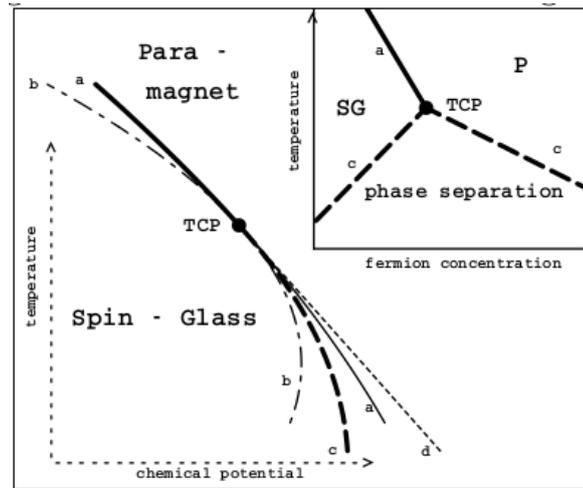


Figura 2.11: Vizinhanças do Ponto Tricrítico (PTC) para o potencial químico  $\mu > 0$ . Acima do PTC, transição de segunda ordem entre as fases PM e VS. Abaixo do PTC, transição de primeira ordem. A linha  $d$  limita a região de existência da solução VS e a linha  $b$ , limita a região de existência da solução PM. (ROSENOW; OPPERMANN, 1996).

delos VSIF no ensemble grande canônico e do modelo clássico de GS, por exemplo, estão diretamente relacionados através de um mapeamento entre o parâmetro anisotrópico  $D$  e o potencial químico  $\mu$ , da seguinte forma:

$$e^{\beta D} = e^{\beta \mu} + e^{-\beta \mu}. \quad (2.48)$$

Como consequência da equação (2.48), é possível, através desse mapeamento, comparar resultados obtidos no modelo VSIF com resultados obtidos em modelos clássicos. Dessa forma, é esperado que ambos modelos sejam capazes de apresentar algum tipo de transição inversa.

### VSIF com réplicas

O modelo Vidro de Spin de Ising Fermiônico (VSIF) (MAGALHAES et al., 2010) tem sido bastante usado como base de estudo das transições inversas, por apresentar o congelamento inverso naturalmente. Este modelo é descrito pelo hamiltoniano

$$\hat{H} = - \sum_{ij} J_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \mu \sum_i \hat{n}_i, \quad (2.49)$$

em que os spins são escritos em termos de operadores fermiônicos de criação e destruição atuando sobre o espaço de Fock com quatro estados por sítio: dois magnéticos ( $|0 \downarrow \rangle$  e  $|\uparrow 0\rangle$ ) e dois não magnéticos ( $|\uparrow \downarrow\rangle$  e  $|00\rangle$ ). Os operadores de spin são definidos por

$\hat{S}^z = c_{\uparrow}^{\dagger}c_{\uparrow} - c_{\downarrow}^{\dagger}c_{\downarrow}$ , sendo que  $\hat{n}$  é o número de ocupação, dado por  $\hat{n} = c_{\uparrow}^{\dagger}c_{\uparrow} + c_{\downarrow}^{\dagger}c_{\downarrow}$ , em que  $c_{\sigma}^{\dagger}$  cria um férmion com spin  $\sigma$ , enquanto que  $c_{\sigma}$  destrói um férmion com spin  $\sigma$ , com  $\sigma = \uparrow$  ou  $\downarrow$  (MAGALHAES et al., 2010).

Na equação (2.49) a interação aleatória  $J_{ij}$  também segue uma distribuição de probabilidade semelhante ao proposto pelo modelo SK, e novamente, o termo  $J_{ij}$  introduz desordem e frustração ao problema, favorecendo a fase VS. Já a fase PM pode ser favorecida pelas flutuações de carga introduzidas pelo  $\mu$ .

De fato, o VSIF foi estudado na referência (MORAIS et al., 2012a) e mostra o surgimento espontâneo de congelamento inverso para uma região de  $\mu$ . Tal congelamento inverso está associado à diluição magnética, que significa o aumento de sítios duplamente ocupados, e à frustração introduzida pela interação aleatória  $J_{ij}$ .

### VSIF sem réplicas

Uma vez que as transições inversas tenham sido observadas em modelos VISF, tornou-se interessante buscar outros modelos capazes de apresentar tal comportamento, entretanto sem a complicação das réplicas para tratar a desordem. Nesse sentido, investigou-se o modelo de van Hemmen para VSIF (ZIMMER et al., 2012).

O modelo é descrito pelo Hamiltoniano

$$H = -\frac{2J_0}{N} \sum_{i \neq j} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - 2 \sum_{i \neq j} J_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - 2\Gamma \sum_i \hat{S}_i^x, \quad (2.50)$$

sendo as somas feitas sobre todos os  $N$  sítios. Os operadores de spin são definidos como operadores fermiônicos de criação ( $c_{i\sigma}^{\dagger}$ ) e destruição ( $c_{i\sigma}$ ),

$$\hat{S}_i^z = \frac{1}{2}[\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}] \quad \text{e} \quad \hat{S}_i^x = \frac{1}{2}[c_{i\uparrow}^{\dagger} - c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^{\dagger} - c_{i\uparrow}], \quad (2.51)$$

em que  $\hat{n}_{i\sigma} = c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i\sigma}$  fornece o número de férmions no sítio  $i$  com projeção de spin  $\sigma$  ( $\uparrow$  ou  $\downarrow$ ). Além disso,  $J_0$  representa a interação ferromagnética e  $\Gamma$  o campo transversal, cuja função é inverter quanticamente os momentos magnéticos do sistema.  $J_{ij}$  é o acoplamento responsável pela desordem e frustração do modelo (características fundamentais para existir a fase Vidro de Spin), dado por (HEMMEN, 1982; HEMMEN et al., 1983)

$$J_{ij} = \frac{J}{N} [\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i] \quad (2.52)$$

em que  $\xi$  e  $\eta$  são variáveis aleatórias sujeitas a diferentes distribuições de probabilidades: a bimodal (distribuição discreta) e a gaussiana (distribuição contínua). O problema VS

quântico permite um tratamento analítico, em que a função de partição pode ser avaliada no formalismo das integrais de caminho fermiônicas, apresentando uma solução exata de campo médio sem utilizar o método das réplicas para tratar a desordem.

Quando submetido a uma distribuição de probabilidade bimodal, nenhum tipo de transição reentrante foi observada. Porém o modelo apresenta uma fase mista (VS+FE) abaixo da fase VS em temperaturas mais baixas. Entretanto essa fase mista é ausente quando adotada a distribuição gaussiana para resolver as interações desordenadas. Esse fato sugere que a quantidade de interações frustradas geradas pela desordem obtida com a distribuição contínua é maior que com a discreta, conforme previamente discutido em (ZIMMER et al., 2012). Além disso, uma transição inversa PM/VS pode ser observada, para determinado valor de  $\mu$ . Portanto a desordem tratada seguindo uma distribuição gaussiana é capaz de apresentar congelamento inverso, desde que  $\Gamma = 0$ . Isso porque o processo quântico de *spin flipping*, governado pelo  $\Gamma$ , afeta as temperaturas críticas, reduzindo-as a um ponto crítico quântico, destruindo o CI (ZIMMER et al., 2012).

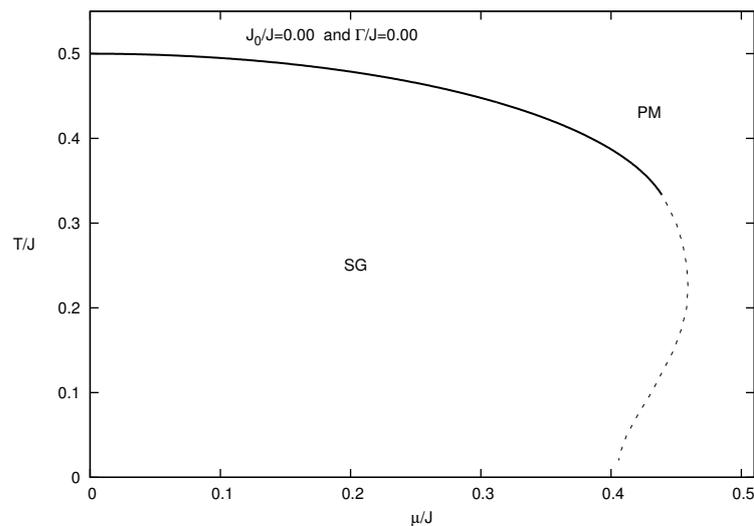


Figura 2.12: Diagrama de fases  $T/J$  versus  $\mu/J$  do modelo vH VSIF, para  $J_0/J = 0.00$  e  $\Gamma/J = 0.00$ , mostrando a transição reentrante em  $\mu = 0.43$  (ZIMMER et al., 2012).

Esse ponto crítico quântico (PCQ) quando existente, afeta mesmo o comportamento do sistema a temperaturas finitas. Um exemplo de material desordenado que apresenta um PCQ é o composto  $LiHo_xY_{1-x}F_4$  com spins de Ising, quando submetido a um campo transversal (WU et al., 1993).

Desde que o modelo VSIF permita o tratamento de cargas e spins ao mesmo nível, torna-se uma ferramenta útil na investigação de congelamento inverso quando efeitos quânticos são atribuídos ao sistema. Sabe-se que, em uma situação de semipreenchimento

da ocupação ( $\mu = 0$ ), o aumento do  $\Gamma$  pode modificar consideravelmente a termodinâmica do VSIF, tendendo a suprimir a fase VS, levando à temperatura de congelamento  $T_f$  a um PCQ em  $\Gamma_c$ . Assim, os estados não magnéticos em baixas temperaturas não são favorecidos. E, dessa forma,  $\Gamma$  tende a preservar a semiocupação até mesmo quando  $\mu$  aumenta. Esse efeito pode se tornar mais intenso com a redução da temperatura (MAGALHAES et al., 2008).

Como exposto neste capítulo, a presença da fase VS nos modelos capazes de apresentar estados de spin  $S = 0$ , pode ser relevante no estudo de transições inversas. No entanto estudar os efeitos de um campo aleatório sobre as transições inversas em algum modelo que não apresente a complicação das réplicas para tratar a desordem tornou-se instigante e, por isso, o objetivo deste trabalho. Com base nisso, os próximos capítulos trazem os modelos de van Hemmen propostos para investigar os diversos efeitos provenientes de campos aleatório, cristalino e transversal, em modelos clássico e fermiônico, respectivamente.

### 3 *Modelo clássico de van Hemmen com anisotropia de campo cristalino*

Neste capítulo será apresentado o modelo de van Hemmen (vH) clássico proposto no trabalho, bem como a análise e discussão dos resultados obtidos. O modelo de vH é analisado dentro de uma aproximação de campo médio, assumindo um sistema com três estados, ou seja,  $S = \pm 1, 0$ . Tal modelo conta com um campo de anisotropia cristalina e um campo aleatório, cujos respectivos efeitos sobre as transições de fases serão investigados.

O modelo conta, ainda, com três termos de desordem, dados pelas interações aleatórias  $(\xi, \eta)$  e pelo campo aleatório  $h_i$ , e serão tratadas seguindo a distribuição de probabilidade bimodal.

O Hamiltoniano que descreve o modelo é dado por

$$H = -\frac{J_0}{N} \sum_{i,j} S_i S_j - \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i + D \sum_{i=1}^N S_i^2. \quad (3.1)$$

Na Eq.(3.1)  $J_0$  representa o acoplamento ferromagnético,  $D$  é o campo de anisotropia cristalina e  $J_{ij}$  é o acoplamento desordenado responsável por introduzir desordem e frustração ao problema, dado por  $J_{ij} = \frac{J}{N} [\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i]$ .  $\xi_i$  e  $\eta_i$  são variáveis aleatórias sujeitas a uma distribuição de probabilidade bimodal

$$P(x_i) = \frac{1}{2} [\delta(x_i - 1) + \delta(x_i + 1)], \quad (3.2)$$

com  $x_i = \xi_i$  ou  $\eta_i$ .

O campo aleatório  $h_i$  também está sujeito ao tipo de desordem dada pela distribuição bimodal:

$$P(h_i) = p\delta(h_i + h_0) + (1 - p)\delta(h_i - h_0). \quad (3.3)$$

A função de partição, que contém todas as informações do sistema, pode ser encon-

trada através de

$$Z_N = Tr \exp(\beta H), \quad (3.4)$$

$$Z_N = Tr \exp \left[ \beta \frac{J_0}{N} \sum_{i,j} S_i S_j + \beta \frac{J}{N} \sum_{i,j} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i) S_i S_j + \beta h_i \sum_i S_i - \beta D \sum_{i=1}^N S_i^2 \right], \quad (3.5)$$

com  $\beta = 1/T$  ( $T$  sendo a temperatura). Os cálculos seguintes usados para as variáveis de spin são os mesmos já realizados no Capítulo 2 nas Equações (2.13) à (2.17).

Os termos quadráticos podem ser linearizados pelo uso da transformação de Hubbard-Stratonovich, conforme Eq. (2.18), de tal forma que

$$Z_N = Tr \left[ \exp \left[ \sum_i \left( -\frac{k_1}{2N} - \frac{k_2}{N} \xi_i \eta_i - k_4 \right) S_i^2 \right] \frac{N^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ -\frac{N}{2} (x^2 + y^2 + z^2 + v^2) \right] \right. \\ \left. \times \exp \sum_i \left[ \sqrt{k_1} x + \sqrt{k_2} y (\xi_i + \eta_i) + \sqrt{-k_2} z \xi_i + \sqrt{-k_2} v \eta_i \right] S_i \right] dx dy dz dv. \quad (3.6)$$

Organizando a equação (3.6) em termos de  $S_i$  e  $S_i^2$ :

$$Z_N = \frac{N^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ -\frac{N}{2} (x^2 + y^2 + z^2 + v^2) \right] \times Tr \exp \left[ \sum_{i=1}^N (L_i S_i^2 + K_i S_i) \right] dx dy dz dv, \quad (3.7)$$

de forma que

$$L_i = -\frac{k_1}{2N} - \frac{k_2}{N} \xi_i \eta_i - k_4 \quad (3.8)$$

e

$$K_i = \sqrt{k_1} x + \sqrt{k_2} ((\xi_i + \eta_i) y + \xi_i z + \eta_i v) + k_3. \quad (3.9)$$

Utilizando o método ponto de sela para resolver integrais em  $x$ ,  $y$ ,  $z$  e  $v$ ,

$$\int_{-\infty}^{\infty} c \exp(bf(x')) dx' \approx c \max_{-\infty < x' < \infty} \exp[bf(x')] \quad (3.10)$$

chega-se à expressão

$$Z_N = \frac{N^2}{4\pi^2} \max_{-\infty < x' < \infty} \left\{ \exp \left[ -\frac{N}{2} (x^2 + y^2 + z^2 + v^2) \right] \times Tr \exp \left[ \sum_{i=1}^N L_i S_i^2 + K_i S_i \right] \right\}. \quad (3.11)$$

Tomando as variáveis  $\xi_i$  e  $\eta_i$  como independentes, cada parcela do somatório em  $i$  se torna uma integral em  $\xi$  e  $\eta$  com peso  $P(\xi, \eta) = P(\xi)P(\eta)$ :

$$\sum_i F(\xi, \eta) \rightarrow N \int \int P(\xi, \eta) F(\xi, \eta) d\xi d\eta \quad (3.12)$$

ou ainda,

$$\langle (F(\xi, \eta)) \rangle = \int P(\xi, \eta) F(\xi, \eta) d\xi d\eta,$$

e então

$$Z_N = \frac{N^2}{4\pi^2} \max_{-\infty < x' < \infty} \left\{ \exp \left[ -\frac{N}{2}(x^2 + y^2 + z^2 + v^2) \right] + N \langle \text{Tr exp} \left[ \sum_{i=1}^N L_i S_i^2 + K_i S_i \right] \rangle \right\}. \quad (3.13)$$

Para calcular a energia livre, que é dada por

$$\beta f = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{N} \ln Z_N, \quad (3.14)$$

tomando  $\frac{1}{N} \ln Z_N$ :

$$\frac{1}{N} \ln Z_N = \frac{1}{N} \left[ \ln \left( \frac{N^2}{4\pi^2} \right) + \max_{-\infty < x' < \infty} \left\{ \exp \left[ -\frac{N}{2}(x^2 + y^2 + z^2 + v^2) \right] + N \langle \text{Tr exp} \left[ \sum_{i=1}^N L_i S_i^2 + K_i S_i \right] \rangle \right\} \right], \quad (3.15)$$

tem-se, no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ),

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{N} \ln \left( \frac{N^2}{4\pi^2} \right) \right\} \rightarrow 0 \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \left( -\frac{k_1}{2N} - \frac{k_2}{N} \xi_i \eta_i - k_4 \right) \rightarrow -k_4$$

sendo  $k_4 = \beta D$ . Dessa forma então, tem-se que

$$\frac{1}{N} \ln Z_N = -\frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2 + v^2) + \langle \ln [\text{Tr exp}[-\beta D S_i^2 + K_i S_i]] \rangle. \quad (3.16)$$

Tomando agora o traço sobre  $S_i$ , lembrando que se trata de um modelo de três estados e, portanto,  $S_i = 1, 0, -1$ , o último termo da equação (3.16) fica

$$\langle \langle \ln[1 + 2e^{-\beta D} \cosh K_i] \rangle \rangle,$$

e a energia livre por spin

$$\beta f = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2 + v^2) - \langle \ln[1 + 2e^{-\beta D} \cosh K_i] \rangle. \quad (3.17)$$

A magnetização  $m$  e os parâmetros de ordem vidro de spin  $q$  e magnetização, no ensemble canônico, são definidos por:

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle, \quad q_1 = \frac{1}{N} \sum_i \xi_i \langle S_i \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle \xi_i S_i \rangle, \quad q_2 = \frac{1}{N} \sum_i \eta_i \langle S_i \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle \eta_i S_i \rangle,$$

de onde obtém-se, a partir dos passos já definidos nas equações (2.32), (2.35) e (2.36), os primeiros resultados para magnetização e parâmetro de ordem vidro de spin, respectiva-

mente dados pelas equações (2.33), (2.37) e (2.38):

$$m = \int \int (\tanh K_i) P(\xi, \eta) d\xi d\eta.$$

$$q_1 = \int \int \xi (\tanh K_i) P(\xi, \eta) d\xi d\eta$$

$$q_2 = \int \int \eta (\tanh K_i) P(\xi, \eta) d\xi d\eta.$$

Porém é preciso eliminar a dependência de  $x, y, z$  e  $v$ . Para isso, toma-se o mínimo da energia livre com relação a cada uma dessas variáveis:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\beta f) = x - \sqrt{k_1}m = 0 \rightarrow x = \sqrt{k_1}m \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial y}(\beta f) = y - \sqrt{k_2}(q_1 + q_2) = 0 \rightarrow y = \sqrt{k_2}(q_1 + q_2) \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}(\beta f) = z - j\sqrt{k_2}q_1 = 0 \rightarrow z = j\sqrt{k_2}q_1 \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial}{\partial v}(\beta f) = v - j\sqrt{k_2}q_2 = 0 \rightarrow v = j\sqrt{k_2}q_2. \quad (3.21)$$

Substituindo os valores encontrados na equação (3.17):

$$\beta f = \frac{1}{2}(k_1 m^2 + k_2 2q_1 q_2) - \langle \ln[1 + 2e^{-\beta D} \cosh K_i] \rangle,$$

e considerando que a energia será mínima se  $q_1 = q_2 = q$ , então

$$\beta f = \frac{1}{2}(k_1 m^2 + 2k_2 q^2) - \langle \ln[1 + 2e^{-\beta D} \cosh K'] \rangle \quad (3.22)$$

com  $K' = k_1 m + k_2(\xi + \eta)q + k_3$ .

Após todos os procedimentos descritos acima, a equação da energia livre apresenta o seguinte resultado:

$$\beta f = \frac{1}{2}(k_1 m^2 + 2k_2 q^2) - \langle \langle \ln[1 + 2e^{-\beta D} \cosh K'] \rangle \rangle, \quad (3.23)$$

assim como as equações da magnetização e parâmetro de ordem vidro de spin, que podem ser encontradas, respectivamente, a partir de

$$\frac{\partial}{\partial m} \beta f = 0 \quad \frac{\partial}{\partial q} \beta f = 0,$$

de tal forma que

$$m = \langle \langle \langle \frac{2e^{-\beta D} \sinh[\beta(J_0 m + J(\xi + \eta)q + h_i)]}{1 + 2e^{-\beta D} \cosh[\beta(J_0 m + J(\xi + \eta)q + h_i)]} \rangle \rangle \rangle, \quad (3.24)$$

$$q = \frac{1}{2} \langle \langle \langle (\xi + \eta) \frac{2e^{-\beta D} \sinh[\beta(J_0 m + J(\xi + \eta)q + h_i)]}{1 + 2e^{-\beta D} \cosh[\beta(J_0 m + J(\xi + \eta)q + h_i)]} \rangle \rangle \rangle. \quad (3.25)$$

Além disso, outra quantidade termodinâmica pode ser obtida através da derivada da energia livre:

$$Q = \langle \langle \langle S_i^2 \rangle \rangle \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial f}{\partial D},$$

isto é,

$$Q = \langle \langle \langle \frac{2e^{-\beta D} \cosh[\beta(J_0 m + J(\xi + \eta)q + h_i)]}{1 + 2e^{-\beta D} \cosh[\beta(J_0 m + J(\xi + \eta)q + h_i)]} \rangle \rangle \rangle. \quad (3.26)$$

A expressão  $Q$  equivale a uma ocupação média no modelo de três estados, o que poderia indicar se os spins em cada sítio são magneticamente mais propensos ao acoplamento com outros spins ou com o  $h_i$ .

### 3.1 Cálculo da média configuracional sobre as variáveis $\xi$ e $\eta$

Para mostrar como é realizada a média configuracional sobre as variáveis independentes  $\xi$  e  $\eta$ , parte-se da distribuição de probabilidade bimodal (equação (3.2))

$$P(\xi, \eta) = P(\xi)P(\eta) = \left\{ \frac{1}{2} [\delta(\xi - 1) + \delta(\xi + 1)] \right\} \left\{ \frac{1}{2} [\delta(\eta - 1) + \delta(\eta + 1)] \right\}, \quad (3.27)$$

de forma que as variáveis  $\xi$  e  $\eta$ , quando utilizadas na distribuição bimodal, podem assumir valores  $+1$  e  $-1$ , o que torna o cálculo analítico possível. Sendo assim, as equações que representam a energia livre, a magnetização e o parâmetro de ordem vidro de spin tornam-se, respectivamente:

$$\beta f = \frac{1}{2} \beta J_0 m^2 + \beta J q^2 - \left\langle \frac{1}{4} \int \int \ln \{ 1 + 2e^{-\beta D} \cosh \beta (J_0 m + J(\xi + \eta)q + h_i) \} \right. \\ \left. [\delta(\xi - 1) + \delta(\xi + 1)] [\delta(\eta - 1) + \delta(\eta + 1)] d\xi d\eta \right\rangle_{h_i}, \quad (3.28)$$

$$m = \left\langle \frac{1}{4} \int \int \frac{2e^{-\beta D} \sinh \beta (J_0 m + J(\xi + \eta)q + h_i)}{1 + 2e^{-\beta D} \cosh \beta (J_0 m + J(\xi + \eta)q + h_i)} \right. \\ \left. [\delta(\xi - 1) + \delta(\xi + 1)] [\delta(\eta - 1) + \delta(\eta + 1)] d\xi d\eta \right\rangle_{h_i}, \quad (3.29)$$

$$q = \left\langle \frac{1}{8} \int \int (\xi + \eta) \frac{2e^{-\beta D} \sinh \beta (J_0 m + J(\xi + \eta)q + h_i)}{1 + 2e^{-\beta D} \cosh \beta (J_0 m + J(\xi + \eta)q + h_i)} \right. \\ \left. [\delta(\xi - 1) + \delta(\xi + 1)][\delta(\eta - 1) + \delta(\eta + 1)] d\xi d\eta \right\rangle_{h_i}. \quad (3.30)$$

Usando a propriedade da função delta de Dirac

$$\int f(x) \delta(x - x_0) dx = f(x_0), \quad (3.31)$$

tem-se como resultado analítico para a média sobre a desordem nas equações (3.17), (3.24) e (3.25):

$$\beta f = \frac{\beta J_0 m^2}{2} + \beta J q^2 - \left\langle \frac{1}{4} \left[ \ln \{1 + 2e^{-\beta D} \cosh \beta (J_0 m + 2Jq + h_i)\} \right. \right. \\ \left. \left. + 2 \ln \{1 + 2e^{-\beta D} \cosh \beta (J_0 m + h_i)\} + \ln \{1 + 2e^{-\beta D} \cosh \beta (J_0 m - 2Jq + h_i)\} \right] \right\rangle_{h_i}, \quad (3.32)$$

$$m = \left\langle \frac{1}{2} \left[ \frac{e^{-\beta D} \sinh \beta (J_0 m + 2Jq + h_i)}{1 + 2e^{-\beta D} \cosh \beta (J_0 m + 2Jq + h_i)} + \frac{2e^{-\beta D} \sinh \beta (J_0 m + h_i)}{1 + 2e^{-\beta D} \cosh \beta (J_0 m + h_i)} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{e^{-\beta D} \sinh \beta (J_0 m - 2Jq + h_i)}{1 + 2e^{-\beta D} \cosh \beta (J_0 m - 2Jq + h_i)} \right] \right\rangle_{h_i}, \quad (3.33)$$

$$q = \left\langle \frac{1}{2} \left[ \frac{e^{-\beta D} \sinh \beta (J_0 m + 2Jq + h_i)}{1 + 2e^{-\beta D} \cosh \beta (J_0 m + 2Jq + h_i)} - \frac{e^{-\beta D} \sinh \beta (J_0 m - 2Jq + h_i)}{1 + 2e^{-\beta D} \cosh \beta (J_0 m - 2Jq + h_i)} \right] \right\rangle_{h_i}. \quad (3.34)$$

Entretanto ainda é necessário realizar a média sobre o campo aleatório  $h_i$ . Essa, por sua vez, também pode ser feita utilizando a distribuição de probabilidades discreta, cuja solução será apresentada na seção seguinte.

## 3.2 Campo aleatório $h_i$ seguindo uma distribuição bimodal

Partindo da distribuição bimodal dada pela equação (3.3), segue-se o mesmo procedimento com a função delta de Dirac (3.31) e, dessa forma, chega-se às equações para a energia livre, magnetização e parâmetro de ordem vidro de spin, visto que, com o uso

dessa distribuição, o campo aleatório  $h_i$  pode assumir valores  $+h_0$  e  $-h_0$ ,

$$\begin{aligned} \beta f = & \frac{\beta J_0 m^2}{2} + \beta J q^2 - \frac{1}{4} p \left[ \ln[1 + 2 \exp^{-\beta D} \cosh \beta (J_0 m + 2Jq + h_0)] \right. \\ & \left. + 2 \ln[1 + 2 \exp^{-\beta D} \cosh \beta (J_0 m + h_0)] + \ln[1 + 2 \exp^{-\beta D} \cosh \beta (J_0 m - 2Jq + h_0)] \right] \\ & - \frac{1}{4} (1-p) \left[ \ln[1 + 2 \exp^{-\beta D} \cosh \beta (J_0 m + 2Jq - h_0)] \right. \\ & \left. + 2 \ln[1 + 2 \exp^{-\beta D} \cosh \beta (J_0 m - h_0)] + \ln[1 + 2 \exp^{-\beta D} \cosh \beta (J_0 m - 2Jq - h_0)] \right] \end{aligned} \quad (3.35)$$

$$\begin{aligned} m = & \frac{1}{2} p \left[ \frac{\exp^{-\beta D} \sinh \beta [J_0 m + 2Jq + h_0]}{1 + 2 \exp^{-\beta D} \cosh \beta [J_0 m + 2Jq + h_0]} + \frac{2 \exp^{-\beta D} \sinh \beta [J_0 m + h_0]}{1 + 2 \exp^{-\beta D} \cosh \beta [J_0 m + h_0]} \right. \\ & \left. + \frac{\exp^{-\beta D} \sinh \beta [J_0 m - 2Jq + h_0]}{1 + 2 \exp^{-\beta D} \cosh \beta [J_0 m - 2Jq + h_0]} \right] + \frac{1}{2} (1-p) \left[ \frac{\exp^{-\beta D} \sinh \beta [J_0 m + 2Jq - h_0]}{1 + 2 \exp^{-\beta D} \cosh \beta [J_0 m + 2Jq - h_0]} + \right. \\ & \left. \frac{2 \exp^{-\beta D} \sinh \beta [J_0 m - h_0]}{1 + 2 \exp^{-\beta D} \cosh \beta [J_0 m - h_0]} + \frac{\exp^{-\beta D} \sinh \beta [J_0 m - 2Jq - h_0]}{1 + 2 \exp^{-\beta D} \cosh \beta [J_0 m - 2Jq - h_0]} \right] \end{aligned} \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned} q = & \frac{1}{2} p \left[ \frac{\exp^{-\beta D} \sinh \beta [J_0 m + 2Jq + h_0]}{1 + 2 \exp^{-\beta D} \cosh \beta [J_0 m + 2Jq + h_0]} - \frac{\exp^{-\beta D} \sinh \beta [J_0 m - 2Jq + h_0]}{1 + 2 \exp^{-\beta D} \cosh \beta [J_0 m - 2Jq + h_0]} \right] + \\ & \frac{1}{2} (1-p) \left[ \frac{\exp^{-\beta D} \sinh \beta [J_0 m + 2Jq - h_0]}{1 + 2 \exp^{-\beta D} \cosh \beta [J_0 m + 2Jq - h_0]} - \frac{\exp^{-\beta D} \sinh \beta [J_0 m - 2Jq - h_0]}{1 + 2 \exp^{-\beta D} \cosh \beta [J_0 m - 2Jq - h_0]} \right] \end{aligned} \quad (3.37)$$

### 3.3 Resultados

Os resultados obtidos para o modelo recém descrito serão apresentados a seguir. Uma vez que as fases magnéticas podem ser definidas pelos parâmetros de ordem, a tabela 3.1 traz uma breve caracterização das fases envolvidas no sistema:

Fase Magnética	Parâmetro de Ordem VS	Magnetização	Orientação dos spins
Vidro de Spin (VS)	$q \neq 0$	$m = 0$	Congelados em direções aleatórias abaixo de $T_f$ .
Ferromagnética (FE)	$q = 0$	$m \neq 0$	Alinhados no mesmo sentido.
Paramagnética (PM)	$q = 0$	$m = 0$	Aleatoriamente distribuídos devido às flutuações térmicas.
Mista (VS+FE)	$q \neq 0$	$m \neq 0$	Misto de spins alinhados no mesmo sentido e congelados em direções aleatórias.

Tabela 3.1: Resumo sobre as características de cada fase envolvida no sistema.

De acordo com o esquema mostrado na tabela acima, a fase vidro de spin (VS) acontece para temperaturas suficientemente baixas, em que, abaixo de uma certa temperatura de transição ( $T_f$ ), os spins estão congelados em direções aleatórias com magnetização nula. Essa fase é caracterizada pelo parâmetro de ordem  $q > 0$  e magnetização  $m = 0$ . Na fase ferromagnética, os spins estão orientados em um mesmo sentido e uma magnetização espontânea pode ser observada. Nesse caso, a magnetização assume valores diferentes de zero ( $m \neq 0$ ), mas o parâmetro de ordem  $q = 0$ . No caso da fase paramagnética (PM), os spins estão aleatoriamente orientados devido a flutuações térmicas e a magnetização só é observada se um campo magnético externo for aplicado. Sendo assim tanto a magnetização quanto o parâmetro de ordem vidro de spin são iguais a zero, ou seja,  $m = 0$  e  $q = 0$ . Além disso, uma outra fase pode ser observada quando usada a distribuição bimodal para tratar a desordem  $J_{ij}$ : uma fase mista, em que tanto  $q \neq 0$  quanto  $m \neq 0$ . Essa fase mista, que representa as fases VS+FE, é encontrada abaixo da fase VS na ausência ou em valores suficientemente baixos de  $h_0$ .

Todos os resultados foram gerados numericamente através de um programa iterativo, e as temperaturas críticas também foram testadas via expansão de Landau (ver apêndice A). Outra informação relevante sobre os resultados exibidos a seguir é que as transições de segunda ordem são representadas por linhas cheias, enquanto as transições de primeira ordem, por linhas tracejadas. Também assume-se o valor de  $J = 1$  para todos os casos.

Além disso, para o campo aleatório sujeito à distribuição bimodal, assume-se igual probabilidade de ocorrência, ou seja,  $p = 1/2$  (seguindo equação 3.3), de forma que tem-se, então,  $\pm h_0$ .

### 3.3.1 $J_0 \neq 0$

Em  $T \neq 0$ , as equações (3.35), (3.36) e (3.37) foram usadas para obter a grande parte dos resultados apresentados a seguir. Primeiramente, o resultado do modelo originalmente proposto por van Hemmen (HEMMEN, 1982) foi reproduzido a fim de se tomar como base para o estudo dos possíveis efeitos que os campos  $D$  e  $h_0$  podem ter sobre as transições de fases. Conforme exibido na figura 3.1, painel (a), o diagrama de fases  $T/J$  x  $J_0/J$  com  $h_0 = 0$  e  $D = 0$ , uma fase PM é encontrada em altas temperaturas, seguida de uma transição de segunda ordem para a fase  $VS_1$ , em baixos valores de  $J_0$ , ou para a fase FE, em altos valores de  $J_0$ . Essa fase  $VS_1$  indica  $q \rightarrow 1/2$  quando  $T/J \rightarrow 0$ . Em  $J_0/J = 1.0$ , há o surgimento de um ponto bicrítico entre as fases PM,  $VS_1$  e FE. Conforme a temperatura é reduzida, há uma transição entre as fases  $VS_1$ /FE em valores intermediários de  $J_0$ . Essa transição é de primeira ordem, e nesse caso, analisa-se a energia livre do sistema, conforme painel b) da figura abaixo. Além disso, a fase mista, em que  $q \neq 0$  e  $m \neq 0$ , é encontrada no diagrama  $T/J$  x  $J_0/J$  abaixo da fase  $VS_1$ , apresentando um *critical end point* em  $T = 0.258$  e  $J_0/J = 0.75$ .

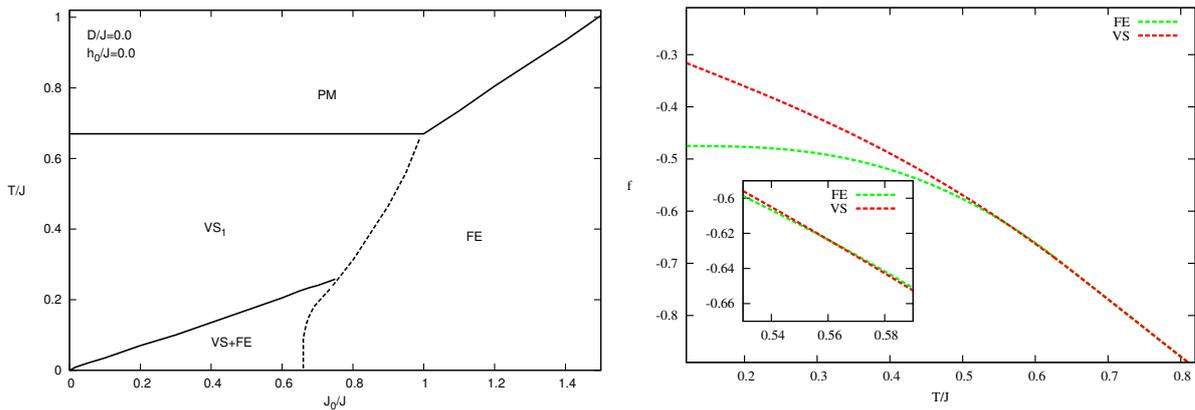


Figura 3.1: Diagrama de fases da temperatura versus  $J_0$ , com campo aleatório  $h_0 = 0.0$ , considerando o campo cristalino  $D = 0$ . Linhas contínuas e tracejadas representam as transições de segunda e primeira ordem, respectivamente.

Agora, assume-se que somente o campo cristalino  $D$  está ativado, mantendo  $h_0 = 0$ . A fase PM em altas temperaturas sofre uma transição de segunda ordem para a fase VS ou para a fase FE, dependendo do valor de  $J_0$ . Pode se observar que a temperatura do

ponto bicrítico é reduzida ( $T/J = 0.635$ ). A fase mista ainda é observada no diagrama  $T \times J_0$  para  $D = 0.1$ , como mostra a figura 3.2, com *critical end point* em  $T/J = 0.205$  e  $J_0/J = 0.715$ . Porém, o mesmo não acontece quando há um pequeno aumento do valor de  $D$ , como  $D = 0.15$ , por exemplo. De acordo com a figura 3.3, a presença do campo cristalino tende a suprimir a fase mista.

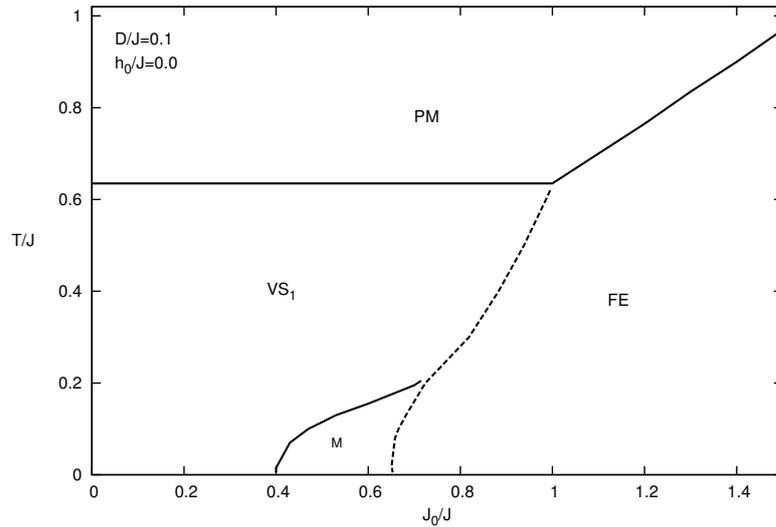


Figura 3.2: Diagrama de fases  $T/J$  versus  $J_0/J$  para  $D/J = 0.1$ . A fase mista ( $M=VS+FE$ ) ainda pode ser observada abaixo da fase VS.

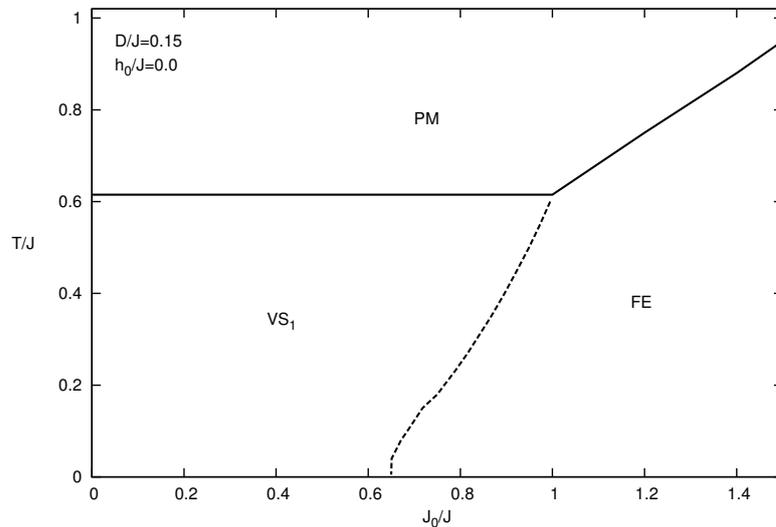


Figura 3.3: Diagrama de fases  $T/J$  versus  $J_0/J$  para  $D/J = 0.15$ . Um pequeno aumento no valor de  $D$  é suficiente para cancelar a fase mista abaixo da VS.

Aumentando um pouco mais o valor do campo cristalino, como  $D/J = 0.48$ , a transição PM/VS sofre visíveis alterações, como a redução da temperatura de transição e,

principalmente, a natureza dessas linhas, que vêm a ser de primeira ordem, como mostra a figura 3.4. A temperatura da transição PM/FE também é reduzida, porém a natureza da transição permanece de segunda ordem.

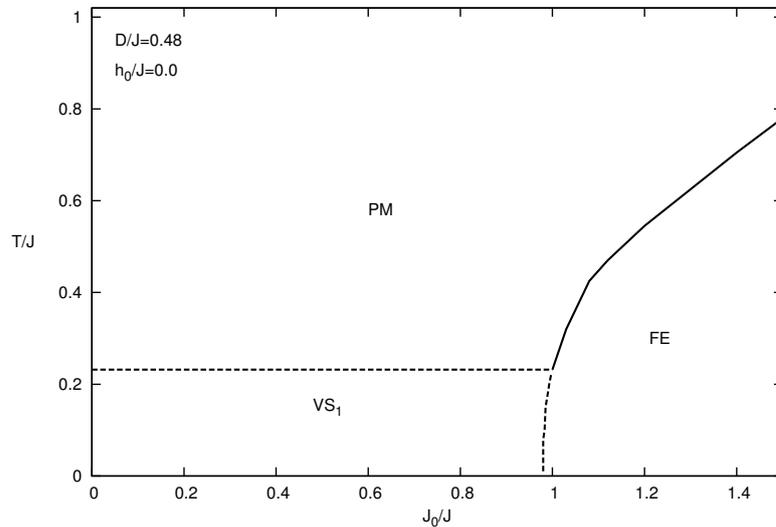


Figura 3.4: Diagrama de fases  $T/J$  versus  $J_0/J$  considerando  $D/J = 0.48$ .

Agora, desliga-se o campo cristalino  $D$  e ativa-se o campo aleatório  $h_0$ . Instantaneamente, percebe-se que a presença do  $h_0$  tende a suprimir a fase mista, que antes ocupava um espaço considerável no diagrama de fases. As figuras 3.5 e 3.6 exibem diagramas de fases para dois valores distintos de campo aleatório:  $h_0/J = 0.1$  e  $h_0/J = 0.2$ , respectivamente. Além de destruir a fase mista, o aumento do  $h_0$  também vai reduzindo a temperatura do ponto bicrítico, que para  $h_0/J = 0.1$  ocorre em  $T/J = 0.66$  e para  $h_0/J = 0.2$  ocorre em  $T/J = 0.64$ , como pode ser observado nos próximos diagramas  $T \times J_0$ .

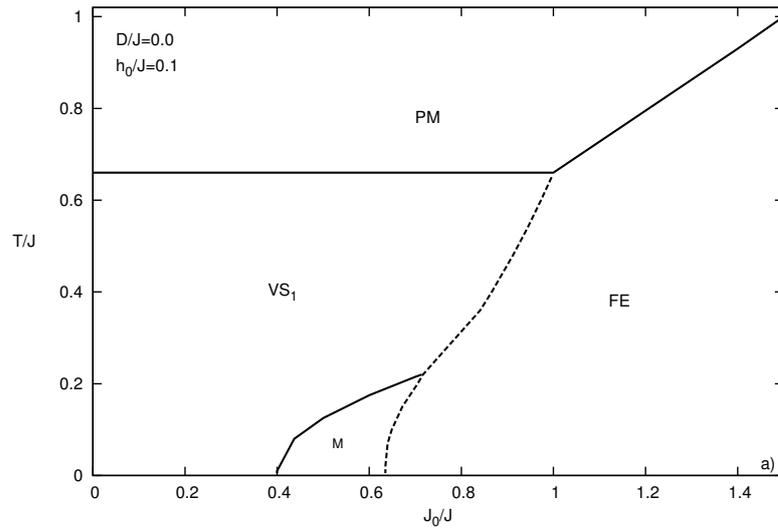


Figura 3.5: Diagrama de fases  $T/J$  versus  $J_0/J$ , com campo aleatório  $h_0/J = 0.1$ , ponto bicrítico em  $T/J = 0.66$ .

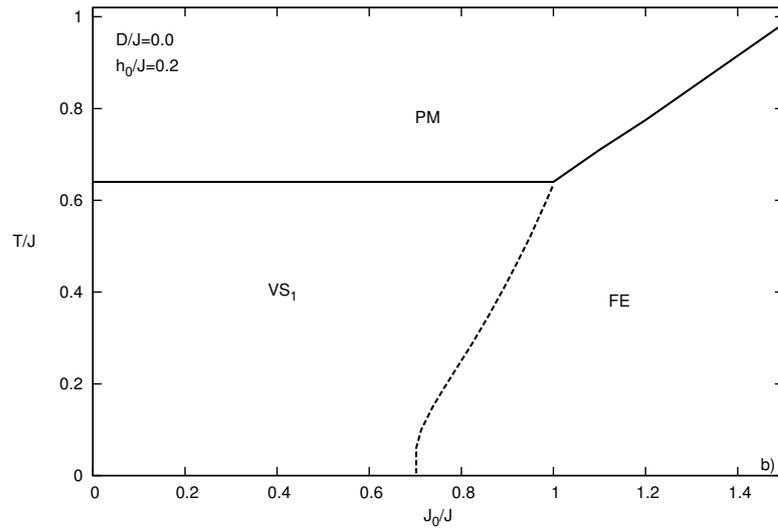


Figura 3.6: Diagrama de fases  $T/J$  versus  $J_0/J$ , com campo aleatório  $h_0/J = 0.2$ , ponto bicrítico em  $T/J = 0.64$ .

Entretanto quando o valor do campo aleatório aumenta consideravelmente, como por exemplo  $h_0/J = 0.45$ , claramente se observa a redução do ponto bicrítico ( $T/J = 0.38$ ), com a transição PM/ $VS_1$  sendo de primeira ordem.

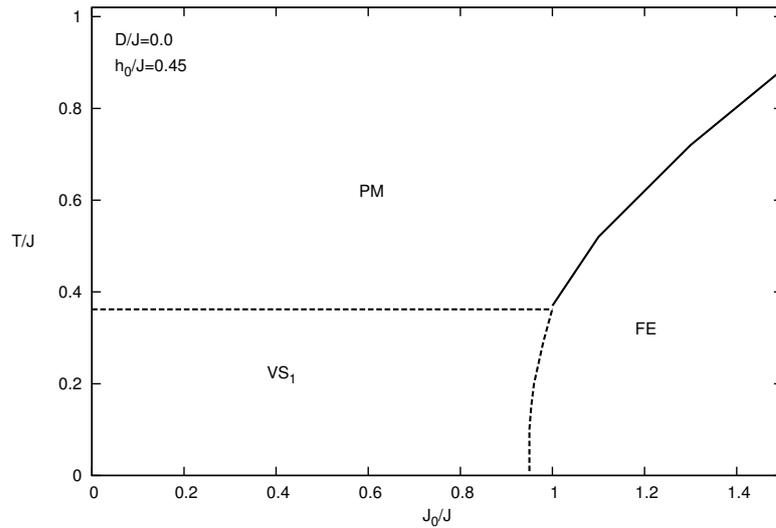


Figura 3.7: Diagrama de fases  $T/J$  versus  $J_0/J$ , com campo aleatório  $h_0/J = 0.45$ .

Feita a análise individual da influência dos dois campos presentes no modelo nos diagramas  $T/J \times J_0/J$ , parte-se, então, para o estudo dos efeitos conjugados de  $D$  e  $h_0$ . A figura 3.8 mostra os campos  $D$  e  $h_0$  agindo ao mesmo tempo no diagrama de fases  $T/J \times J_0/J$ . Observa-se que a temperatura da transição PM/VS é reduzida em comparação ao que foi encontrado nos casos  $D/J = 0$  e  $h_0/J = 0.2$  da figura 3.6, ou  $D/J = 0.1$  e  $h_0/J = 0$ , como na figura 3.2. Importante salientar que, embora ambos os campos tenham sido testados com valores baixos, no momento em que os dois estão ‘ligados’, a fase mista não é encontrada.

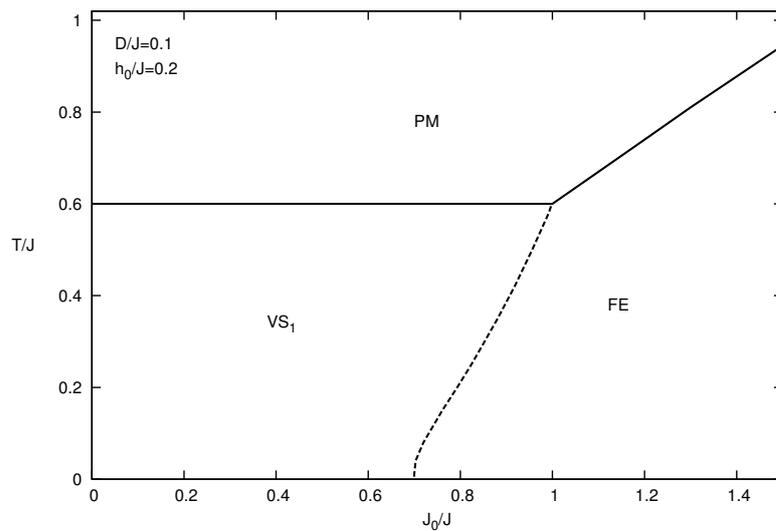


Figura 3.8: Diagrama de fases  $T/J \times J_0/J$ , com campo cristalino  $D/J = 0.1$  e campo aleatório  $h_0/J = 0.2$ .

### 3.3.2 $J_0 = 0$

A figura 3.9 exhibe o diagrama de fases  $D \times h_0$  para o estado fundamental, ou seja, em temperatura zero. Com o auxílio das Equações (3.26) e (3.35) é possível obter uma interpretação mais clara sobre as fases magnéticas encontradas em  $T = 0$ , que são:

i) Fase não magnética ( $NM$ ), em que o parâmetro de ordem VS  $q = 0$ , ocorrendo para valores de  $h_0$  suficientemente baixos e valores de  $D$  relativamente altos. Nesse caso, a ocupação média dos spins  $\langle S_i^2 \rangle = 0$ , tal que  $Q = 0$ , o que favorece os estados não magnéticos  $S_i = 0$ .

ii) Fase  $VS_1$ , ocorre para pequenos valores de  $h_0$  e  $D$  com  $q = 1/2$ .

iii) Fase  $VS_2$ , ocorre em um determinado intervalo de  $h_0$  e  $D$ , quando o parâmetro de ordem  $q = 1/4$ .

iv) Fase  $PM$ , com  $q = 0$  e  $Q = 1$ . Ao contrário da fase  $NM$ , ocorre para valores altos de  $h_0$  e valores de  $D$  suficientemente baixos. Nessa fase,  $h_0$  tende a acoplar com os spins  $S = \pm 1$ , ou seja, aos estados magnéticos, que são favorecidos devido ao baixo valor do  $D$ . Como o campo aleatório só pode assumir valores  $\pm h_0$ , isso impede qualquer ordem de longo alcance, incluindo a fase VS.

A análise da variação da energia livre em  $T = 0$  de cada fase foi fundamental para determinar as fases desse diagrama, evidenciando a fase VS, que se desdobra em duas soluções com o aumento de  $h_0$ . Para tal, foram utilizadas as seguintes expressões:

$$\Delta f_{NM} = 0 \quad [q = 0; Q = 0] \quad (3.38)$$

$$\Delta f_{PM} = \frac{D - h_0}{2} \quad [q = 0; Q = 1] \quad (3.39)$$

$$\Delta f_{VS_1} = \frac{D - 1/2}{2} \quad [q = 1/2; Q = 1/2 \text{ ou } Q = 1] \quad (3.40)$$

$$\Delta f_{VS_2} = \frac{1}{4}(D - h_0 - 1/4) \quad [q = 1/4; Q = 1/4 \text{ ou } Q = 3/4]. \quad (3.41)$$

Dessa forma as linhas das transições de primeira ordem são obtidas através de:

$$\Delta f_{NM} = \Delta f_{VS_1} \quad [D = 1/2]$$

$$\Delta f_{VS_1} = \Delta f_{PM} \quad [h_0 = 1/2]$$

$$\Delta f_{PM} = \Delta f_{VS_2} \quad [D = h_0 - 1/4]$$

$$\Delta f_{VS_2} = \Delta f_{NM} \quad [D = h_0 + 1/4]$$

$$\Delta f_{VS_1} = \Delta f_{VS_2} \quad [D = -h_0 + 3/4].$$

Essa análise pode ser melhor compreendida na tabela 3.2, que mostra as fases com seus respectivos valores de  $q$  e de  $Q$ .

Fases	m	q	Q	
VS <sub>1</sub>	0	1/2	1	( $D < h_0$ )
VS <sub>1</sub>	0	1/2	1/2	( $D > h_0$ )
VS <sub>2</sub>	0	1/4	3/4	( $D < h_0$ )
VS <sub>2</sub>	0	1/4	1/4	( $D > h_0$ )
NM	0	0	0	
PM	0	0	1	

Tabela 3.2: Fases, Parâmetros de ordem e  $Q = \langle S_i^2 \rangle$

Portanto a fase VS é dividida em duas fases distintas ( $VS_1$  e  $VS_2$ ), separadas por um comportamento descontínuo do parâmetro  $q$ . A fase  $VS_1$  é predominante para valores de  $h_0/J$  e  $D/J < 1/2$ , enquanto que a fase  $VS_2$  predomina em um certo intervalo de  $h_0 > D$  e  $D > h_0$ , quando a ocupação média dos spins  $Q = 3/4$  e  $Q = 1/4$ , respectivamente. O caso em que  $D/J = h_0/J$  está representado no diagrama de fase como a linha cinza pontilhada, refletindo a competição entre  $D$  e  $h_0$  na ocupação média dos spins nas fases VS.

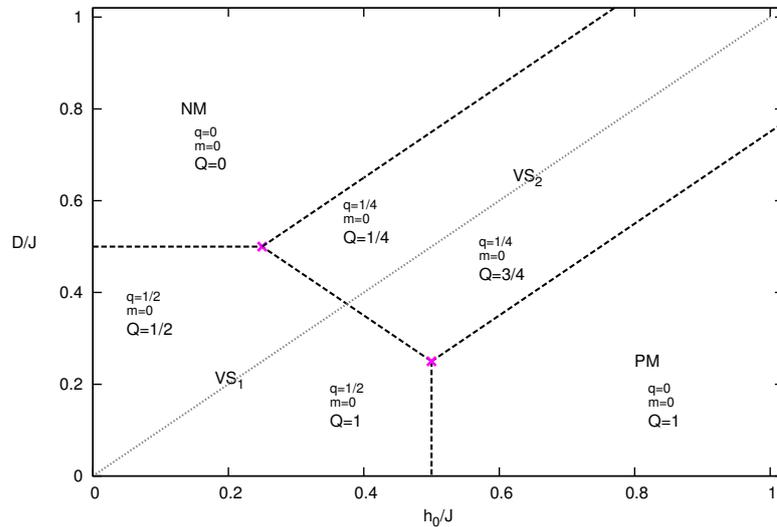


Figura 3.9: Diagrama de fases à temperatura zero. As fases  $NM$ ,  $VS_1$ ,  $VS_2$  e  $PM$  são separadas por linhas de transições de primeira ordem. A linha cinza representa a ocupação média dos spins nos sítios.

A figura 3.10 exibe o diagrama  $T/J \times D/J$  considerando  $J_0 = 0$ . Além disso, no primeiro momento, assume-se  $h_0 = 0$ . Percebe-se uma fase PM predominante a altas temperaturas.

A medida que o valor de  $D$  vai aumentando, a temperatura da transição entre as fases PM e VS vai diminuindo, até um ponto tricrítico. A emergência desse ponto tricrítico em  $T/J = 0.32$  ocorre na transição entre as fases PM e VS, sendo marcada pela mudança no tipo de transição que, de segunda ordem, passa a ser de primeira ordem. No mesmo diagrama, ainda é possível observar as linhas espinodais interna e externa dessa transição.

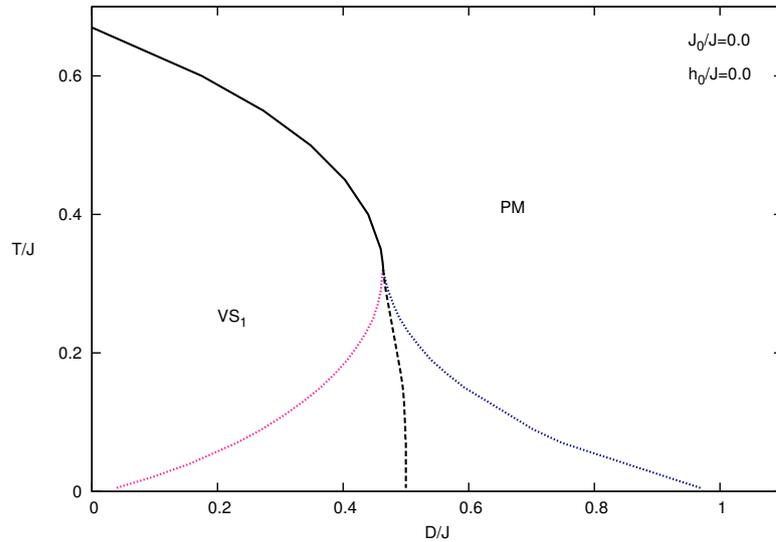


Figura 3.10: Diagrama de fases da temperatura  $T/J$  versus o campo cristalino  $D/J$ , na ausência de campo aleatório, considerando  $J_0/J = 0.0$ . As linhas rosa e azul representam as espinodais interna e externa, respectivamente.

As linhas que indicam as transições de primeira ordem foram obtidas através da comparação entre as energias livres do sistema, conforme mostra a figura 3.11. Escolhendo e fixando um ponto da temperatura de transição de primeira ordem, como por exemplo  $T = 0.1$ , pode-se analisar o aparecimento das curvas de histerese, formadas pelos diferentes valores iniciais do parâmetro  $q$  (painel a), bem como o cruzamento dessas linhas, indicando o ponto real da transição de primeira ordem (painel b).

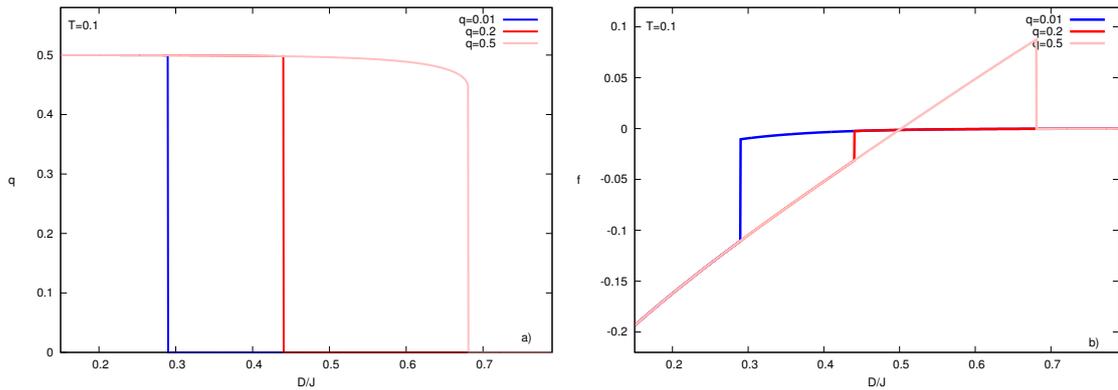


Figura 3.11: a) Parâmetro de ordem VS  $q$  e b) energia livre  $f$  versus o campo cristalino  $D/J$  para  $J_0/J = 0$ ,  $h_0/J = 0.0$  e temperatura fixa  $T/J = 0.1$ .

No momento em que o campo aleatório é acionado ( $h_0 \neq 0$ ), uma visível redução do ponto tricrítico do sistema é observada. Em  $h_0/J = 0.3$ , por exemplo, o ponto tricrítico acontece em  $T/J = 0.175$ . Além disso, conforme o valor do campo aleatório aumenta, uma outra solução da fase VS começa a emergir no diagrama de fases. Essa nova fase  $VS_2$  ( $q \rightarrow 1/4$ , anteriormente encontrada no diagrama  $D/J \times h_0/J$  em  $T = 0$ ), pode ser vista na figura 3.12 ou ainda, de forma mais clara, na figura 3.13, em que o gráfico do parâmetro de ordem  $q$  versus o campo  $D/J$  mostra as curvas espinodais do caso (a) e, também, a energia livre indicando os pontos reais das transições (b). O diagrama mostra, ainda, o ponto crítico ordenado da transição entre  $VS_1/VS_2$ , em  $T/J = 0.12$ .

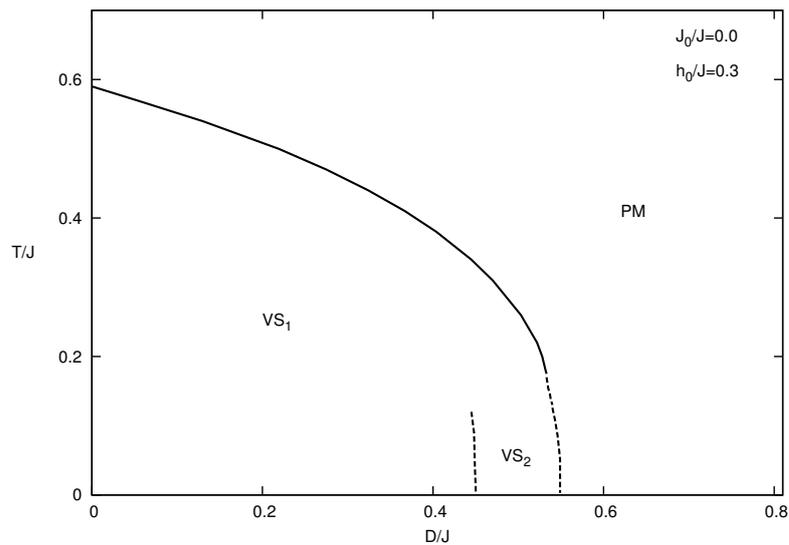


Figura 3.12: Diagrama de fases da temperatura versus o campo cristalino, com campo aleatório  $h_0/J = 0.3$ , considerando,  $J_0/J = 0$ . Ponto crítico ordenado observado em  $T/J = 0.12$  e ponto tricrítico em  $T/J = 0.175$ .

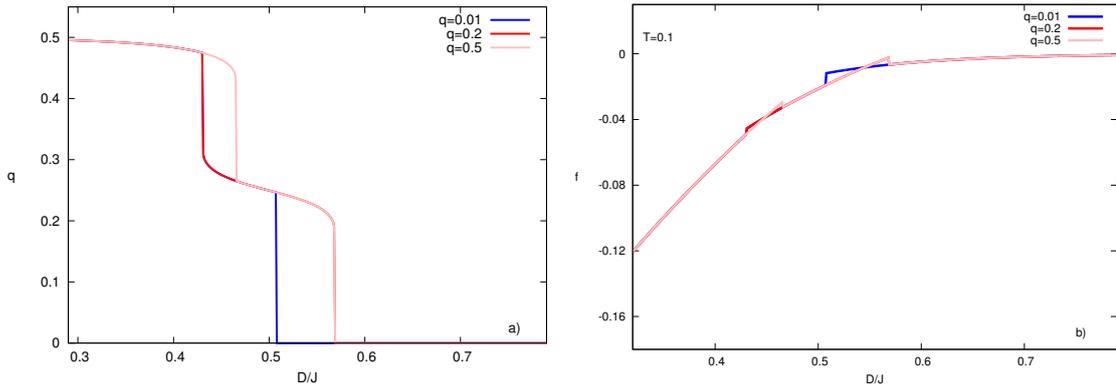


Figura 3.13: a) Parâmetro de ordem  $q$  e b) energia livre *versus* o campo cristalino  $D/J$ , quando  $h_0/J = 0.3$  e  $T/J = 0.1$ .

A figura 3.14 exibe um diagrama de fases  $T/J \times D/J$  para  $h_0/J = 0.5$ . A transição  $PM/VS_1$  de segunda ordem é suprimida, dando lugar a uma transição de primeira ordem em baixas temperaturas. Observa-se que a fase  $VS_2$  ganha um espaço bem maior no diagrama de fases, conforme o valor do campo cristalino aumenta. O interessante é que a transição  $PM/VS_2$  de segunda ordem apresenta dois pontos tricríticos, que ocorrem em  $D/J = 0.28$  com  $T/J = 0.12$  e em  $D/J = 0.72$  com  $T/J = 0.168$ . O surgimento destes dois pontos tricríticos pode estar diretamente relacionado com a presença do campo aleatório, que em valores consideravelmente altos de  $h_0$ , é capaz de apresentar essa peculiaridade na transição PM/VS.

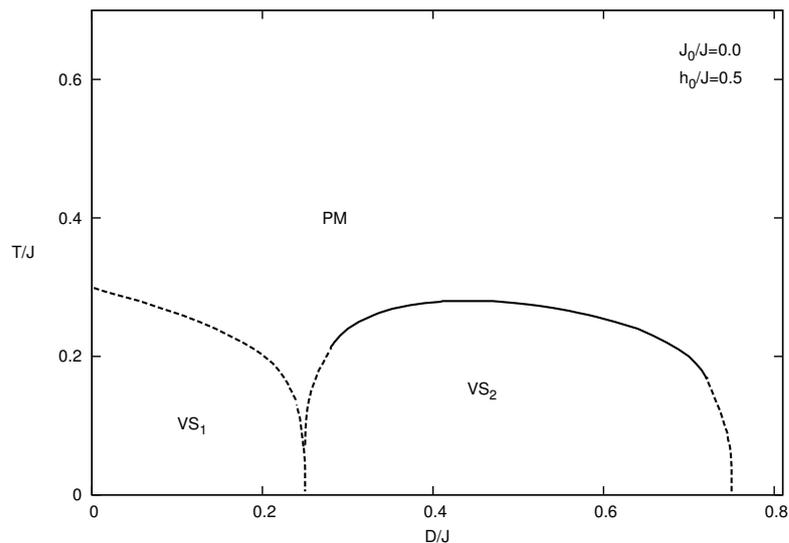


Figura 3.14: Diagrama de fases  $T/J$  *versus*  $D/J$ , com  $h_0/J = 0.5$ . O aparecimento de dois pontos tricríticos na transição  $PM/VS_2$  pode ser um efeito peculiar da presença do campo aleatório.

Para confirmar a coexistência das fases  $VS_1$  e  $VS_2$ , analisam-se os gráficos dos parâ-

metros de ordem  $q$  e da entropia como função do campo  $D$ , respectivamente mostrados nos painéis a) e b) da figura 3.15.

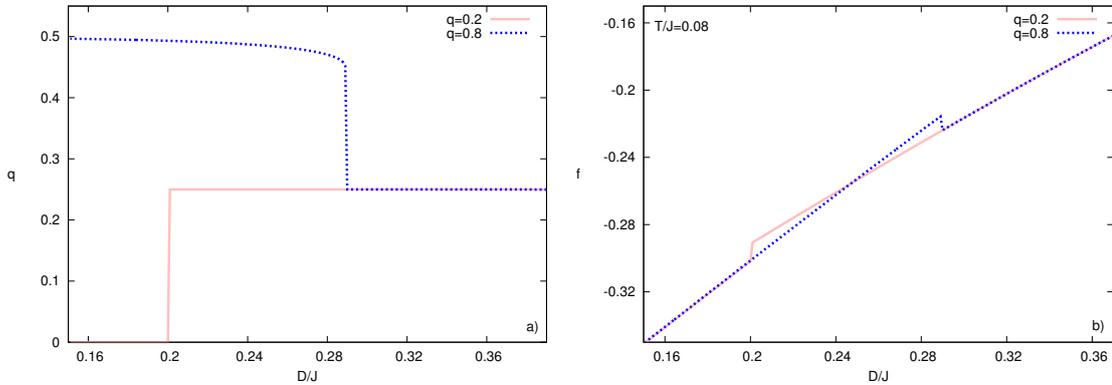


Figura 3.15: a) Parâmetro de ordem  $q$  e b) energia livre *versus* o campo  $D/J$  para  $T/J = 0.08$ , mostrando a coexistência das soluções vidro de spin.

Para um valor consideravelmente alto de campo aleatório,  $h_0/J = 0.7$  por exemplo, a solução  $VS_1$  com  $q \rightarrow 1/2$  está quase totalmente suprimida. Porém ainda apresenta uma transição de primeira ordem, em temperaturas e valores de  $D$  bem baixos, conforme mostra a figura 3.16. Já a solução  $VS_2$  novamente apresenta dois pontos tricríticos, como consequência do alto valor de  $h_0$ .

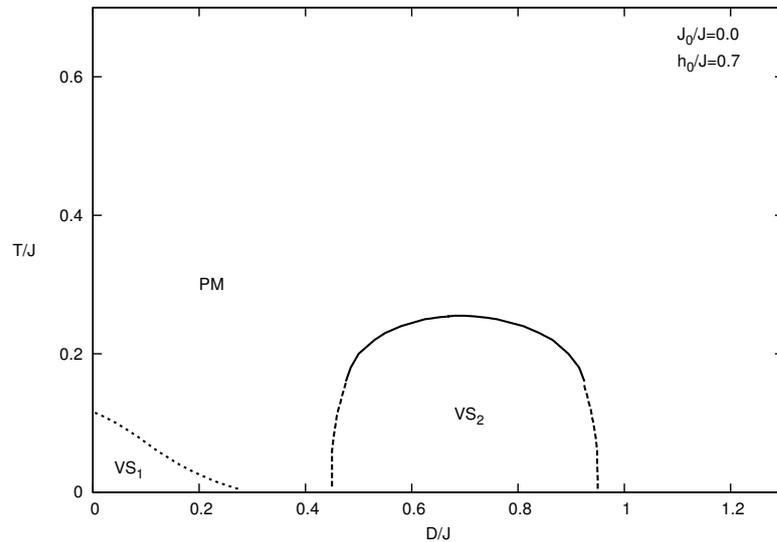


Figura 3.16: Diagrama de fases da temperatura versus o campo cristalino, considerando  $h_0/J = 0.7$ .

A figura 3.17 mostra o efeito de usar um valor de campo aleatório ainda mais alto:  $h_0/J = 0.9$ . A solução  $VS_1$  é praticamente suprimida, enquanto a segunda solução  $VS_2$  aparece em valores mais altos de  $D$  do que já discutido anteriormente. Isso pode estar

relacionado ao fato de que o aumento do campo aleatório tende a favorecer a fase  $VS_2$  com  $q \rightarrow 1/4$ , bem como o aumento de  $D$  também favorece essa solução  $VS_2$ , mostrando, ainda, a persistência dos dois pontos tricríticos para a transição  $PM/VS_2$ .

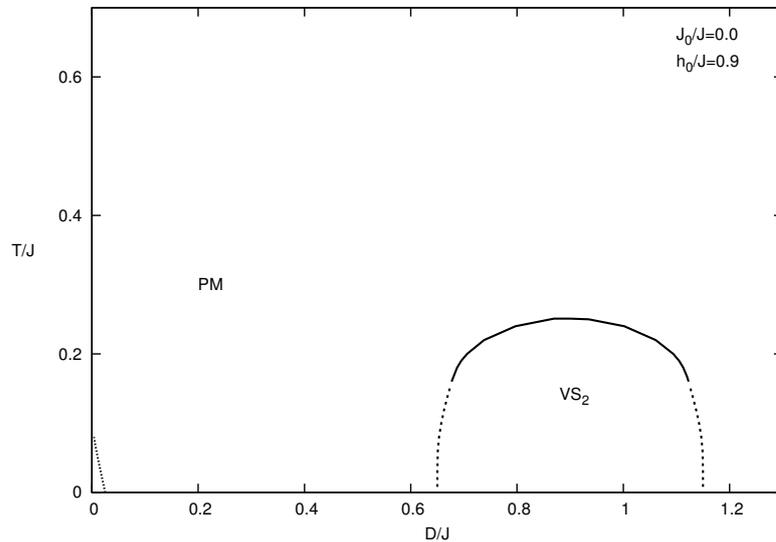


Figura 3.17: Diagrama de fases da temperatura versus o campo cristalino, considerando  $h_0/J = 0.9$

Agora, inverte-se os parâmetros utilizados nos diagramas de fases anteriores, a fim de se analisar o caso  $T/J \times h_0/J$ , mantendo fixos alguns valores para o campo  $D$ . Os valores escolhidos para fixar  $D$  estão de acordo com as transições e soluções VS que aparecem neste ponto nos diagramas  $T \times D$ . Ressalta-se que os diagramas de fases a seguir são similares aos resultados de (KAUFMAN; KANNER, 1990), no qual o modelo de três estados de Blume-Capel com  $S = \pm 1, 0$  foi estudado na presença de um campo aleatório sujeito a uma distribuição bimodal. A diferença é que os autores assumem  $m \neq 0$  e  $q = 0$ , ou seja, não existe a fase VS e, aqui, assume-se  $q \neq 0$ ,  $m = 0$  com  $J_0/J = 0$ , o que permite estudar o problema sem a fase FE.

No primeiro caso, analisa-se  $D/J = 0.4$ . Para valores suficientemente baixos de  $h_0$ , prevalece a fase  $VS_1$ , conforme pode ser visto na figura 3.18. Contudo o aumento do  $h_0$  tende a favorecer a solução  $VS_2$ , como já discutido anteriormente. O diagrama apresenta um ponto crítico ordenado de transição entre as duas soluções VS, em  $T/J = 0.122$  e  $h_0 \approx 0.347$ . Além disso, a transição  $PM/VS$  para  $T > 0.2$  é apenas de segunda ordem, independente do valor de  $h_0$ . Já para  $T/J < 0.2$  e  $h_0/J > 0.5$ , a transição torna-se de primeira ordem, exibindo um ponto tricrítico na transição  $PM/VS_2$  em  $T/J = 0.17$ .

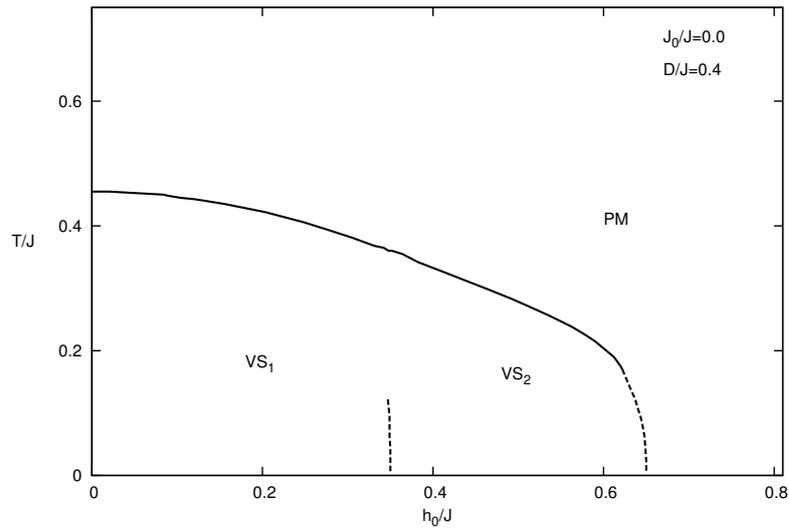


Figura 3.18: Diagramas de fases  $T/J$  versus  $h_0/J$ , mantendo fixo o valor do campo cristalino:  $D/J = 0.4$ .

Considerando  $D/J = 0.47$ , o diagrama de fases da figura 3.19 mostra a redução da temperatura de transição  $PM/VS$ , bem como o surgimento de um ponto tricrítico na transição  $PM/VS_1$ , para  $T/J = 0.29$  e  $h_0/J = 0.17$ . Para valores mais altos como  $h_0/J = 0.686$ , transição  $PM/VS_2$  exibe um ponto tricrítico em  $T/J = 0.176$ . Outro fator importante sobre esse caso é que a fase  $VS_2$  ganha mais espaço no diagrama de fases com relação à fase  $VS_1$ . A transição entre as fases  $VS_1$  e  $VS_2$  apresenta um ponto crítico ordenado em  $T/J = 0.125$ .

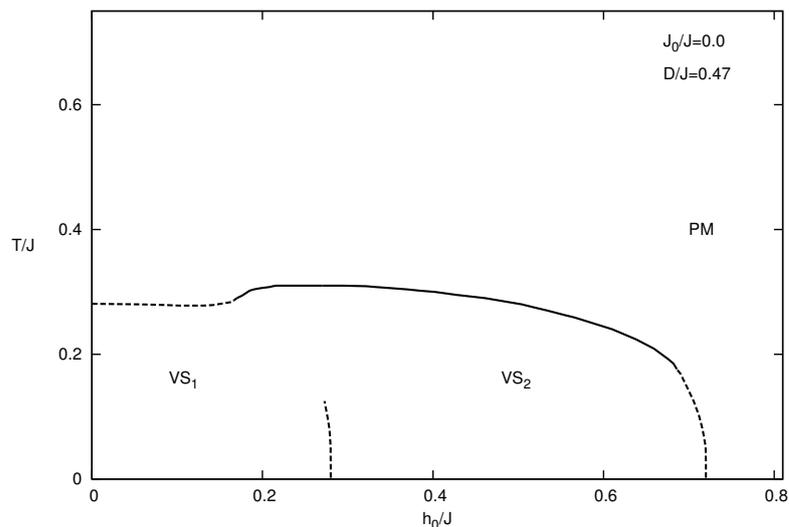


Figura 3.19: Diagramas de fases  $T/J$  versus  $h_0/J$ , mantendo fixos os valores do campo cristalino:  $D/J = 0.47$ . Ponto crítico ordenado observado em  $T/J = 0.122$  e o ponto tricrítico em  $T/J = 0.17$ .

Já as figuras 3.20-a) e 3.20-b) apresentam os diagramas de fases para  $D/J = 0.492$  e

$D/J = 0.493$ , respectivamente. Como já observado, o aumento do campo cristalino, assim como o aumento do campo aleatório, tende a favorecer a fase  $VS_2$ , que vai ocupando um espaço maior no diagrama de fases. A transição  $PM/VS_2$  apresenta dois pontos tricríticos. No painel a) em  $T/J = 0.228$  e  $T/J = 0.169$ , com  $h_0/J = 0.248$  e  $h_0/J = 0.712$ , respectivamente. No painel b) para  $h_0/J = 0.243$  em  $T/J = 0.211$ , e para  $h_0/J = 0.715$  em  $T/J = 0.163$ . Observa-se que, em ambos os casos, o ponto crítico da transição  $VS_1/VS_2$  aumenta em temperatura, praticamente separando as duas soluções  $VS$ , não existindo mais um ponto de coexistência das fases.

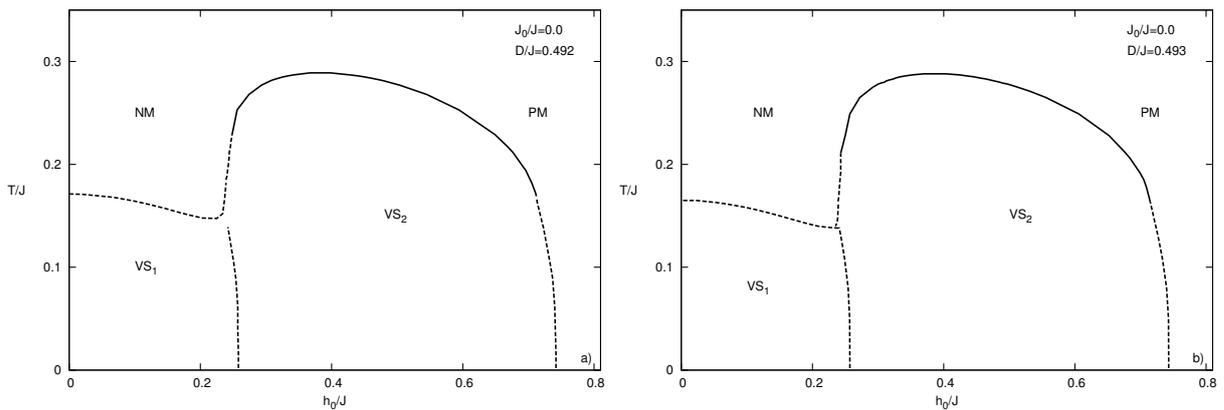


Figura 3.20: Os painéis a) e b) apresentam os diagrama de fases  $T/J$  versus  $h_0/J$ , para  $D/J = 0.492$  e  $D/J = 0.493$ , respectivamente.

Quando  $D = 0.75$ , mesmo para baixos valores de  $h_0$ , não há surgimento de qualquer fase  $VS$ , devido ao favorecimento energético dos estados não interagentes que, no caso, é a fase  $PM$ . Porém o aumento do  $h_0$  vai favorecendo a solução  $VS_2$ , mostrando a permanência dos dois pontos tricríticos dessa transição.

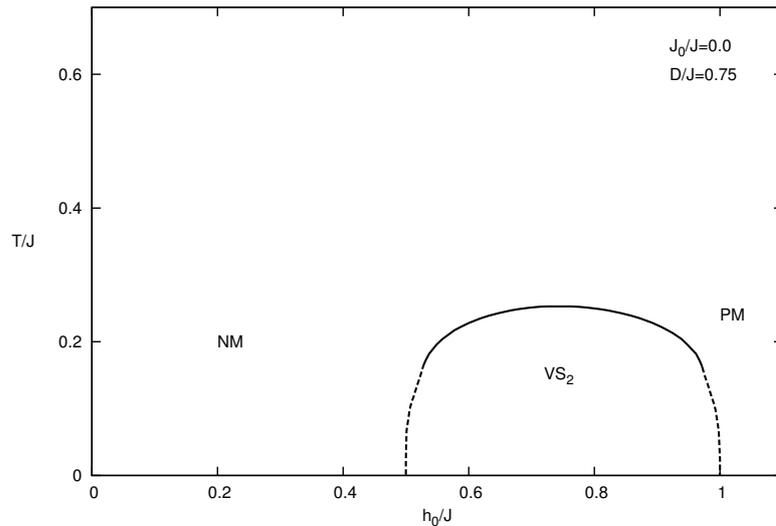


Figura 3.21: Diagrama de fases  $T/J$  versus  $h_0/J$  para  $D = 0.75$

### Conclusão do capítulo

O campo cristalino  $D$  favorece os estados não magnéticos ( $S = 0$ ) e o campo aleatório bimodal  $h_i$  tende a acoplar aos estados interagentes ( $S = \pm 1$ ). Dessa forma existe uma competição entre eles e a interação desordenada  $J_{ij}$  para o favorecimento ou não de determinada fase magnética. Altos valores de  $h_0$  combinados com baixos valores de  $D$ , e vice-versa, comprometem qualquer ordem de longo alcance no problema. Isso se deve ao fato de que o campo aleatório assume valores  $\pm h_0$  com igual probabilidade (ver Eq.(3.3)) e, por outro lado, porque o aumento do  $D$  favorece os estados não interagentes. Entretanto para pequenos valores de  $D$  e  $h_0$ , há o surgimento de uma fase  $VS$ , com parâmetro de ordem  $q = 1/2$ . Quando esses campos assumem valores intermediários, há também o surgimento de uma segunda fase  $VS$ , com  $q = 1/4$ . Como consequência, a fase  $VS$  é dividida em duas fases distintas  $VS_1$  e  $VS_2$ , separadas por um comportamento descontínuo do parâmetro de ordem  $q$ . A presença do campo aleatório no modelo tem um papel essencial na emergência de pontos multicríticos em temperaturas finitas. Para valores relativamente altos de  $h_0$ , o problema pode apresentar dois pontos tricríticos na transição  $PM/VS_2$ . Entretanto nenhum tipo de transição reentrante foi encontrado, não havendo, portanto, nenhuma evidência de transição inversa no sistema.

Os resultados dessa seção estão em preparação para o artigo a ser submetido

**Random Fields Effects on the Classical Anisotropic van Hemmen Spin Glass Model.**

## 4 *Modelo de van Hemmen de Vidro de Spin de Ising Fermiônico*

Neste capítulo, será apresentada a formulação fermiônica para o modelo de van Hemmen proposto neste trabalho. Em tal linha de abordagem, os operadores de spin são escritos em termos dos operadores fermiônicos de criação e destruição que, por sua vez, atuam sobre o espaço de Fock, que admite estados com zero, um ou dois férmions por sítio, com spins diferentes. Dessa forma, o problema pode ser tratado em um sistema de quatro estados: dois magnéticos ( $|\uparrow 0\rangle, |0 \downarrow\rangle$ ) e dois não magnéticos ( $|\uparrow \downarrow\rangle, |0 0\rangle$ ).

Além disso, o modelo conta com a presença de potencial químico, cuja função é regular a ocupação média dos sítios, bem como um campo aleatório e um campo transverso. Investigar e analisar os efeitos desses campos sobre as transições de fases, mais propriamente, da transição inversa do tipo congelamento, é um dos principais objetivos deste trabalho. O modelo VSIF de van Hemmen foi escolhido devido à sua facilidade de tratar os termos desordenados e, também, pela sua proximidade termodinâmica com os modelos clássicos, já discutidos na seção 2.4.2. Para o modelo fermiônico, as interações aleatórias  $(\xi, \eta)$  e o campo aleatório  $h_i$ , e serão tratados seguindo a distribuição de probabilidade gaussiana.

O Hamiltoniano que descreve o modelo de van Hemmen de Vidro de Spin de Ising Fermiônico (vH VSIF) é dado por

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \sum_i h_i \hat{S}_i^z - 2\Gamma \sum_i \hat{S}_i^x \quad (4.1)$$

no qual o somatório  $(i, j)$  é sobre quaisquer dois sítios interagentes. Esse modelo conta com a presença de um campo magnético transverso, dado por  $\Gamma$ , e um campo aleatório representado por  $h_i$ .

Os operadores de spin são definidos em termos dos operadores fermiônicos de criação

$(c_{i\delta}^\dagger)$  e destruição  $(c_{i\delta})$ , como segue:

$$\hat{S}_i^z = \frac{1}{2}[\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}] \quad \text{e} \quad \hat{S}_i^x = \frac{1}{2}[c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}] \quad (4.2)$$

em que  $\hat{n}_{i\delta} = c_{i\delta}^\dagger c_{i\delta}$  é o operador número e  $\delta = \uparrow$  ou  $\downarrow$  indica a projeção do spin.

Na Eq. (4.1),  $J_{ij}$  é dado por

$$J_{ij} = \frac{J}{N}[\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i] + \frac{J_0}{N}, \quad (4.3)$$

onde  $J_0$  representa o acoplamento ferromagnético e  $\xi_i$  e  $\eta_i$  são variáveis aleatórias independentes com distribuição simétrica sobre zero e variância um.

As variáveis  $(\xi_i, \eta_i)$  e o campo  $h_i$  estão restritos à distribuição de probabilidade Gaussiana (distribuição contínua), respectivamente expressas como:

$$P(x_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp[-x_i^2/2] \quad (4.4)$$

com  $x_i = \xi_i$  ou  $\eta_i$ , e

$$P(h_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp[-h_i^2/(2\sigma^2)], \quad (4.5)$$

com largura  $\sigma$ .

A função de partição no ensemble grande canônico é obtida pelo uso do formalismo das integrais de caminho Lagrangeana, e os operadores de spin são representados como campos de Grassmann anticomutadores  $(\phi^*, \phi)$  (NEGELE; ORLAND, 1988):

$$Z = \int D(\phi^* \phi) e^{\int_0^\beta d\tau \{ \sum_{i,\sigma} \phi_{i\sigma}^*(\tau) [-\frac{\partial}{\partial \tau} + \mu] \phi_{i\sigma}(\tau) - H(\phi^*(\tau), \phi(\tau)) \}} \quad (4.6)$$

em que  $\mu$  é o potencial químico e  $\beta = 1/T$  ( $T$  é a temperatura). No limite termodinâmico, os primeiros termos do Hamiltoniano podem ser escritos como

$$Z = \int D(\phi^* \phi) \exp \int_0^\beta d\tau \{ A_\Gamma(\tau) + A_I(\tau, \xi, \eta) + A_h(\tau) \} \quad (4.7)$$

com

$$A_\Gamma(\tau) = \sum_{i,\delta} \phi_{i\delta}^*(\tau) \left[ -\frac{\partial}{\partial \tau} + \mu \right] \phi_{i\delta}(\tau) + \Gamma \sum_i S_i^x(\tau), \quad (4.8)$$

$$A_I(\tau, \xi, \eta) = \frac{J_0}{2N} \left[ \sum_i S_i^z(\tau) \right]^2 - \frac{J}{2N} \left[ \sum_i \xi_i S_i^z(\tau) \right]^2 - \frac{J}{2N} \left[ \sum_i \eta_i S_i^z(\tau) \right]^2 + \frac{J}{2N} \left[ \sum_i (\xi_i + \eta_i) S_i^z(\tau) \right]^2 \quad (4.9)$$

e

$$A_h(\tau, h_i) = \sum_i \beta h_i S_i^z(\tau), \quad (4.10)$$

onde  $S_i^z(\tau) = \sum_{\delta} s \phi_{i\delta}^\dagger(\tau) \phi_{i\delta}(\tau)$  ( $s = +$  para  $\delta = \uparrow$  ou  $s = -$  para  $\delta = \downarrow$ ) e  $S_i^x(\tau) = \sum_{\delta} \phi_{i\delta}^\dagger(\tau) \phi_{i-\delta}(\tau)$ .

Os termos quadráticos na Eq. (4.9) podem ser linearizados pelo uso das transformações Hubbard-Stratonovich. Esse procedimento resulta na seguinte expressão:

$$Z = \int Dm(\tau) \int Dq_3(\tau) \int Dq_1(\tau) \int Dq_2(\tau) \times \exp \left\{ -\frac{N}{2} \int_0^\beta d\tau [J_0 m^2(\tau) + Jq_3^2(\tau) - Jq_1^2(\tau) - Jq_2^2(\tau)] - \ln(\Lambda) \right\} \quad (4.11)$$

em que

$$\Lambda = \int D(\phi^* \phi) \exp \int_0^\beta d\tau \left\{ A_I(\tau) + \sum_i W(\xi, \eta, h_i) S_i^z(\tau) \right\} \quad (4.12)$$

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

As integrais funcionais sobre  $\{q_n(\tau)\}$  ( $n = 1, 2$  e  $3$ ) e  $m(\tau)$  na Eq. (4.11) podem ser resolvidas usando o método ponto de sela ( $N \rightarrow \infty$ ), que fornece

$$q_1(\tau) = \frac{1}{N} \sum_i \langle \xi_i S_i^z(\tau) \rangle, \quad q_2(\tau) = \frac{1}{N} \sum_i \langle \eta_i S_i^z(\tau) \rangle, \quad e \quad m(\tau) = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^z(\tau) \rangle \quad (4.13)$$

com  $q_3 = q_1 + q_2$  e  $\langle \dots \rangle$  sendo a média sobre o problema efetivo, Eq. (4.12). Particularmente, a aproximação estática é assumida aqui, em que  $q_n = q_n(\tau)$  e  $m = m(\tau)$ . Assim,  $W(\xi, \eta, h_i)$  torna-se

$$W'(\xi, \eta, h_i) = J_0 m + J(q_2 \xi_i + q_1 \eta_i) + h_i. \quad (4.14)$$

A transformada de Fourier é usada na Eq. (4.12). Então a integral funcional sobre os campos de Grassmann é calculada, e o somatório sobre as frequências de Matsubara é resolvido seguindo a Ref. (ZIMMER; MAGALHAES, 2006). Finalmente, o potencial grande canônico por sítio  $\Omega = -\frac{1}{N\beta} \langle \langle \ln Z \rangle \rangle$  é dado por

$$\beta\Omega = \frac{\beta J_0}{2} m^2 + \beta J q^2 - \beta\mu - \langle \langle \ln 2K(\xi, \eta, h_i) \rangle_{h_i} \rangle, \quad (4.15)$$

em que

$$K(\xi, \eta, h_i) = \cosh(\beta\mu) + \cosh\beta\sqrt{\Delta}, \quad (4.16)$$

com  $\Delta = W'^2 + \Gamma^2$ . A partir daí, o parâmetro de ordem vidro de spin e a magnetização (HEMMEN, 1982) são obtidos pelas equações do método ponto de sela, em que  $q_1 = q_2 = q$ .

A notação  $\langle\langle \dots \rangle\rangle$  representa a média sobre as variáveis aleatórias  $\xi$  e  $\eta$  seguindo a distribuição Gaussiana Eq. (4.4), enquanto  $\langle \dots \rangle_{h_i}$  representa a média sobre o campo aleatório  $h_i$  seguindo a Eq. (4.5), cujos cálculos serão demonstrados na seção seguinte.

Além disso, outras quantidades termodinâmicas podem ser derivadas a partir de  $\Omega$ . Por exemplo, a entropia  $S$  e o número de ocupação média  $\nu$  são obtidos de  $S = -\partial\Omega/\partial T$ ,

$$S = \ln 2 + \langle\langle \ln K(\xi, \eta, h_i) \rangle_{h_i} \rangle - \beta \langle\langle \left[ \frac{\mu \sinh(\beta\mu) + \sqrt{\Delta} \sinh(\beta\sqrt{\Delta})}{K(\xi, \eta, h_i)} \right] \rangle_{h_i} \rangle, \quad (4.17)$$

e  $\nu = -\partial\Omega/\partial\mu$ ,

$$\nu = 1 + \sinh(\beta\mu) \langle\langle \left[ \frac{1}{K(\xi, \eta, h_i)} \right] \rangle_{h_i} \rangle. \quad (4.18)$$

## 4.1 Cálculo da média configuracional sobre as variáveis $\xi$ e $\eta$

Considerando a Eq.(4.4) da distribuição de probabilidades gaussiana, pode-se desenvolver o cálculo da média configuracional, como segue:

$$\langle\langle f(\xi, \eta) \rangle\rangle = \int \int f(\xi, \eta) P(\xi, \eta) d\xi d\eta. \quad (4.19)$$

A partir da Eq.(4.15) do potencial termodinâmico, é possível obter as equações do parâmetro de ordem  $q$  e da magnetização  $m$ , através de  $\frac{\partial\beta\Omega}{\partial q} = 0$  e  $\frac{\partial\beta\Omega}{\partial m} = 0$ ,

$$q = \langle\langle \left[ \frac{\xi + \eta}{2} \frac{\sinh(\beta\sqrt{\Delta})}{\cosh(\beta\mu) + \cosh(\beta\sqrt{\Delta})} \frac{W'}{\sqrt{\Delta}} \right] \rangle_{h_i} \rangle \quad (4.20)$$

e

$$m = \langle\langle \left[ \frac{\sinh(\beta\sqrt{\Delta})}{\cosh(\beta\mu) + \cosh(\beta\sqrt{\Delta})} \frac{W'}{\sqrt{\Delta}} \right] \rangle_{h_i} \rangle, \quad (4.21)$$

com  $\Delta = W'^2 + \Gamma^2$  e  $W' = J_0 m + J(\xi + \eta)q + h_i$ .

Assim, tem-se então

$$\beta\Omega = \frac{\beta J_0}{2} m^2 + \beta J q^2 - \beta\mu - \left\langle \left[ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \ln 2K(\xi, \eta, h_i) \exp \left[ \frac{-1}{2} (\xi^2 + \eta^2) \right] d\xi d\eta \right] \right\rangle_{h_i} \quad (4.22)$$

$$q = \left\langle \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\xi + \eta}{2} \frac{\sinh(\beta\Delta)}{\cosh(\beta\mu) + \cosh(\beta\sqrt{\Delta})} \frac{W'}{\sqrt{\Delta}} \exp \left[ \frac{-1}{2} (\xi^2 + \eta^2) \right] d\xi d\eta \right\rangle_{h_i} \quad (4.23)$$

$$m = \left\langle \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sinh(\beta\Delta)}{\cosh(\beta\mu) + \cosh(\beta\sqrt{\Delta})} \frac{W'}{\sqrt{\Delta}} \exp \left[ \frac{-1}{2} (\xi^2 + \eta^2) \right] d\xi d\eta \right\rangle_{h_i} \quad (4.24)$$

Porém, uma vez que as variáveis  $\xi$  e  $\eta$  podem assumir valores entre  $[-\infty, \infty]$ , é praticamente inviável resolver os cálculos analiticamente. Dessa forma, a utilização deste tipo de distribuição de probabilidades necessita que sejam usados processos numéricos, como soluções integrais, para se obter os resultados desejados. Além disso, ainda é preciso resolver a média sobre o campo aleatório, também sujeito à distribuição gaussiana.

## 4.2 Campo aleatório $h_i$ seguindo uma distribuição gaussiana

Para resolver a média sobre o campo aleatório  $h_i$ , utiliza-se novamente uma distribuição gaussiana, conforme Eq.(4.5). Porém, agora, o problema conta com três soluções de integrais, o que torna o cálculo analítico impossível. Seguem as equações obtidas para o potencial grande canônico, parâmetro de ordem VS e magnetização, que foram resolvidas numericamente com auxílio de um programa iterativo.

$$\beta\Omega = \frac{\beta J_0}{2} m^2 + \beta J q^2 - \beta\mu - \left[ \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{h_i}}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \ln 2K(\xi, \eta, h_i) \exp \left[ \frac{-1}{2} (\xi^2 + \eta^2) \right] \exp \left[ \frac{-h_i^2}{2\sigma_{h_i}^2} \right] d\xi d\eta dh_i \right] \quad (4.25)$$

$$q = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{h_i}^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\xi + \eta}{2} \frac{\sinh(\beta\Delta)}{\cosh(\beta\mu) + \cosh(\beta\sqrt{\Delta})} \frac{W'}{\sqrt{\Delta}} \exp\left[\frac{-1}{2}(\xi^2 + \eta^2)\right] \exp\left[\frac{-h_i^2}{2\sigma_{h_i}^2}\right] d\xi d\eta dh_i. \quad (4.26)$$

$$m = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{h_i}^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sinh(\beta\Delta)}{\cosh(\beta\mu) + \cosh(\beta\sqrt{\Delta})} \frac{W'}{\sqrt{\Delta}} \exp\left[\frac{-1}{2}(\xi^2 + \eta^2)\right] \exp\left[\frac{-h_i^2}{2\sigma_{h_i}^2}\right] d\xi d\eta dh_i \quad (4.27)$$

### 4.3 Resultados

Os resultados a seguir exibem uma combinação dos efeitos do campo longitudinal  $h_i$ , representado pela variância da distribuição gaussiana,  $\sigma$ , e do campo transversal  $\Gamma$ .

Considera-se, inicialmente,  $\Gamma = 0$ . As figuras abaixo apresentam diagramas de fases da temperatura em função de  $J_0$  para diferentes valores de potencial químico  $\mu$  e variância  $\sigma$ . Como base, é tomada a primeira linha do diagrama  $T/J$  versus  $J_0/J$  da figura 4.1, que considera tanto  $\mu$  quando  $\sigma$  iguais a 0. Seguindo o modelo originalmente proposto por van Hemmen (HEMMEN, 1982; HEMMEN et al., 1983), uma fase VS ( $q \rightarrow 1/2$ ) pode ser encontrada em baixas temperaturas e valores baixos de  $J_0$ , enquanto a fase FE é dominante para valores altos de  $J_0$ . O limite entre as fases PM e VS, assim como entre PM e FE, é de segunda ordem. Entretanto, o aumento do  $\sigma$  pode afetar a temperatura de transição entre as fases, que ocorre em temperaturas mais baixas. Além disso, também observa-se que a fase VS ganha mais espaço no diagrama de fases em valores mais altos de  $J_0$ .

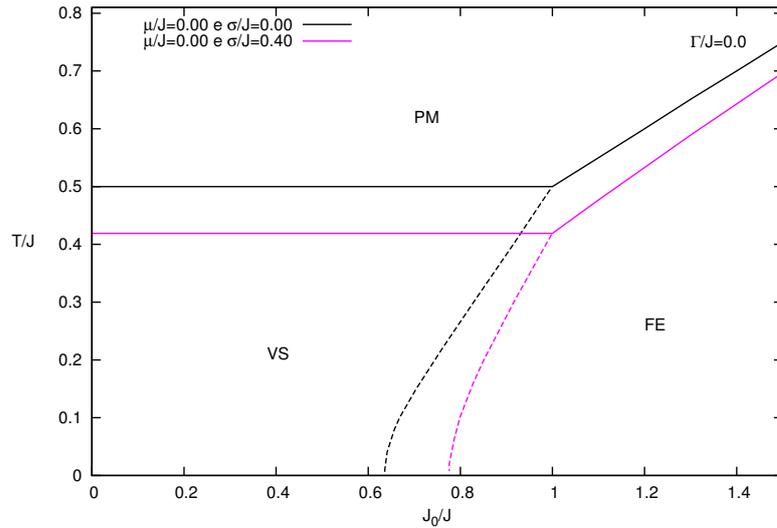


Figura 4.1: Diagrama de fases  $T/J$  x  $J_0/J$  para  $\mu/J = 0.0$  e  $\sigma/J = 0$  e  $\sigma/J = 0.4$ , linhas preta e rosa, respectivamente.

O caso para  $\mu \neq 0$  é mostrado na figura 4.2. Escolhe-se o valor de  $\mu/J = 0.45$  e então, observa-se que, quando  $\sigma/J = 0$ , a transição entre as fases PM/VS é de primeira ordem. Nesse caso, ainda percebe-se o surgimento de uma outra transição de primeira ordem entre as fases VS/PM em temperaturas ainda mais baixas. Essa transição pode ser indício de uma transição reentrante no sistema, e será analisada com mais detalhes a seguir. Já para  $\sigma/J = 0.4$ , a fase PM sofre uma transição de segunda ordem tanto para a fase VS quanto para a fase FE, dependendo do valor do  $J_0$ .

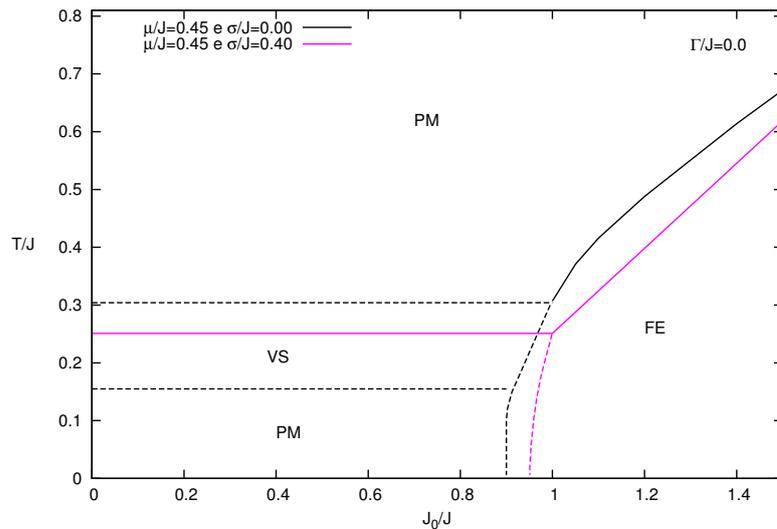


Figura 4.2: Diagrama de fases  $T/J$  x  $J_0/J$  para  $\mu/J = 0.45$  e  $\sigma/J = 0$  e  $\sigma/J = 0.4$ , linhas preta e rosa, respectivamente.

Analisa-se, agora, o diagrama  $T/J$  versus  $\mu/J$  para diferentes valores de  $\sigma/J$ . Cada

valor de  $\sigma/J$  (0.0, 0.125, 0.2, 0.4 e 0.6) está representado por uma cor diferente, de acordo com a figura 4.3. Para o caso  $\sigma/J = 0.0$ , conforme  $\mu$  aumenta, observa-se uma transição contínua entre as fases PM e VS enquanto a temperatura é reduzida até um ponto tricrítico. Abaixo do ponto tricrítico, a transição de primeira ordem exibe uma reentrância associada com congelamento inverso para valores de  $\sigma/J < 0.4$ . Entretanto essa reentrância começa a ser suprimida, conforme o valor de  $\sigma$  aumenta, até que desapareça completamente, como no caso de  $\sigma/J \geq 0.4$ . Além disso, o aumento do  $\sigma/J$  apresenta mudanças importantes nas linhas de segunda ordem, bem como na localização dos pontos tricríticos.

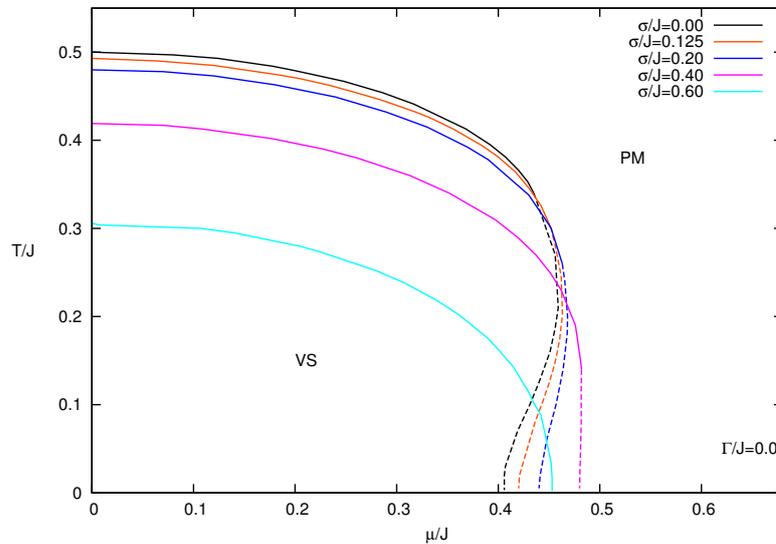


Figura 4.3: Diagrama de fases  $T/J$  versus  $\mu/J$  para diferentes valores de  $\sigma$ , representados pelas cores distintas no diagrama. Para  $\sigma/J < 0.4$ , a transição de primeira ordem PM/VS apresenta uma reentrância em  $0.4 < \mu/J < 0.45$ .

Para comprovar a existência da reentrância associada com o congelamento inverso, analisa-se o comportamento da entropia do sistema. A figura 4.4 apresenta gráficos da entropia  $S$  como função da temperatura nas regiões reentrantes,  $\mu/J = 0.44$  para  $\sigma/J = 0.125$  e  $\mu/J = 0.45$  para  $\sigma/J = 0.2$ , representadas pelas linhas laranja e azul, respectivamente. Em altas temperaturas, a entropia da fase PM é maior que a da fase VS. Entretanto, em ambos os casos, quando  $T_f = 0.1$  há uma transição de primeira ordem da fase VS para a fase PM, onde a entropia da fase VS é maior que a da fase PM, indicando o surgimento de uma transição inversa, devido a essa inversão na sequência usual das fases envolvidas no sistema.

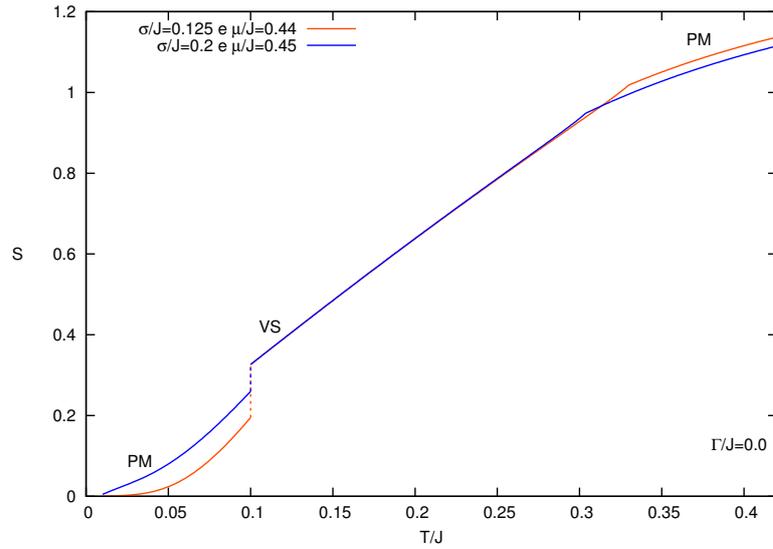


Figura 4.4: Gráfico da entropia *versus* a temperatura, para valores de  $\sigma$  e  $\mu$  representativos no surgimento de transição inversa.

Outra forma para confirmar o surgimento da transição inversa no sistema é olhar para o comportamento do número de ocupação como função de  $T/J$ . Para  $\sigma = 0$ , observa-se um mecanismo muito importante de uma TI: o número de ocupação média  $\nu$  da fase PM em altas temperaturas é diferente do número de ocupação média da fase PM em baixas temperaturas, conforme pode ser visto na figura 4.5-a. Em  $T < 1$ , a dupla ocupação torna-se dominante, desfavorecendo a fase VS. Para  $\sigma = 0.2$ , ainda é possível observar tal comportamento do número de ocupação. Entretanto a fase PM de baixas temperaturas ocorre para  $T < 0.22$ . Nesse sentido, pode-se dizer que a existência de fases PM em altas e baixas temperaturas pode ser uma característica essencial para a existência de congelamento inverso no sistema.

No entanto a presença do  $h_i$  destrói esta condição. Ainda na figura 4.5 - a, observa-se que, para  $\sigma/J = 0.4$  e  $\sigma/J = 0.6$ , a fase PM em baixas temperaturas deixou de existir. Isso pode ser devido ao acoplamento entre os spins e o  $h_i$ , que favorece os estados magnéticos (no caso, a fase VS).

Também analisa-se o comportamento do sistema assumindo um valor constante para  $\mu/J = 0.45$ , cujos resultados são mostrados na figura 4.5 - b. Quando  $\sigma/J = 0$ , conforme  $T \rightarrow 0$ , tem-se  $\nu = 2$ , o que favorece os estados não magnéticos. Porém, quando  $\sigma/J = 0.4$ ,  $\nu$  desvia da dupla ocupação. De fato, os estados magnéticos são favorecidos pelo acoplamento local com o  $h_i$  reduzindo  $\nu$ , que assume valores menores que 2 em baixas temperaturas. Essa situação tende a favorecer a ordem magnética, que é a fase VS, desde que  $J_0/J < 1$ . Para comparar o que acontece quando  $J_0/J > 1$ , analisa-se a figura menor

do painel b. Para  $\sigma/J = 0$ , em baixas temperaturas, existe uma situação de semipreenchimento dos estados, enquanto que, para  $\sigma/J = 0.4$ , tem-se uma ocupação levemente maior que  $\nu = 1$ . Portanto os limites da fase FE não sofrem bruscas alterações devido à presença do campo aleatório, uma vez que as transições são de segunda e de primeira ordem para as fases PM e VS, respectivamente.

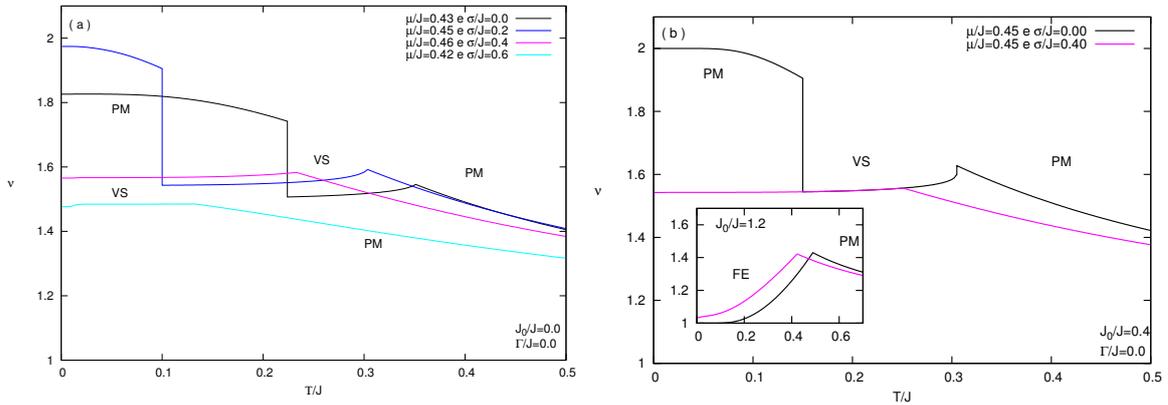


Figura 4.5: Número de ocupação  $\nu$  como função de  $T/J$ . Painel (a) exibe os resultados para  $J_0/J = 0.0$ , enquanto painel (b) para  $J_0/J = 0.4$  e  $J_0/J = 1.2$  (figura menor).

Com os resultados obtidos até agora, pode-se dizer que o modelo fermiônico apresenta uma transição reentrante associada com o congelamento inverso, porém essa transição pode ser suprimida com o aumento do valor do campo aleatório gaussiano, controlado pelo  $\sigma$ .

Aciona-se, então, o campo transversal, assumindo um valor fixo para todos os casos analisados:  $\Gamma/J = 0.5$ . A figura 4.6 exibe o diagrama de fases  $T/J$  x  $J_0/J$  para os valores de  $\mu$  e  $\sigma$  estudados no caso anterior ( $\Gamma/J = 0$ ). A fase PM sofre uma transição de segunda ordem para a fase VS ou para a fase FE, dependendo do valor de  $J_0$ . Entre as fases VS e FE a transição é de primeira ordem. O que se observa é a redução da temperatura da transição  $T_f$  quando  $\sigma$  e  $\mu$  assumem valores diferentes de zero.

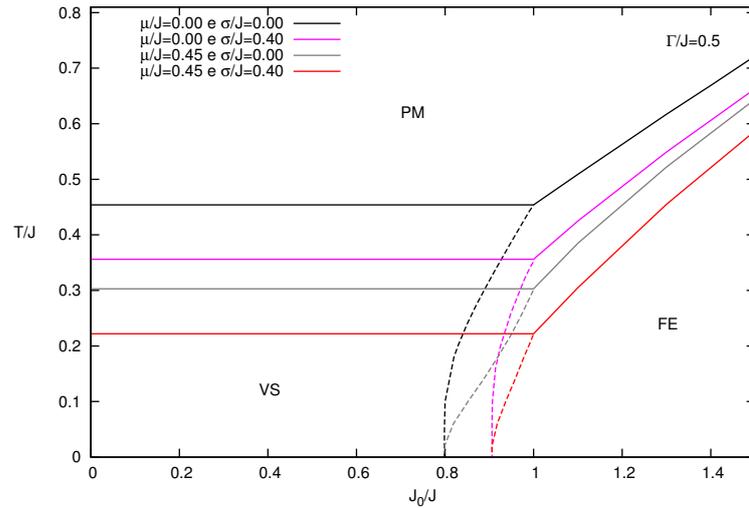


Figura 4.6: Diagrama de fases  $T/J$  versus  $J_0/J$  para dois pares de  $\sigma/J$  e  $\mu/J$ , representados pelas diferentes cores no diagrama.

O diagrama de fases  $T/J$  versus  $\mu/J$  mostra um resultado importante: não há evidências de qualquer transição reentrante para  $\Gamma/J = 0.5$ , até mesmo para  $\sigma/J = 0$ . A figura 4.7 exibe as transições de fases PM/VS para os valores de  $\sigma$  estudados anteriormente, quando  $\Gamma/J = 0$ . As temperaturas das transições de segunda ordem são reduzidas. Além disso, o aumento do  $\sigma$  é responsável não somente pela redução do ponto tricrítico mas também indica que a fase VS vai sendo suprimida.

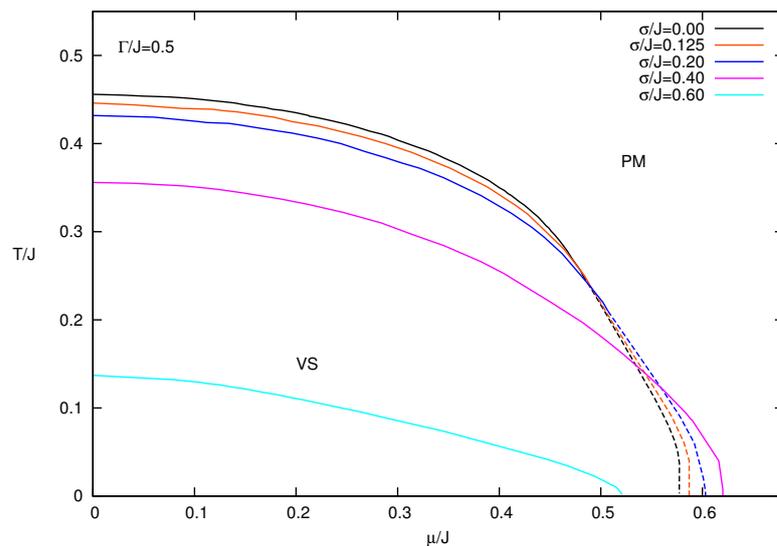


Figura 4.7: Diagrama de fases  $T/J$  versus  $\mu/J$  para diferentes valores de  $\sigma/J$ , representados pelas cores distintas no diagrama.

A curva da entropia pode auxiliar na investigação da existência ou não do congelamento inverso no sistema. A figura 4.8 mostra o comportamento da entropia como função

da temperatura, para dois casos particulares,  $\sigma/J = 0.125$  com  $\mu/J = 0.55$  e  $\sigma/J = 0.2$  com  $\mu/J = 0.56$ . Em ambos os casos, a transição de primeira ordem ocorre em  $T_f = 0.1$ . Entretanto a fase VS aparece em temperaturas mais baixas que a fase PM. Dessa forma, a curva da entropia confirma a ausência de congelamento inverso.

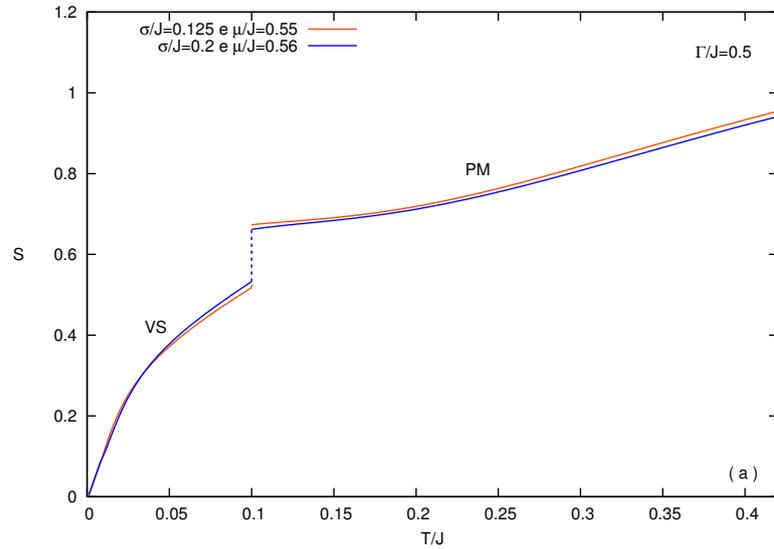


Figura 4.8: Entropia *versus* a temperatura para valores de  $\sigma/J$  e  $\mu/J$  que apresentam transições PM/VS de primeira ordem.

O comportamento da ocupação  $\nu$  como função de  $T/J$  é mostrado na figura 4.9. Como se pode perceber, a fase PM em baixas temperaturas e com dupla ocupação é inexistente. Dessa forma, a fase VS é favorecida em baixas temperaturas. O número de ocupação da fase VS para  $0 \leq \sigma \leq 0.4$  varia entre  $\nu = 1.3$  e  $\nu = 1.6$ . Quando se assume  $\sigma/J = 0.6$ , observa-se que a fase VS tem ocupação  $\nu = 1$ .

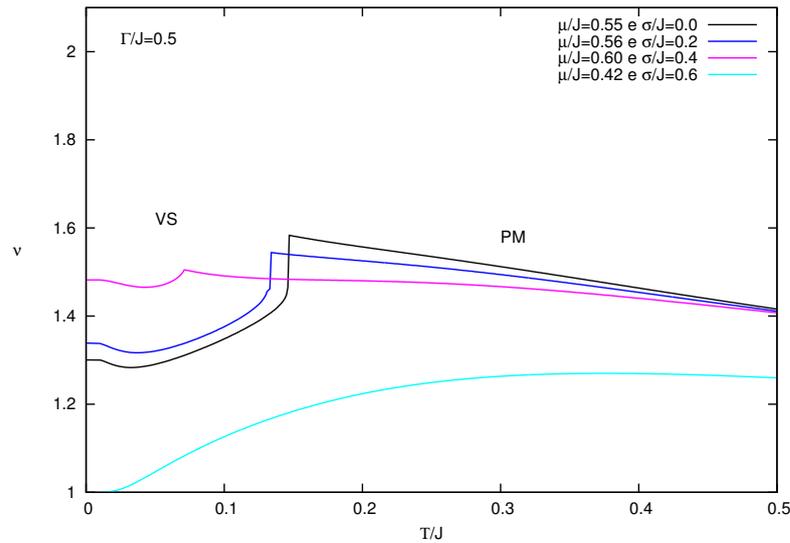


Figura 4.9: Número de ocupação  $\nu$  como função de  $T/J$  para diferentes pares de  $\mu/J$  e  $\sigma/J$ .

Os efeitos combinados de  $\Gamma$  e do campo aleatório podem ser observados no diagrama de fases da figura 4.10, onde se analisa as consequências da presença do  $h_i$  superposta ao *spin flipping* governadas pelo  $\Gamma$ .

Os efeitos da diluição devido às flutuações de cada sã evitadas mantendo-se  $\mu/J = 0$  ( $\nu = 1$ ). Para  $\sigma/J = 0$ , o aumento do  $\Gamma$  leva a temperatura de congelamento  $T_f$  em direção ao ponto crítico quântico em  $\Gamma/J = 1$ . Para  $\sigma/J \geq 0.2$ , não somente a localização do *PCQ* é deslocada para valores mais baixos de  $\Gamma$ , mas também a região da fase VS no diagrama de fases é reduzida. Esses dois efeitos são reforçados conforme  $\Gamma$  aumenta, sugerindo que a desordem fornecida pelo campo aleatório está destruindo a fases VS. Nesse sentido, ambos campos  $\Gamma$  e  $h_i$  convergem para suprimir a fase VS.

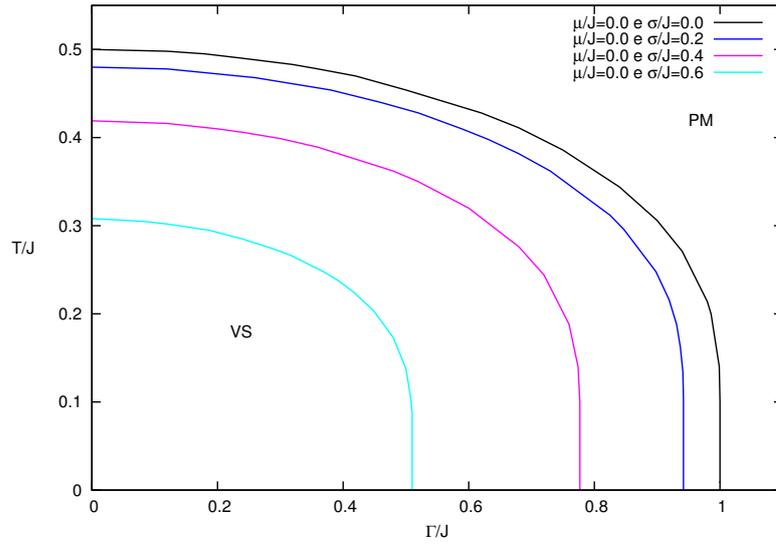


Figura 4.10: Diagrama de fases da temperatura versus o campo transversal, mantendo  $\mu/J = 0$  e  $0 \leq \sigma/J \leq 0.6$ .

Os resultados do modelo fermiônico estão publicados em (BERGER et al., 2017).

### Conclusão do capítulo

O modelo aqui proposto é capaz de apresentar um tipo de transição reentrante. Essa reentrância aparece para um determinado valor de  $\mu/J$ , quando uma fase PM é encontrada em baixas temperaturas, com entropia menor que a fase VS, caracterizando um congelamento inverso. Entretanto essa condição somente é observada na ausência de  $\Gamma$  e  $h_i$  suficientemente baixo ( $\sigma/J \leq 0.2$ ). Quando os efeitos do  $h_i$  são intensificados, o congelamento inverso é gradativamente suprimido, sendo completamente destruído pelas flutuações quânticas provenientes do  $\Gamma$ . Pode-se concluir, portanto, que uma desordem não trivial combinada à diluição magnética pode oferecer um cenário favorável à ocorrência de um congelamento inverso, enquanto o campo aleatório e as flutuações quânticas vão contra este tipo de comportamento.

## 5 *Considerações finais*

Neste trabalho, os efeitos induzidos pelo campo aleatório foram estudados em duas diferentes versões adaptadas do modelo VS de van Hemmen. No primeiro caso, trata-se de um modelo clássico, considerando o campo cristalino como um mecanismo de favorecimento energético dos estados não interagentes, enquanto que o campo aleatório tende a se acoplar aos estados magnéticos, favorecendo, portanto, os estados interagentes. Dessa forma, pode-se dizer que há uma forte competição entre esses campos. No segundo caso, trata-se de um modelo VSIF, em que potencial químico controla a ocupação média de férmions por sítio, favorecendo sítios não magnéticos. Novamente o campo aleatório tende a se alinhar aos estados magnéticos. O modelo fermiônico conta, ainda, com um campo transversal que produz *spin flipping* dos momentos magnéticos.

Os dois modelos estão estreitamente ligados, no ensemble grande canônico, através do mapeamento entre o campo cristalino  $D$  e o potencial químico  $\mu$ , pois ambos tendem a favorecer os estados não magnéticos.

Discutindo cada caso separadamente, primeiramente analisam-se os resultados obtidos no modelo clássico. A partir de gráficos que exibem o comportamento da energia livre e dos parâmetros de ordem vidro de spin ( $q$ ) e magnetização ( $m$ ), foram construídos diagramas de fases da temperatura  $T$  em função do acoplamento ferromagnético  $J_0$  e também em função do campo cristalino  $D$ . Os valores do campo aleatório foram variados em cada caso. Com esses diagramas, pode-se observar que a fase  $VS_1$  ( $q \rightarrow 1/2$ ) é encontrada quando os valores de  $J_0/J$  são baixos, enquanto que a fase ferromagnética (FE) é dominante para altos valores de  $J_0/J$ . Além disso, uma fase mista (VS+FE) pode ser observada abaixo da fase VS em baixas temperaturas quando considerados os campos cristalino e aleatório nulos, ou seja,  $D/J = 0$  e  $h_0/J = 0$ . Porém o mínimo aumento em qualquer um dos campos suprime a fase mista.

Um resultado muito interessante do modelo clássico é que o campo aleatório sujeito à distribuição bimodal (com igual probabilidade de ocorrência e, portanto, valores  $\pm h_0$ ),

é responsável pelo surgimento de outras soluções da fase VS. Conforme seu valor vai aumentando, a solução  $VS_2$  com  $q \rightarrow 1/4$  vai ganhando mais espaço nos diagramas de fases. Observa-se, ainda, que as novas transições de fases  $PM/VS_2$  apresentam dois pontos tricríticos para valores intermediários e altos de  $D$ . Além disso, valores relativamente altos de  $h_0$  acabam por suprimir a fase  $VS_1$  com  $q \rightarrow 1/2$ . Entretanto mesmo com a peculiaridade de apresentar dois pontos tricríticos na transição  $PM/VS_2$ , nenhum tipo de transição reentrante foi observado.

Isso pode estar relacionado a dois fatores:

i) As interações frustradas geradas pela desordem obtida com a distribuição bimodal não são suficientes para aumentar a entropia da fase VS em baixas temperaturas;

ii) A desordem proveniente do campo aleatório poderia aumentar a entropia da fase  $VS_2$ , porém também aumentaria a desordem da fase PM em baixas temperaturas. Com isso, a condição de que, para existir uma transição inversa, é necessária uma fase PM com entropia menor que a da fase VS, não é satisfeita nesse modelo.

Portanto a principal diferença entre as desordens abordadas aqui é que as interações desordenadas favorecem a fase VS, enquanto o campo aleatório compete com o campo cristalino, aumentando a entropia da fase PM em baixas temperaturas. Dessa forma, pode-se concluir que a desordem proveniente do campo aleatório tem papel oposto ao da desordem provocada pelas interações aleatórias  $\xi$  e  $\eta$ .

Além disso, o modelo clássico apresenta diversos pontos tricríticos nas transições de fase. Isso pode estar relacionado ao fato de o campo cristalino favorecer energeticamente os estados não magnéticos em baixas temperaturas, mas principalmente, ao papel do campo aleatório, que é responsável pela emergência de pontos multicríticos no sistema.

Quando estudado dentro da formulação fermiônica, o modelo VSIF foi capaz de apresentar transição inversa do tipo congelamento inverso (CI) desde que desordem fosse tratada seguindo uma distribuição gaussiana (ZIMMER et al., 2012). Por isso, no modelo aqui proposto, acrescentou-se o campo longitudinal aleatório  $h_i$  ao modelo, combinado a um campo transversal uniforme  $\Gamma$ , a fim de se analisar seus efeitos. A presença do  $\Gamma$  no modelo VSIF atua fortemente na redistribuição da ocupação dos sítios.

Para calcular o potencial grande canônico e os parâmetros de ordem, foram utilizadas as integrais de caminho fermiônicas e aproximações estáticas, obtendo, assim, uma solução de campo médio exata que não utiliza o método das réplicas para tratar a desordem do problema. É importante ressaltar que no modelo vH VSIF as interações aleatórias  $J_{ij}$  são

dados como produto das variáveis independentes  $\xi$  e  $\eta$ , conforme equações (4.3) e (4.4). O campo aleatório  $h_i$  segue uma distribuição gaussiana com variância  $\sigma$ . Dessa forma, foi possível analisar as consequências dos efeitos combinados de  $h_i$  e  $\Gamma$  nas transições de fase e, em particular, na transição inversa não trivial observada na temperatura de congelamento  $T_f$ .

Os resultados foram analisados, basicamente, em três tipos de diagramas de fases da temperatura *versus* (i) interações ferromagnéticas  $J_0/J$ ; (ii) potencial químico  $\mu/J$  e (iii) campo transversal  $\Gamma/J$ . No primeiro caso ( $T/J \times J_0/J$ ), os efeitos de  $h_i$  e  $\Gamma$  em  $\mu = 0$  são similares. Ambos os campos reduzem  $T_f$  e a Temperatura de Curie  $T_c$ . Porém, não altera a natureza das mesmas. Diferente do que acontece quando  $\mu = 0.45$ , quando  $h_i$  e  $\Gamma = 0$ , em que a transição PM/VS torna-se de primeira ordem. Aqui, um cenário importante é observado: em baixas temperaturas surge uma nova transição de primeira ordem, levando a fase VS à fase PM sob resfriamento, que pode ser entendida como uma manifestação de congelamento inverso. Tal manifestação pode ser relacionada aos estados não magnéticos favorecidos pelo  $\mu$ . Como consequência, a dupla ocupação torna-se dominante em baixas temperaturas, desfavorecendo a fase VS. Em comparação, o aumento de  $\sigma$  tende a diminuir o número de sítios duplamente ocupados da fase PM em baixas temperaturas, o que resulta em um favorecimento dos estados magnéticos.

Com relação ao segundo tipo de diagrama de fase analisado ( $T/J \times \mu/J$ ), conforme o valor de  $\mu$  aumenta, a transição de segunda ordem PM/VS é reduzida a um ponto tricrítico. E então, para um certo valor de  $\mu$ , é observada uma transição reentrante associada com CI. Entretanto isso só acontece na ausência de  $\Gamma$  e para valores de  $\sigma$  suficientemente baixos. Como se sabe, dois ingredientes são fundamentais para a existência de CI: desordem e frustração. Além disso, o campo aleatório provém um tipo de desordem que suprime qualquer ordem de longo alcance, no caso, as fases VS ou FE. Como consequência o aumento do  $\sigma$  afeta não somente a localização da temperatura de congelamento associada com a fronteira crítica entre as fases PM e VS mas também diminui a reentrância na transição de primeira ordem. Dessa forma, pode-se dizer que o campo aleatório  $h_i$  compete com a desordem vinda das ligações aleatórias  $J_{ij}$  destruindo o CI.

Já, no terceiro tipo de diagrama de fases, foram analisadas as consequências da presença do campo aleatório sobreposta ao *spin flipping* governado pelo campo transversal. Como resultado, percebe-se que o aumento de  $\sigma$  não somente desloca a localização do ponto crítico quântico a valores menores de  $\Gamma$  mas também suprime gradativamente a fase VS.

Com base nesses resultados, pode-se dizer que, mesmo que o campo aleatório introduza um certo tipo de desordem no problema, sua presença não reforça o congelamento inverso. Pelo contrário, o  $h_i$  compete com a desordem das ligações aleatórias para destruir a fase VS, enquanto que *spin flipping* governado pelo  $\Gamma$  leva para o PCQ. Como consequência os efeitos combinados dos campos aleatório e transverso convergem não somente para suprimir a fase VS mas também para destruir a reentrância associada com IF.

## 5.1 Perspectivas

Como continuidade deste trabalho, pretende-se estudar o modelo de van Hemmen com anisotropia de campo cristalino (apresentado e discutido no capítulo 3) com conectividade finita.

Para os resultados obtidos até então, foi usada a aproximação de campo médio convencional, em que as interações entre os spins têm alcance infinito, ou seja, com conectividade infinita. Nesse sentido, a ideia é justamente investigar o que aconteceria com as transições de fase e sua dependência com o campo aleatório se as interações entre os spins fossem de alcance finito. Em outras palavras, quando os spins estão ligados a um número finito de outros spins em uma determinada rede (DORIA et al., 2014).

Para tanto, será introduzida uma constante  $c$  no Hamiltoniano (3.1), de forma que

$$H = -\frac{J_0}{N} \sum_{i,j} S_i S_j - \frac{1}{c} \sum_{i < j} c_{ij} \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i + D \sum_i S_i^2 \quad (5.1)$$

com  $c_{ij}$  a variável de conectividade aleatória simétrica ( $c_{ij} = c_{ji}$ ), que pode assumir valores  $c_{ij} = 1$  se houver conectividade entre um par de spins no sítio  $(ij)$ , e  $c_{ij} = 0$  se não houver, independentemente dos outros pares de spins (ERICHSEN et al., 2013). Seguindo a distribuição de Poisson para pequenos  $c/N$

$$p(c_{ij}) = \frac{c}{N} \delta_{c_{ij},1} + \left(1 - \frac{c}{N}\right) \delta_{c_{ij},0} \quad (5.2)$$

A conectividade  $c$  é o número médio de conexões por sítio, permanece finita no limite termodinâmico  $N \rightarrow \infty$ , tal que  $c/N \rightarrow 0$ , e a mecânica estatística para o modelo é derivada neste limite.

O conjunto de interações de alcance infinito ( $J_{ij}$ ) consiste de variáveis aleatórias inde-

pendentes, identicamente distribuídas e sujeitas a uma distribuição binária

$$p(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J) + (1 - p)\delta(J_{ij} + J) \quad (5.3)$$

para cada par de sítios  $(i, j)$ , onde  $J > 0$ . Assim, cada acoplamento tem uma probabilidade  $p$  de ser ferromagnético e  $(1 - p)$  de ser antiferromagnético, onde  $(1 - p)$  desempenha o papel de desordem *quenched*.

Ainda, no Hamiltoniano da equação (5.1),  $h_i$  representa o campo aleatório e  $D$  o campo anisotrópico. O termo quadrático nos spins favorece a população no estado zero se  $D > 0$ , ou os estados  $\pm 1$  se  $D < 0$ . (ERICHSEN et al., 2013)

## *APÊNDICE A – Expansão de Landau*

As transições de segunda ordem e as temperaturas críticas do capítulo 3 também podem ser investigadas através da expansão de Landau para a energia livre em termos do parâmetro de ordem  $q$  e  $m$ , resultando na seguinte expressão:

$$\beta f = a_0 + a_2 q^2 + a_4 q^4 + b_2 m^2 + b_4 m^4. \quad (\text{A.1})$$

A equação (3.23) representa a energia livre do sistema. Após ser feita a expansão em termos de  $q$ , as médias sobre  $\xi$  e  $\eta$  e também sobre  $h_i$  foram realizadas, seguindo as equações (3.2) e (3.3), respectivamente. Como os pontos tricríticos dos resultados apresentados neste trabalho foram encontrados em diagramas de fases cujo  $J_0/J = 0.0$ , a expansão em termos de  $m$  não será discutida neste apêndice.

Os termos indicados na equação (A.1) são:

$$a_0 = -\ln[1 + 2\exp^{-\beta D} \cosh(\beta h_0)], \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} a_2 = & \exp^{2\beta D} + 4\exp^{\beta D} \cosh(\beta h_0) - 2\beta J \exp^{\beta D} \cosh(\beta h_0) \\ & + 4\cosh^2(\beta h_0) - 4\beta J \cosh^2(\beta h_0) + 4\beta J \sinh^2(\beta h_0), \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

e

$$\begin{aligned} a_4 = & \exp^{3\beta D} \cosh(\beta h_0) - 12\exp^{\beta D} \cosh^3(\beta h_0) - 16\cosh^4(\beta h_0) \\ & - 8\exp^{2\beta D} \sinh^2(\beta h_0) + 16\exp^{2\beta D} \cosh(\beta h_0) \sinh^2(\beta h_0) \\ & + 64\cosh^2(\beta h_0) \sinh^2(\beta h_0) - 48\sinh^4(\beta h_0). \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Após alguns passos matemáticos, pode-se concluir que

$$\beta f = a_0 + \frac{\beta J a_2}{K_0^2} q^2 + \frac{\beta^4 J^4 a_4}{3K_0^4} q^4 \quad (\text{A.5})$$

em que  $K_0 = \exp^{\beta D} + 2\cosh(\beta h_0)$ .

Para obter os limites das transições de fase PM/VS de segunda ordem, admite-se que

$a_2(T_f) = 0$  com  $a_4 > 0$ . O ponto crítico ocorre quando  $a_2 = 0$  e  $a_4 = 0$ .

## *APÊNDICE B – Integrais de Caminho Fermiônicas*

O capítulo 4 deste trabalho utiliza o formalismo das integrais de caminho fermiônicas (B.25) no cálculo da função de partição do modelo fermiônico. Os procedimentos realizados no cálculo para resolução do formalismo Lagrangeano foram feitos com base na referência (NEGELE; ORLAND, 1988). Para uma melhor compreensão das integrais de caminho fermiônicas, primeiramente, define-se o que são estados coerentes. Estados coerentes são autoestados dos operadores de destruição e, devido às propriedades de anti-comutação desses operadores, é conveniente utilizar números que também possuam essas propriedades, isto é, números que anticomutam. Esses números são chamados de variáveis de Grassmann e podem ser relacionadas aos operadores de criação e destruição na seguinte forma:

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

onde  $\phi_\alpha^*$  e  $\phi_\alpha$  são geradores da álgebra de Grassmann associados aos operadores de criação  $c_\alpha^\dagger$  e destruição  $c_\alpha$ , respectivamente. Definidas as variáveis de Grassmann, é possível então 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  $|\psi\rangle$  no espaço generalizado de Fock pode ser escrito na forma

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

em que  $\chi_\alpha$  representam variáveis de Grassmann e  $|\phi\rangle$  vetores do espaço de Fock.

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

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

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

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

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

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

Calculando o traço de uma base ortonormal no espaço de Fock

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

tem-se a soma dos elementos da matriz diagonal, no caso os autovalores do operador atuando em uma base discreta:

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

Introduzindo a relação de clausura (B.3), antes do operador  $\hat{A}$  na equação (B.5), é possível construir a função de partição com base nos estados coerentes fermiônicos

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

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

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

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

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

Dessa forma, o Hamiltoniano também deve ser escrito em termos das variáveis de Grassmann. Para isso, adota-se o conceito de um operador  $\hat{O}(c^{\dagger}, c)$  de ordem normal, cuja notação é dada por  $:\hat{O}(c^{\dagger}, c):$ . Desse modo, sendo  $\hat{H}(c^{\dagger}, c)$  um operador de ordem normal e expandindo a exponencial desse operador, tem-se

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

Representando os elementos de matriz do operador  $e^{[\varepsilon \hat{H}(c^{\dagger}, c)]}$  na base dos estados coerentes como

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

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

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

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

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

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

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

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

da matriz do operador evolução temporal, que é dado por

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

e impondo as condições de contorno antiperiódicas,

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

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

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

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

O intervalo de tempo imaginário  $\beta$  pode ser dividido em  $M$  fatias iguais de tempo de tamanho  $\varepsilon$ , isso é,

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

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

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

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

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

Impondo novas condições de contorno antiperiódicas,

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

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

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

Na equação (B.21), a não comutatividade dos operadores de criação e destruição impossibilita o cálculo direto dos elementos de matriz. Supondo que  $\hat{H}(c^{\dagger}, c)$  esteja em ordem normal, o que possibilita a dedução da integral de caminho, encontra-se

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

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

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

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

Reescrevendo a equação (B.23) em uma notação trajetória, associa-se  $\phi_{\alpha}^*(\tau)$  e  $\phi_{\alpha}(\tau)$  com variáveis deslocadas por um passo  $\phi_{\alpha,k}^*$  e  $\phi_{\alpha,k-1}$ , respectivamente. Esse procedimento possibilita 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  $\tau$ , tal que

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

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

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

com o uso da notação

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

## *Referências Bibliográficas*

- AHARONY, A. Tricritical points in systems with random fields. *Physical Review B*, v. 18, n. 7, p. 3318–3327, 1978.
- AVRAHAM, N. et al. Inverse melting of a vortex lattice. *Nature*, v. 411, p. 451, 2001.
- BELANGER, D. *Spin Glass and Random Fields*. Santa Cruz, CA, USA: World Scientific, 1997.
- BERGER, I. C. *Congelamento inverso em um modelo de vidro de spin fermiônico*. Dissertação (Mestrado em Física) — Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria/RS, 2012.
- BERGER, I. C. et al. Inverse freezing in a van Hemmen fermionic Ising spin glass model under transverse and random magnetic fields. *Philosophical Magazine*, v. 97, n. 26, p. 2347–2360, 2017.
- BINDER, K.; YOUNG, A. P. Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions. *Rev. Mod. Phys.*, v. 58, out 1986.
- BLUME, M. Theory of the first-order magnetic phase change in  $\text{UO}_2$ . *Phys. Rev.*, v. 141, p. 517, 1966.
- CAPEL, H. W. On the possibility transitions of first-order in Ising systems with zero-field phase of triplet ions splitting. *Physica*, v. 32, p. 966, 1966.
- CHAIKIN, P.; LUBENSKY, T. *Principles of condensed matter physics*. Cambridge, USA: Cambridge University Press, 1995.
- CLADIS, P. E. et al. High-pressure investigation of the reentrant nematic - bilayer-smectic-a transition. *Phys. Rev. Lett.*, v. 39, p. 720, 1977.
- CLADIS, P. E. et al. Reentrant nematic transitions in cyano-octyloxybiphenyl (8OCb). *Phys. Rev. A*, v. 23, p. 2594, 1981.
- COSTA, F. A. da; YOKOI, C. S. O.; SALINAS, S. R. A. First-order transition in a spin-glass model. *Journal of Physics A Mathematical General*, v. 27, p. 3365–3372, 1994.
- COSTABILE, E. et al. First-order transition and tricritical behavior of the transverse crystal field spin-1 Ising model. *Sol. Stat. Com.*, v. 212, p. 30–34, 2015.
- CRISANTI, A.; LEUZZI, L. Stable solution of the simplest spin model for inverse freezing. *Phys. Rev. Lett.*, v. 95, p. 087201, 2005.
- DORIA, F. et al. Random field Ising model in a random graph. *Physica A (Print)*, v. 422, p. 58–65, 2014.

- DOTSENKO, V. An introduction to the theory of spin glasses and neural networks. *World Scientific*, 1994.
- EDWARDS, S.; ANDERSON, P. Theory of spin glasses. *Phys. F: Met. Phys.*, v. 5, n. 965, 1975.
- ERICHSEN, R. J.; THEUMANN, W.; MAGALHAES, S. Inverse melting and inverse freezing in a three-state spin-glass model with finite connectivity. *Physical Review E*, v. 87, n. 012139, 2013.
- FELDMANN, H.; OPPERMAN, R. Replica symmetry breaking solution for the fermionic Ising spin-glass and the ghatak sherrington model. *J. Phys. A*, v. 33, p. 1325–1332, 1999.
- FISCHER, K. H.; HERTZ, J. A. *Spin glasses*. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 1991.
- GHATAK, S.; SHERRINGTON, D. Crystal field effects in a general  $S$  Ising spin glass. *J. Phys. C*, v. 10, p. 3149, 1977.
- HEMMEN, J. van. Classical spin-glass model. *Phys. Rev. Lett.*, v. 49, p. 409–412, 1982.
- HEMMEN, J. van; ENTER, A. van; CANISIUS, J. On a classical spin glass model. *J., Z. Phys. B: Condensed Matter*, v. 50, p. 311, 1983.
- IMRY, Y.; MA, S. Random-field instability of the ordered state of continuous symmetry. *Physical Review Letters*, v. 35, n. 21, 1975.
- KAUFMAN, M.; KANNER, M. Random-field Blume-Capel model: Mean-field theory. *Physical Review B*, v. 42, n. 4, p. 2378–2382, 1990.
- KIRKPATRICK, S.; SHERRINGTON, D. Infinite-range models of spin glasses. *Phys. Rev. B*, v. 17, n. 11, p. 4384, 1978.
- MAGALHAES, S.; MORAIS, C.; NOBRE, F. One-step replica-symmetry-breaking solution of the Sherrington-Kirkpatrick model under a gaussian random field. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2011.
- MAGALHAES, S.; ZIMMER, F.; MORAIS, C. Stability conditions for fermionic Ising spin-glass models in the presence of a transverse field. *Physica A*, v. 388, n. 2140, 2009.
- MAGALHAES, S. G.; MORAIS, C. V.; ZIMMER, F. M. Role of the transverse field in inverse freezing in the fermionic Ising spin-glass model. *Phys. Rev. B*, v. 77, p. 134422, 2008.
- MAGALHAES, S. G.; MORAIS, C. V.; ZIMMER, F. M. Inverse freezing in the hopfield fermionic Ising spin glass. *Phys. Rev. B*, v. 81, p. 014207, Jan 2010.
- MARCANO, N. et al. Mesoscopic magnetic states in metallic alloys with strong electronic correlations: A percolative scenario for  $\text{CeNi}_{1-x}\text{Cu}_x$ . *Phys. Rev. Lett.*, v. 98, p. 166406, 2007.
- MORAIS, C. et al. Inverse freezing in the Ghatak-Sherrington model with a random field. *Physical Review E*, v. 85, 2012.

- MORAIS, C.; MAGALHAES, S.; NOBRE, F. The Sherrington-Kirkpatrick model in the presence of a bimodal random field: a one-step replica-symmetry-breaking approach. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2012.
- MORAIS, C. V. et al. Spin-glass phase transition and behavior of nonlinear susceptibility in the Sherrington-Kirkpatrick model with random fields. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 93, p. 224206, 2016.
- MORAIS, D. de et al. The van Hemmen model and effect of random crystalline anisotropy field. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 398, p. 253–258, 2016.
- MYDOSH, J. A. Disordered magnetism and spin glasses. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 157-158, p. 606–610, 1996.
- NEGELE, J. W.; ORLAND, H. *Quantum Many-Particle Systems*. Reading, MA, USA: Addison-Wesley, 1988.
- NOGUEIRA, E. J. et al. Tricritical behavior in the Sherrington-Kirkpatrick spin glass under a bimodal random field. *Physical Review E*, v. 57, n. 5, p. 5079–5086, 1998.
- NOGUEIRA, Y.; VIANA, J.; SOUZA, J. de. The van Hemmen model in the presence of a random field. *Brazilian Journal of Physics*, v. 37, n. 2A, 2007.
- PATHRIA, R. K. *Statistical Mechanics*. Second edition. Woburn, MA, USA: Butterworth Heinemann, 1996.
- PORTMANN, O.; VATERLAUS, A.; PESCIA, D. An inverse transition of magnetic domain patterns in ultrathin films. *Nature*, v. 422, p. 701, 2001.
- RAMIREZ, A. P. Strongly geometrically frustrated magnets. *Annual Reviews Mater. Sci.*, v. 24, p. 453–480, 1994.
- ROSENOW, B.; OPPERMANN, R. Tricritical behaviour of Ising spin glasses with charge fluctuations. *Phys. Rev. Lett.*, v. 77, n. 1608, 1996.
- RUTH, N. J. L. van; RASTOGI, S. Nonlinear changes in specific volume. A route to resolve an entropy crisis. *Macromolecules*, v. 37, p. 8191, 2004.
- SCHECHTER, M.; LAFLORENCIE, N. Quantum spin glass and the dipolar interaction. *Phys. Rev. Lett.*, v. 97, p. 137204, 2006.
- SCHECHTER, M.; STAMP, P. C. E. Significance of the hyperfine interactions in the phase diagram of  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ . *Phys. Rev. Lett.*, v. 95, p. 267208, 2005.
- SCHNEIDER, T.; PYTTE, E. Random-field instability of the ferromagnetic state. *Physical Review B*, v. 15, n. 3, p. 1519–1522, 1977.
- SCHUPPER, N.; SHNERB, N. M. Spin model for inverse melting and inverse glass transition. *Physical Rev. Lett.*, v. 93, p. 037202, 2004.
- SCHUPPER, N.; SHNERB, N. M. Inverse melting and inverse freezing: a spin model. *Physical Review E*, v. 72, p. 046107, 2005.

- SILVA, J. N. da. *Modelo de van Hemmen anisotrópico de spin 3/2*. Dissertação (Mestrado em Física) — Universidade Federal do Amazonas, Manaus/AM, 2007.
- SOARES, R.; NOBRE, F.; ALMEIDA, J. de. Effects of a gaussian random field in the Sherrington-Kirkpatrick spin glass. *Physical Review B*, v. 50, n. 9, p. 6151–6156, 1994.
- TABEI, S. et al. Induced random fields in the  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$  quantum Ising magnet in a transverse magnetic field. *Phys. Rev. Lett.*, v. 97, n. 237203, 2006.
- VANNIMENUS, J.; TOULOUSE, G. Theory of the frustration effect. II. Ising spins on a square lattice. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 10, n. 18, p. L537, 1977.
- VIANA, J. R. *Estudo do Vidro de Spin Quântico*. Dissertação (Mestrado em Física) — Universidade Federal do Amazonas, Amazonas, 2002.
- WU, W. et al. Quenching of the nonlinear susceptibility at a  $T = 0$  spin glass transition. *Phys. Rev. Lett.*, v. 71, p. 1919–1922, 1993.
- ZIMMER, F. M.; BERGER, I. C.; MAGALHAES, S. G. Inverse freezing in the van Hemmen fermionic Ising spin glass with a transverse magnetic field. *Phys. Lett. A*, v. 376, p. 566–572, 2012.
- ZIMMER, F. M.; MAGALHAES, S. G. One-step replica symmetry breaking solution for a fermionic Ising spin glass in a transverse field. *Phys. Rev. B*, v. 74, p. 012202, 2006.