

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL - UFRGS

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Modelo Esférico Quântico de Vidro de Spins com Interação do tipo p-Spins[†]

Vilarbo da Silva Júnior

Tese realizada sob orientação da Profa. Dra. Alba G. R. Theumann e apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da UFRGS, em preenchimento parcial dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Porto Alegre, Outubro de 2012.

[†]Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

Agradecimentos

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

- à professora Alba G. R. Theumann (*in memoriam*), pelo incentivo, pela orientação e pela dedicação;

- ao professor Miguel A. C. Gusmão, pelas ótimas aulas durante a curso de pós-graduação e pela supervisão nos últimos meses;

- ao colega Pedro Castro Menezes Xavier de Mello e Silva, pelo auxílio nos resultados numéricos;

- ao pessoal da sala M-208, pelas conversas e dicas, especialmente ao meu grande amigo Alexsandro Marian Carvalho;

- à minha família, pelo apoio e carinho;

- à minha amada esposa Lidiane de Matos Kerschner, pelo amor e dedicação durante todos estes anos;

- à pessoa que mais amo, sempre amarei e é minha razão de viver, minha filha Julie Kerschner da Silva.

Resumo

Neste trabalho, apresentamos um estudo do modelo esférico quântico de vidro de spins com interação de troca entre p spins ($p \geq 2$). O modelo quântico é obtido através da quantização canônica do modelo clássico correspondente, introduzindo operadores de momentum canonicamente conjugados aos de spin. Os operadores de momentum aparecem em um termo de energia cinética dependente de um momento de inércia, que tem o papel de parâmetro de controle do caráter quântico do sistema. Devido ao espectro contínuo assumido para os autovalores de spin, utilizamos a condição esférica média para garantir um valor médio por spin que permanece finito no limite termodinâmico. As constantes de troca, consideradas de alcance infinito, são variáveis aleatórias com distribuição gaussiana de média nula, cuja largura determina o grau de desordem, como é usual em modelos de vidro de spins. As médias configuracionais são feitas através do método de réplicas. A partir de um conjunto de relações exatas obtidas para um p genérico, são estudados casos particulares, como $p = 2$, para comparação com resultados da literatura, o limite $p \rightarrow \infty$ e o caso $p = 3$, estes dois últimos apenas na aproximação estática. São calculadas quantidades físicas relevantes em função da temperatura e dos parâmetros do modelo, construídos diagramas de fases, e investigada a estabilidade das soluções obtidas sob a hipótese de simetria de réplicas. O primeiro estágio de quebra de simetria de réplicas é desenvolvido em alguns dos casos estudados.

Abstract

In this work, we present study of the spherical quantum spin-glass model with exchange interactions between p spins ($p \geq 2$). The quantum model is obtained by canonical quantization of the corresponding classical model, introducing momentum operators canonically conjugate to the spin ones. The momentum operators appear in a kinetic-energy term depending on a moment of inertia, which plays the role of control parameter of the system's quantum character. Due to the continuous eigenvalue spectrum assumed for the spins, we use the spherical constraint to assure a finite average value per spin in the thermodynamic limit. The exchange constants, taken as infinite in range, are random variables with Gaussian distribution of zero average, whose width determines the degree of disorder, as usual in spin-glass models. Configurational averages are performed by means of the replica trick. Starting from a set of exact equations derived for a generic p , some particular cases are studied, as $p = 2$, for comparison with results from the literature, the $p \rightarrow \infty$ limit, and the case $p = 3$, the last two only within the static approximation. Relevant physical quantities are evaluated as functions of the temperature and the model parameters, phase diagrams are constructed, and the stability of solutions obtained under the hypothesis of replica symmetry is investigated. The first stage of replica-symmetry breaking is developed for some of the studied cases.

Sumário

1	Introdução	1
2	Revisão Bibliográfica	8
2.1	Modelo de Edwards-Anderson	8
2.1.1	Parâmetro de ordem	9
2.2	Modelo SK	10
2.2.1	O método de réplicas	11
2.3	Modelo Esférico clássico de vidro de spins com interação de p spins	17
2.3.1	Abordagem via método de réplicas	17
2.4	Modelo esférico quântico de vidro de spins	21
3	Modelo Esférico quântico de vidro de spins com interação de p spins	25
3.1	O Modelo	25
3.1.1	Média configuracional – método de réplicas	28
3.2	Primeiros passos para uma solução exata	30
3.3	Um caso solúvel: $p = 2$	33
3.3.1	Solução com simetria de réplicas	33
3.3.2	Estabilidade das soluções com simetria de réplicas	44
3.3.3	Primeiro estágio de quebra de simetria de réplicas	49
4	Aproximação Estática: limites $p = 2$ e $p \rightarrow \infty$	54
4.1	Teste da Aproximação Estática para $p = 2$	57
4.1.1	Solução paramagnética	58

4.1.2	Solução de vidro de spins	61
4.2	O limite $p \rightarrow \infty$	63
5	Aproximação estática no caso $p = 3$	68
5.1	Solução paramagnética	69
5.2	Fase de vidro de spins	73
5.3	Diagrama de fases	76
5.4	Estabilidade das soluções com simetria de réplicas	78
5.5	Quebra de simetria de réplicas	81
5.5.1	Diagrama de fases 1RSB	86
6	Considerações Finais	91
A	Condição Esférica	94
B	Energia Livre	98
C	Grande Potencial	104
D	Cálculo do Traço	109
	Referências Bibliográficas	111

Capítulo 1

Introdução

Vidro de spins é um tópico da física da matéria condensada muito interessante que surgiu na primeira metade da década de 70. A teoria de vidro de spins causou grande impacto em outras áreas de pesquisa: teoria de redes neurais, teoria de vidros supercondutores, problemas de otimização combinatória.

Até hoje, embora existam numerosos trabalhos publicados sobre a teoria de vidro de spins, não se chegou ainda num consenso das propriedades fundamentais deste sistema. Portanto, vidro de spins é uma área muito ativa na física e sendo um campo aberto para novas idéias e conceitos, novos experimentos devem ser feitos.

A denominação *vidro de spins* surgiu para designar uma classe de ligas metálicas como CuMn ou AuFe, que são formados, por exemplo, a partir de metais nobres (Au, Ag, Cu, Pt) fracamente diluídos com íons de metais de transição magnéticos, como o Fe e Mn. O FeCr, $\text{Eu}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}$, etc., também são exemplos de materiais que apresentam a fase vidro de spin. Deve-se notar que o $\text{Eu}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}$, com x entre 0.1 e 0.5, é um isolante e também apresenta propriedades da fase vidro de spins [1]. Uma das razões para o nome vidro de spins é devido a que os momentos magnéticos (associados aos spins) apresentam localmente uma orientação fixa mas sem qualquer ordenamento periódico (figura (1.1)), o que conceitualmente lembra estruturas amorfas, como o vidro convencional.

A origem da física do acoplamento entre os spins que leva ao estado de vidro de spins em ligas metálicas pode ser entendida como uma interação entre impurezas mediadas pelos elétrons de condução. Os momentos magnéticos localizados das impurezas apresentam uma interação do tipo Kondo com os elétrons de condução do metal hospedeiro. Essa interação

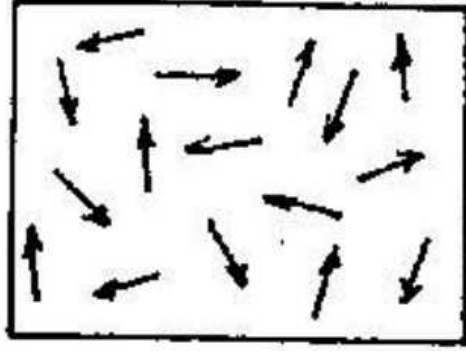


Figura 1.1: Imagem pictórica dos spins com orientações aleatórias.

é um acoplamento antiferromagnético local. Para os elétrons de condução, o efeito pode ser visto como equivalente a um campo magnético aplicado apenas na posição da impureza. Considerando-se a susceptibilidade magnética de um gás de elétrons, obtém-se uma polarização dos spins desses elétrons que decai com a distância à impureza e oscila com vetor de onda de módulo $2k_F$, isto é, o dobro do vetor de onda de Fermi. Quando se adiciona outra impureza, o seu spin “sente” (outra vez através da interação Kondo) um campo magnético local gerado pela polarização dos elétrons de condução, tendendo a se alinhar com esse campo. Assim, a interação dos elétrons de condução com os spins das impurezas leva a uma interação de troca indireta, conhecida como RKKY (Ruderman, Kittel, Kasuya e Yosida),

$$J(\mathbf{R}) = J_0 \frac{\cos(2\mathbf{k}_F \cdot \mathbf{R} + \phi_0)}{(\mathbf{k}_F \cdot \mathbf{R})}, \quad (1.1)$$

onde J_0 e ϕ_0 são constantes e \mathbf{k}_F é o vetor de onda de Fermi do metal. Aumentando-se o número de impurezas, e estando elas distribuídas aleatoriamente, o efeito resultante sobre cada um dos spins localizados favorecerá orientações aleatoriamente distintas e apresentará intensidades também variáveis.

Vidros de spins podem ser entendidos como conjuntos de spins (momentos magnéticos) que exibem uma fase congelada a baixas temperaturas, sem entretanto apresentarem ordenamento magnético de longo alcance como ocorre em casos usuais de ferromagnetos e antiferromagnetos. Dois ingredientes são necessários e parecem estar por trás deste tipo de comportamento, a saber, *frustração* e *desordem*.

A frustração consiste na impossibilidade do sistema minimizar, simultaneamente, a ener-

gia em todas as interações. O conceito de frustração pode ser facilmente entendido através do exemplo de uma rede triangular cpm *spins* de Ising e interações antiferromagnéticas. Em cada triângulo, escolhendo-se uma orientação para o spin em um dos vértices, um dos outros dois pode assumir uma orientação antiparalela ao primeiro, minimizando a energia de interação entre eles, mas o terceiro spin não pode ter uma orientação antiparalela aos outros dois simultaneamente.

Já o fato de o sistema ser desordenado implica que estas interações devem ser, ao menos parcialmente, aleatórias. Na discussão da interação RKKY, vimos essa aleatoriedade associada à distribuição de impurezas magnéticas diluídas em um metal não magnético. Por outro lado, alguns materiais apresentam desordem devido à suas estruturas amorfas. Este é o caso, por exemplo, de ligas metálicas como $\text{Al}_{0.63}\text{Gd}_{0.37}$, ou isolantes magnéticos como $\text{MnOAl}_2\text{O}_3\text{SiO}_2$ ou $\text{CoOAl}_2\text{O}_3\text{SiO}_2$ entre outros [1].

Várias técnicas experimentais têm sido utilizadas para determinar o comportamento dos vidros de spin. Experimentalmente, um sistema vidro de spin possui propriedades peculiares, das quais destaca-se como mais marcante o fato de que, ao ser excitado, o sistema pode alterar a configuração global dos spins, em lugar de evoluir reversivelmente em torno de um mínimo absoluto de sua energia livre global. O *salto* de uma configuração para outra dá lugar a metaestabilidade e comportamentos irreversíveis característicos de vidro de spins. Isso pode ser visualizado em uma medida experimental da susceptibilidade D.C., como ilustrado na figura (1.2) [1].

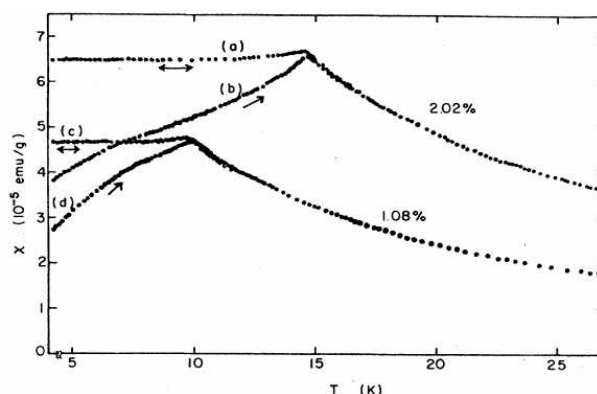


Figura 1.2: Medida de Susceptibilidade com campo magnético aplicado constante para duas ligas de CuMn com concentrações 1,08 e 2,02 por cento de Mn . Curvas (a) e (c) são obtidas pela medida de resfriamento com campo (FC), (b) e (d) são resultados de experimento com campo nulo (ZFC), de [1].

Susceptibilidade magnética D.C. mede a resposta da amostra a um campo magnético ex-

terno estático. Se um sólido exibe comportamento de vidro de spins, a variação da susceptibilidade magnética com a temperatura é irreversível, seguindo caminhos distintos se, por exemplo, o sistema é resfriado com ou sem campo magnético aplicado. A medida FC (*field cooling*), quando o resfriamento é feito na presença de campo, resulta em valores maiores do que os obtidos na medida ZFC (*zero-field cooling*), na qual o sistema é primeiro a campo nulo e então é aplicado o campo para medida da susceptibilidade enquanto a temperatura é aumentada (ver figura 1.2).

Existem vários modelos teóricos que procuram descrever a fase de vidro de spins. Uma revisão mais ou menos detalhada de alguns é apresentada e no capítulo 2. O primeiro modelo teórico para estudar a existência de uma fase de vidro de spins foi proposto por Edwards e Anderson [2]. Esse modelo é baseado em um hamiltoniano do tipo Ising que descreve spins dispostos em uma rede regular, com as interações de troca entre primeiros vizinhos sendo variáveis aleatórias com uma dada distribuição de probabilidades.

A teoria de campo média de vidro de spins clássicos foi desenvolvida pelo *modelo de David Sherrington e Scott Kirkpatrick* (SK) [3], como uma versão de alcance infinito do modelo de Edwards-Anderson [2].

O modelo mais conhecido que generaliza as interações para envolverem p -spins (em vez das interações de pares, geralmente utilizadas) foi proposto e resolvido por A. Crisanti e H. J. Sommers [4].

A baixas temperaturas, em geral espera-se que efeitos quânticos sejam relevantes. Partindo dessa premissa, foram propostas versões quânticas de modelos teóricas para descrever a fase vidro de spins nesse regime de temperatura. Vamos mencionar duas dessas propostas, que estabelecem linhas de investigação bastante distintas.

T. Obuchi, H. Nishimori e D. Sherrington [5] propuseram um modelo quântico de vidro de spins de Ising com interação a p -spins, no qual existe um campo magnético aplicado transversalmente à direção da componente de spin envolvida na interação de Ising. O campo transversal aplicado ao sistema dá origem a um efeito quântico causado pelas flutuações quânticas. As flutuações de spin devidas ao campo transversal vão contra o ordenamento de spins e decrescem o valor da temperatura crítica.

Por fim, Pedro C. Menezes e Alba Theumann [6] estudaram um modelo esférico de rotores

quânticos [15], onde o momento de inércia I dos rotores é o parâmetro quântico fixo, inserido no Hamiltoniano junto ao operador de momentum canônico \hat{P} em um termo de energia cinética dos rotores. Os spins S_i são encarados como operadores de posição dos rotores devendo valer, deste modo, a relação de comutação $[\hat{S}_j, \hat{P}_k] = i\hbar\delta_{j,k}$. No limite $I \rightarrow \infty$ obtemos o limite clássico.

Propomo-nos a trabalhar com os modelos esféricos de vidros de spins (alguns apresentados no capítulo (2)), nestes, os cálculos tornam-se mais simples do ponto de vista analítico. Em tais modelos consideramos as variáveis de spins *contínuas*, isto é, $-\infty \leq S_i \leq \infty$, sujeitas ao vínculo esférico (*condição esférica*),

$$\sum_{i=1}^N S_i^2 = N, \quad (1.2)$$

onde N é o número de spins do sistema.

Inicialmente o *modelo esférico* para um ferromagneto foi proposto por T.H. Berlin e M. Kac [7] para estudar fenômenos de transição de fase em sistemas com ordem ferromagnética. O modelo é exatamente solúvel em três dimensões. A *condição esférica* (1.2) é ponto fundamental na abordagem desse modelo, devendo ser introduzida como um vínculo ao sistema utilizando-se um *multiplicador de Lagrange*.

No presente trabalho consideramos o *modelo esférico médio* onde a condição esférica (1.2) é substituída por

$$\sum_{i=1}^N \langle S_i^2 \rangle = N. \quad (1.3)$$

O modelo esférico quântico de vidro de spin com interação aos pares (caso $p = 2$) tem seus resultados bem estabelecidos para $T > T_c$, (P. C. Menezes e Alba Theumann [6]). No artigo [8] Alba Theumann constata que a ação é *supersimétrica* e usa o método da *superálgebra* para resolver exatamente o modelo esférico clássico de vidro de spins com $p = 2$, mostrando que é necessária apenas uma réplica para tal solução deste modelo. Baseado neste artigo, Pedro Castro Menezes e Alba Theumann [6] mostram que a *ação efetiva* do modelo esférico quântico em questão é invariante sobre uma forma generalizada de supersimetria de Becchi-Rouet-Stora-Tyutin, e assim um resultado via *média recozida* (*annealed average*) é exato para este modelo, mas não é apresentada qualquer abordagem para $T \leq T_c$.

Apresentamos no capítulo (2) alguns modelos e teorias de vidros de spins, que seguem

essencialmente uma ordem cronológica e foram escolhidos de modo a embasar nossos desenvolvimentos ao longo da tese. Em particular, na revisão do modelo de Sherrington-Kirkpatrick é apresentado o *método de réplicas* [9]. São também revistos o modelo quântico de vidro de spins, que servirá de comparação para um dos casos desenvolvidos na tese, e o modelo clássico de vidro de spins com interação de p spins, cuja versão quântica será o foco do nosso trabalho.

O núcleo básico da tese é desenvolvido no capítulo 3, começando por quantizar o modelo clássico apresentado por A. Crisanti e H. Sommers [4] à luz do modelo estudado por P. Shukla [10], onde substituímos as variáveis clássicas de spin por operadores canônicos de posição (posição dos rotores), inserindo o termo de inércia associado à energia rotacional dos rotores quânticos (introdução dos operadores quânticos de momentum), satisfazendo a relação de comutação canônicas, e o termo com um multiplicador de Lagrange responsável por assegurar o vínculo esférico, nos moldes que apresentamos no capítulo (3.3). Utilizamos o formalismo das integrais de caminho de Feynman [11, 12] com o intento de escrevermos a função de partição do sistema como função dos acoplamentos aleatórios J_{i_1, \dots, i_p} . A aleatoriedade do modelo é tratada via método das réplicas.

Neste capítulo, iniciamos com uma tentativa de resolver exatamente o problema, mas revelando a necessidade de se aplicar algum método de aproximação devido às limitações matemáticas que dificultam uma solução para um valor genérico de p . Analisamos, então, em detalhe o caso $p = 2$, para verificar o seu comportamento no formalismo de réplicas. A condição esférica média (3.57) é utilizada para obter o *parâmetro de ordem*, onde percebemos que abaixo de T_c apenas o modo *zero* das frequências de Matsubara “sobrevive”, enquanto que para a construção do diagrama de fases (3.2) faz-se necessário levar em consideração a soma sobre todas essas frequências. Um estudo da estabilidade do sistema é feito através do autovalor crítico de Almeida e Thouless [13], sendo este positivo para $T > T_c$ e nulo para $T \leq T_c$, caracterizando uma condição de *estabilidade marginal*. O primeiro estágio para a quebra da simetria entre as réplicas (1RSB), seguindo o esquema de G. Parisi [14], é realizado e obtemos que a única solução possível para o modelo é aquela obtida sob hipótese de simetria entre réplicas. A energia livre, bem como as quantidades termodinâmicas são encontradas e concordam com as obtidas na Ref. [6] através de um método que não envolve réplicas.

No capítulo 4, consideramos a aplicação para outros valores de p através da chamada

aproximação estática (4), na linha das técnicas desenvolvidas na Ref. [5], que consistem em considerar que os campos introduzidos desacoplam as interações, e que introduzem acoplamento entre réplicas, são estáticos. Neste contexto, estudamos os casos especiais $p = 2$ e $p = \infty$. O estudo do primeiro, em comparação com a solução mais rigorosa do capítulo 3, servirá para verificar em qual regime a aproximação estática é mais adequada. Já o segundo caso ($p = \infty$) as equações se tornam bem mais simples do ponto de vista analítico. Encontramos o sistema apenas na fase paramagnética, sendo obtida a energia livre bem como as quantidades termodinâmicas.

No capítulo 5, ainda na aproximação estática, são estudados as fases paramagnética e vidro de spin para o caso particular $p = 3$. Duas fases paramagnéticas são encontradas, além da fase de vidro de spins, sendo construídos diagramas de fases e estudada a estabilidade das fases encontradas, o que é feito inicialmente sob a hipótese de simetria de réplicas e posteriormente no primeiro estágio de quebra de simetria entre réplicas (1RSB).

O capítulo 6 apresenta nossas considerações finais. Alguns detalhes matemáticos são apresentados em Apêndices ao final do trabalho.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

Neste capítulo vamos apresentar alguns modelos e teorias conhecidas de vidro de spins, tanto para vidros de spins clássicos quanto quânticos.

2.1 Modelo de Edwards-Anderson

O primeiro modelo teórico para estudar a existência de uma fase vidro de spin (VS) foi proposto por Edwards e Anderson [2]. Esse modelo é baseado em um hamiltoniano do tipo Ising, descrevendo spins dispostos em uma rede regular, com as interações de troca sendo variáveis aleatórias com uma dada distribuição de probabilidades. Assim, o modelo guarda a aleatoriedade das interações gerada pelo mecanismo RKKY, mas elimina a desordem posicional, colocando um spin em cada sítio de uma rede regular. O hamiltoniano do modelo pode ser expresso por

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j, \quad (2.1)$$

onde J_{ij} são variáveis aleatórias, com uma distribuição de probabilidades adequada, a soma é realizada sobre todos os sítios da rede, com a condição $i \neq j$, e os spins são descritos por variáveis escalares S_i , que podem assumir os valores ± 1 .

O modelo foi inicialmente proposto para interações de primeiros vizinhos, mas pode ser estendido. Dependendo do alcance das interações, tal modelo não possui solução analítica, e mesmo a obtenção de soluções numéricas apresenta vários problemas.

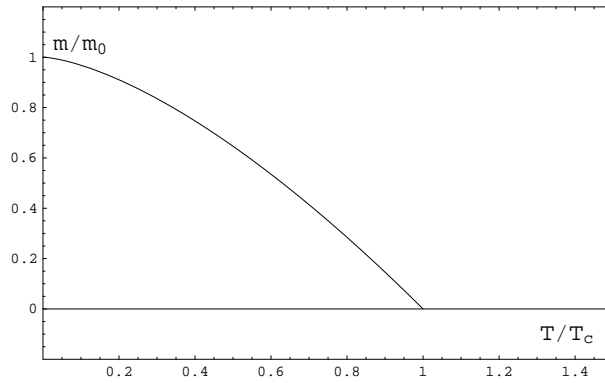


Figura 2.1: Parâmetro de ordem (magnetização espontânea) em função da temperatura para um ferromagneto.

2.1.1 Parâmetro de ordem

Um dos conceitos mais importantes da física estatística, no contexto de transições de fase, é o de *parâmetro de ordem*. Podemos defini-lo como sendo um parâmetro físico que caracteriza um estado de quebra de simetria, apresentando um valor não nulo na fase dita *ordenada* e nulo na fase *desordenada*.

No caso de um ferromagneto na ausência de campo externo, a magnetização espontânea \mathbf{m} é o parâmetro de ordem. Ela se anula acima de T_c , denominada *temperatura de Curie*, caracterizando a existência de uma fase simétrica. Abaixo de T_c , a simetria, que é de rotação dos momentos magnéticos, é quebrada e $m \neq 0$, com sua orientação definindo uma direção especial no espaço. Para um modelo de Ising, a simetria quebrada é de inversão ($S_i \rightarrow -S_i$). Neste caso, a magnetização é um escalar, sendo definida por $m = \langle S_i \rangle_T$, onde $\langle \dots \rangle_T$ denota a média térmica, que é independente de sítio devido à simetria de translação do ferromagneto. A variação do módulo da magnetização com a temperatura é apresentada esquematicamente na Fig. 2.1.

No caso de vidros de spin, a definição da magnetização deve envolver uma média sobre configurações das interações [1],

$$m = [\langle S_i \rangle_T]_{ca} , \quad (2.2)$$

onde $[\dots]_{ca}$ refere-se à média configuracional (*configurational average*). Considerando uma distribuição de interações com média nula, a equação acima implica em $m = 0$, o que é consistente com a observação de que a magnetização **global** de um vidro de spins é sempre nula. Portanto, a magnetização espontânea **não** pode ser tomada como parâmetro de ordem

para os vidros de spins.

Por outro lado, a imagem física de um sistema de momentos magnéticos “congelados” em orientações aleatórias permite inferir que o **módulo** do momento magnético local é não nulo em equilíbrio termodinâmico para uma dada configuração das interações. Assim, pode-se definir um parâmetro de ordem com a forma [1]

$$q = [\langle S_i \rangle_T^2]_{ca} , \quad (2.3)$$

que deve ser não nulo na fase de vidro e nulo na fase paramagnética.

O parâmetro de ordem q é intimamente relacionado com a proposta original de Edwards e Anderson [2], que pode ser escrita como

$$q_{EA} = \lim_{t \rightarrow \infty} [\langle S_i(t_o) S_i(t_o + t) \rangle_T]_{ca} . \quad (2.4)$$

Este parâmetro é de natureza dinâmica, verificando se os spins permanecem “congelados”, isto é, se existe uma probabilidade finita de observar um dado spin apontando no mesmo sentido após um longo período de tempo.

Como veremos, o parâmetro de ordem q aparece de formas um pouco distintas dependendo do método de cálculo utilizado.

2.2 Modelo SK

A teoria de campo médio para vidros de spins é normalmente formulada através do *modelo de Sherrington e Kirkpatrick* (SK) [3], que é uma versão de alcance infinito do modelo de Edwards-Anderson.

Incluindo um campo magnético aplicado, o hamiltoniano do modelo SK é

$$\mathcal{H} = - \sum_{(ij)} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i, \quad (2.5)$$

onde H é o campo externo, os spins $S_i \in \{+1, -1\}$, a soma em (ij) é feita sobre todos pares de sítios da rede (cada par contribui uma única vez) e as constantes de troca J_{ij} são aleatórias,

com uma distribuição gaussiana de média J_0/N e variância J^2/N , ou seja,

$$p(J_{ij}) = \sqrt{\frac{N}{2\pi J^2}} e^{-N \frac{(J_{ij} - J_0/N)^2}{2J^2}}, \quad (2.6)$$

Considerando que a distribuição é a mesma para qualquer par ij na rede, a dependência da média e da variância com o número de sítios N é necessária para garantir soluções fisicamente aceitáveis e não triviais no limite termodinâmico.

2.2.1 O método de réplicas

O primeiro passo no estudo teórico de um sistema termodinâmico deve ser o cálculo da energia livre, pois quaisquer grandezas físicas podem ser obtidas através de derivadas dessa quantidade. Na presença de desordem, a homogeneidade do sistema é quebrada em alguma escala finita. Porém, o sistema ainda é macroscopicamente homogêneo, no sentido de que distintas frações macroscópicas do mesmo devem ser equivalentes. Para que as quantidades calculadas reflitam isso, é necessário fazer a média sobre as possíveis configurações da desordem antes de tomar o limite termodinâmico.

No caso de desordem “congelada” (*quenched*), o equilíbrio térmico é atingido sem alteração da configuração de desordem. Isto significa que os estados microscópicos do sistema dependem de configuração, e a média configuracional deve ser feita na energia livre. Ao contrário, se a desordem sofre relaxação rápida, os estados microscópicos refletem essa desordem “termalizada” (*annealed*) e a média configuracional deve ser feita sobre a função de partição.

Vidros de spin se caracterizam por desordem congelada. Então, a energia livre por sítio (ou por spin) é definida como

$$f \equiv -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} [\log(Z)]_{\text{ca}}, \quad (2.7)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, Z é a função de partição (canônica), dada por

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}} \quad (2.8)$$

sendo o traço sobre as variáveis de spin.

A média configuracional do logaritmo (natural) de Z usando a distribuição (2.6) não tem um desenvolvimento simples como seria o caso da média da própria função de partição Z , que tem uma forma exponencial. É usual, então, lançar mão do “truque das réplicas” (*replica trick*), que passamos a descrever.

Usando a identidade

$$\log(x) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{x^n - 1}{n} \quad (2.9)$$

aplicada à função de partição Z , e considerando que o limite $n \rightarrow 0$ pode ser visto como aplicado à continuação analítica de uma função de n obtida para n **inteiro**, Z^n pode ser expressa como

$$Z^n = \prod_{\alpha=1}^n Z_\alpha. \quad (2.10)$$

Cada função Z_α é interpretada como a função de partição de uma das n *réplicas* idênticas do sistema. O índice α passa a ser referido como *índice de réplica*.

Vamos utilizar esse método de réplicas para calcular a energia livre (2.7), escrevendo

$$f = -k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \{ [Z^n]_{\text{ca}} - 1 \}. \quad (2.11)$$

O problema está em calcular a média configuracional $[Z^n]_{\text{ca}}$. Lembrando que essa média se faz multiplicando uma quantidade dependente de J_{ij} pela distribuição (2.6) e integrando sobre J_{ij} , usando a Eq. (2.10) escrever

$$Z^n = \prod_{\alpha=1}^n Z_\alpha = \prod_{\alpha=1}^n \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}(S^\alpha)}, \quad (2.12)$$

onde

$$\mathcal{H}(S^\alpha) = - \sum_{(ij)} J_{ij} S_i^\alpha S_j^\alpha - H \sum_i S_i^\alpha, \quad (2.13)$$

e empregando a conhecida identidade de Hubbard-Stratonovich,

$$e^{\lambda a^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-\frac{1}{2}x^2 + \sqrt{2\lambda} a x}, \quad (2.14)$$

obtemos

$$[Z^n]_{\text{ca}} = \text{Tr}_n \left[\exp \left(\sum_{(ij)} \left(\frac{\beta J_0}{N} \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} + \frac{(\beta J)^2}{2N} \sum_{\alpha\nu} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} S_i^{\nu} S_j^{\nu} \right) + \beta H \sum_i \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} \right) \right], \quad (2.15)$$

onde Tr_n denota o traço sobre as variáveis de spin das n réplicas.

Levando em conta que $(S_i^{\alpha})^2 = 1$, pode-se extrair o termo $\nu = \alpha$ da dupla soma sobre réplicas. Além disso, os termos de interação podem ser desmembrados através de duas transformações de Hubbard-Stratonovich, introduzindo campos auxiliares x_{α} e $y_{\alpha\nu}$, o que leva a

$$[Z^n]_{\text{ca}} = e^{\frac{(\beta J)^2}{4} n N} \text{Tr}_n \left[e^{\beta H \sum_{\alpha} \sum_i S_i^{\alpha}} \prod_{\alpha} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx_{\alpha} e^{-\frac{1}{2} x_{\alpha}^2 + \sqrt{\frac{\beta J_0}{N}} x_{\alpha} \sum_i S_i^{\alpha}} \right. \\ \left. \times \prod_{\alpha < \nu} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dy_{\alpha\nu} e^{-\frac{1}{2} y_{\alpha\nu}^2 + \sqrt{\frac{(\beta J)^2}{N}} y_{\alpha\nu} \sum_i S_i^{\alpha} S_i^{\nu}} \right], \quad (2.16)$$

tendo-se desprezado uma correção de ordem $1/N$ no expoente do primeiro fator. Fazendo as trocas de variáveis

$$x_{\alpha} \rightarrow \sqrt{N\beta J_0} m_{\alpha}, \quad y_{\alpha\nu} \rightarrow \sqrt{N}\beta J q_{\alpha\nu} \quad (2.17)$$

obtem-se

$$[Z^n]_{\text{ca}} = e^{\frac{(\beta J)^2}{4} n N} \int \int \left[\prod_{\alpha} \sqrt{\frac{N\beta J_0}{2\pi}} dm_{\alpha} \right] \left[\prod_{\alpha,\nu} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \beta J dq_{\alpha,\nu} \right] \\ \times \exp \left\{ -N \left[\beta J_0 \sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha}^2}{2} + (\beta J)^2 \sum_{\alpha\nu} \frac{q_{\alpha\nu}^2}{2} - \log(\text{Tr } L) \right] \right\}, \quad (2.18)$$

onde definimos

$$L \equiv (\beta J)^2 \sum_{\alpha < \nu} q_{\alpha\nu} S^{\alpha} S^{\nu} + \beta \sum_{\alpha} (J_0 m_{\alpha} + H) S^{\alpha}. \quad (2.19)$$

Temos, então,

$$[Z^n]_{\text{ca}} = \exp \left(\frac{N(\beta J)^2 n}{4} \right) \int \prod_{\alpha < \nu} dq_{\alpha\nu} \int \prod_{\alpha} dm_{\alpha} \\ \times \exp \left(-N \frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{\alpha < \nu} q_{\alpha\nu}^2 - N \frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + N \log(\text{Tr}[e^L]) \right). \quad (2.20)$$

Tendo em vista o fator N no expoente do integrando nesta última equação, para N muito grande (mas ainda finito) podemos resolver as integrais pelo método do ponto de sela (“steepest descents”). Obtemos, então,

$$[Z^n]_{ca} \approx \exp \left(-N \frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{\alpha < \nu} q_{\alpha\nu}^2 - N \frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + N \log(\text{Tr}[e^L]) + Nn \frac{(\beta J)^2}{4} \right), \quad (2.21)$$

onde m_{α} e $q_{\alpha\nu}$ são, agora, os valores que minimizam o expoente, ou seja,

$$q_{\alpha\nu} = \frac{1}{(\beta J)^2} \frac{\partial}{\partial q_{\alpha\nu}} \log(\text{Tr}[e^L]) = \frac{\text{Tr}[S^{\alpha} S^{\nu} e^L]}{\text{Tr}[e^L]} \equiv \langle S^{\alpha} S^{\nu} \rangle_L, \quad (2.22)$$

e

$$m_{\alpha} = \frac{1}{\beta J_0} \frac{\partial}{\partial m_{\alpha}} \log(\text{Tr}[e^L]) = \frac{\text{Tr}[S^{\alpha} e^L]}{\text{Tr}[e^L]} \equiv \langle S^{\alpha} \rangle_L. \quad (2.23)$$

Deve-se notar que, devido às somas sobre réplicas, o expoente na Eq. (2.21) tem pelo menos um fator n . Então, no limite $n \rightarrow 0$ que deve ser tomado para obter a energia livre por spin, conforme a Eq. (2.11), podemos expandir a exponencial da Eq. (2.21), o que nos dá a energia livre

$$-\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \left\{ -\frac{(\beta J)^2}{4n} \sum_{\alpha \neq \nu} q_{\alpha\nu}^2 - \frac{\beta J_0}{2n} \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + \frac{1}{n} \log(\text{Tr}[e^L]) + \frac{(\beta J)^2}{4} \right\}. \quad (2.24)$$

Note que as condições de ponto de sela (2.22) e (2.23) reproduzem, consistentemente, as condições de minimização da energia livre,

$$\frac{\partial f}{\partial q_{\alpha\nu}} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial m_{\alpha}} = 0. \quad (2.25)$$

Então, as expressões (2.22) e (2.23) nos permitem interpretar $q_{\alpha\nu}$ e m_{α} como sendo o parâmetro de ordem de vidro de spins e a magnetização, respectivamente. Assim, L [Eq. (2.19)] define um hamiltoniano efetivo, $\mathcal{H}^{\text{ef}} = -L/\beta$, que é de campo médio (um único sítio) mas dá conta da desordem ($J \neq 0$) através de um termo de interação entre réplicas.

Solução com simetria de réplicas

A solução física, obtida no limite $n \rightarrow 0$, deve fornecer os parâmetros de ordem relevantes, no caso, a magnetização m e o parâmetro de vidro de spin q . Entretanto, as equações (2.24) e (2.25) teriam que ser resolvidas para um n arbitrário, buscando obter todas as quantidades como uma função analítica de n . A dificuldade desse problema genérico leva à busca de hipóteses simplificadoras sobre a estrutura dos parâmetros $q_{\alpha\nu}$ e m_α . A solução mais simples consiste em utilizar a **hipótese de simetria de réplicas**, isto é, considerar $q_{\alpha\nu} = q$ e $m_\alpha = m$, independentes dos índices de réplicas. Com essa hipótese levada à Eq. (2.24), e utilizando novamente uma transformação de Hubbard-Stratonovich para lidar com o termo de interação entre réplicas em L , podemos escrever a energia livre como

$$-\beta f = \frac{(\beta J)^2}{4}(1 - q)^2 - \frac{1}{2}\beta J_0 m^2 + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dz e^{-\frac{1}{2}z^2} \log(2 \cosh(\Xi)), \quad (2.26)$$

onde $\Xi = \beta(J_0 m + J\sqrt{q}z + H)$. Daí resulta as equações autoconsistentes

$$m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dz e^{-\frac{1}{2}z^2} \tanh(\Xi), \quad (2.27)$$

$$q = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dz e^{-\frac{1}{2}z^2} \tanh^2(\Xi). \quad (2.28)$$

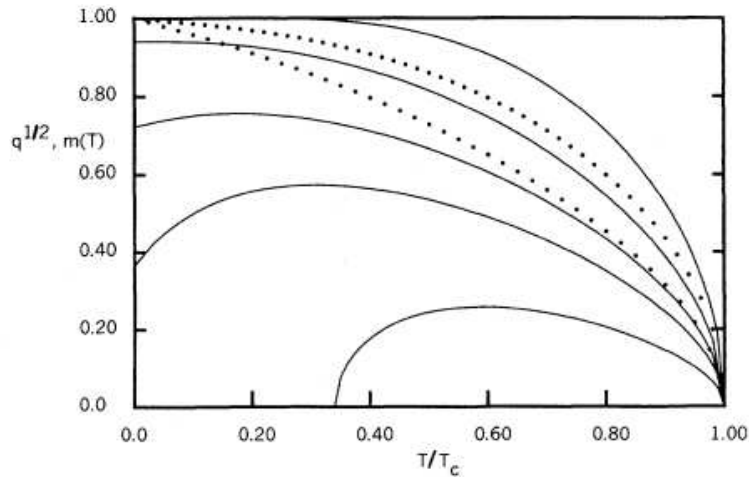


Figura 2.2: Algumas curvas de $m(T)$ (linhas sólidas), para $J_0/J = \infty, 2.0, 1.5, 1.3, 1.1$ (de cima para baixo), e duas curvas de $q^{1/2}(T)$ (linhas pontilhadas), para $J_0/J = 2.0$ (curva superior) e $J_0/J = 0.0$ (curva inferior). [9]

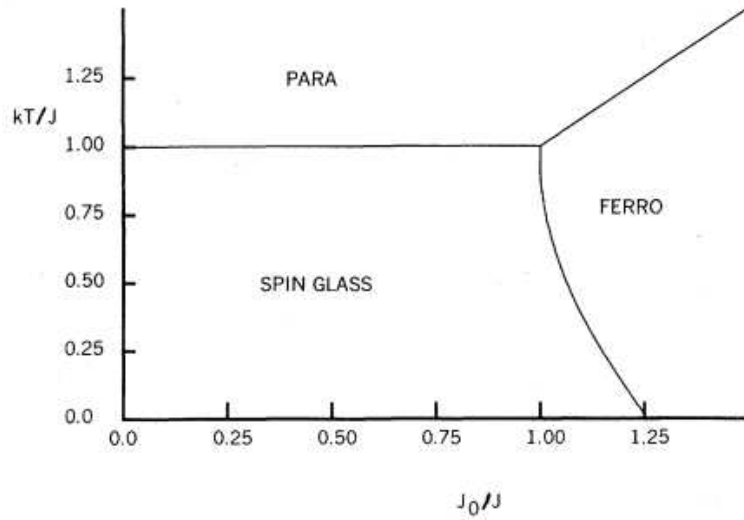


Figura 2.3: [Adaptada de [9]] Diagrama de fases (T/J vs. J_0/J) do modelo Sherrington-Kirkpatrick a campo nulo. Estão indicadas as regiões correspondentes às fases paramagnética, ferromagnética e de vidro de spins.

Resultados numéricos

A Fig. 2.2 apresenta algumas curvas $q^{1/2}(T)$ e $m(T)$ para $H = 0$ e diferentes valores J_0/J , obtidas numericamente [9] de (2.27) e (2.28). É interessante observar que para $J_0/J = 1.1$ existe um intervalo de temperaturas onde $m(T) = 0$ e $q^{1/2}(T) \neq 0$, caracterizando a fase vidro de spin. As temperaturas estão normalizadas pela temperatura crítica correspondente a cada caso, de forma que não existe solução com qualquer dos parâmetros de ordem não nulo acima de $T/T_c = 1$.

É possível obter um diagrama de fases resolvendo as equações (2.26) e (2.27) para valores variáveis de J_0/J e kT/J . Tal diagrama, a campo nulo, está apresentado na Fig. (2.3). Na fase paramagnética, as soluções estáveis são $m = q = 0$, o que ocorre quando são satisfeitas as condições $kT/J > 1$ e $kT/J > J_0/J$. A fase ferromagnética, na qual $m \neq 0$ e $q \neq 0$, é estável para J_0/J relativamente grande e baixa temperatura. Por fim, a fase de vidro de spins caracteriza-se por $m = 0$ e $q \neq 0$, sendo estável para baixas temperaturas e valores pequenos de J_0/J . As linhas de transição entre a fase paramagnética e as fases ferromagnética e de vidro de spins podem ser obtidas analiticamente, tomando o limite de m e q pequenos nas Eqs. (2.26) e (2.27). Já a linha de transição entre as fases ferromagnética e vidro de spins é obtida da solução numérica dessas equações.

2.3 Modelo Esférico clássico de vidro de spins com interação de p spins

Nesta seção, vamos abordar um modelo clássico de vidro de spins com interação entre conjuntos de p spins ($p \geq 2$), proposto por A. Crisanti e H. J. Sommers [4]. O hamiltoniano do modelo é dado por

$$\mathcal{H} = - \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1 \dots i_p} S_{i_1} \dots S_{i_p} - h \sum_{i=1}^N S_i. \quad (2.29)$$

As interações de troca $J_{i_1 \dots i_p}$ são variáveis aleatórias independentes, com distribuição gaussiana de média zero (evitando soluções com ordem magnética) e variância $\sigma^2 = \frac{p! J^2}{2N^{p-1}}$, que escala com N , assegurando uma energia livre extensiva. Ao contrário do modelo SK, as variáveis de spin não assumem apenas os valores ± 1 , mas são variáveis contínuas, reais e podem variar no intervalo $(-\infty, \infty)$. Deste modo, para fazer o modelo ficar bem definido, é imposto um vínculo global sobre a magnitude dos spins, que é a *condição esférica*,

$$\sum_{i=1}^N S_i^2 = N, \quad (2.30)$$

já comentada na Introdução (Capítulo 1). Essa escolha se baseia no *Modelo Esférico* para sistemas magnéticos, introduzido por Berlin e Kac [7].

2.3.1 Abordagem via método de réplicas

As propriedades de equilíbrio deste modelo podem ser obtidas através do método de réplicas (introduzido na seção (2.2.1)). Deste modo, escrevemos a função de partição *replicada* como sendo

$$Z^n = \text{Tr} \left[e^{-\beta \sum_{\alpha=1}^n \mathcal{H}(S^\alpha)} \right], \quad (2.31)$$

onde $\mathcal{H}(S^\alpha)$ é o hamiltoniano associado à réplica α , isto é,

$$\mathcal{H}(S^\alpha) = - \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1 \dots i_p} S_{i_1}^\alpha \dots S_{i_p}^\alpha - h \sum_{i=1}^N S_i^\alpha. \quad (2.32)$$

Para spins contínuos, o “traço” é definido como a **integral** sobre todos possíveis valores das variáveis de spin.

Efetuando-se a média configuracional através da integração sobre as constantes de troca, onde se utiliza uma identidade de Hubbard-Stratonovich, Eq. (2.14), para realizar a integral gaussiana, a média das potências inteiras de Z assume a forma

$$[Z^n]_{\text{ca}} = \text{Tr}_n \left\{ \exp \left[\frac{(\beta J)^2}{4} N \sum_{\alpha\nu} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^\alpha S_i^\nu \right)^p + \beta h \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^n S_i^\alpha \right] \right\}, \quad (2.33)$$

onde a soma restrita $\sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N}$ foi substituída por $\frac{1}{p!} \sum_{i_1 \dots i_p}$, que é correta até ordem $1/N^2$.

Neste ponto, Crisanti e Sommers [4] definem *overlaps* entre réplicas

$$q_{\alpha\nu} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^\alpha S_i^\nu, \quad (2.34)$$

que dão uma medida do grau de similaridade entre duas réplicas. A notação $q_{\alpha\nu}$ lembra o parâmetro de ordem de vidro de spin em sua versão de réplicas, como aparece no modelo SK (Seção 2.2.1). Essa conexão é, de fato, pertinente, pois a solução de ponto de sela para N grande seleciona o valor médio de um *overlap*, que coincide com o parâmetro de ordem definido na abordagem de réplicas do modelo SK.

É importante notar que, pelo vínculo esférico, a Eq. (2.34) implica em que $q_{\alpha\alpha} = 1$. Isto sugere que essa equação possa ser vista como um vínculo, que pode ser implementado, juntamente com o vínculo esférico, através de uma representação integral da função delta de Dirac, ou seja,

$$\prod_{\alpha} \delta \left(N q_{\alpha\nu} - \sum_{i=1}^N S_i^\alpha S_i^\nu \right) = \int_{-i\infty}^{i\infty} \prod_{\alpha\nu} \frac{N}{2\pi i} d\lambda_{\alpha\nu} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \nu} \lambda_{\alpha\nu} \left(N q_{\alpha\nu} - \sum_{i=1}^N S_i^\alpha S_i^\nu \right) \right], \quad (2.35)$$

Introduzindo esses vínculos na Eq. (2.33), através da integração sobre $q_{\alpha\nu}$ e $\lambda_{\alpha\nu}$ com o fator (2.35), o traço (integral) sobre os spins pode ser realizado, pois se reduz a uma integral gaussiana (generalizada). Após alguma manipulação algébrica e absorvendo constantes mul-

tiplicativas em uma notação compacta para os diferenciais, obtém-se

$$[Z^n]_{\text{ca}} = \int D\mathbf{q} D\boldsymbol{\lambda} e^{-NG(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda})}, \quad (2.36)$$

com

$$G(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda}) = -\frac{(\beta J)^2}{4} \sum_{\alpha\nu} q_{\alpha\nu}^p + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\nu} \lambda_{\alpha\nu} q_{\alpha\nu} - \log \left[\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha} dS^{\alpha} e^{\frac{1}{2} \sum_{\alpha\nu} \lambda_{\alpha\nu} S^{\alpha} S^{\nu} + \beta h \sum_{\alpha} S^{\alpha}} \right], \quad (2.37)$$

A integral no argumento do logaritmo é gaussiana e pode ser resolvida, resultando em

$$2G(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda}) = -n \log(2\pi) - \frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{\alpha\nu} q_{\alpha\nu}^p + \sum_{\alpha\nu} \lambda_{\alpha\nu} q_{\alpha\nu} + \log(\det(-\boldsymbol{\lambda})) + (\beta h)^2 \sum_{\alpha\nu} (\boldsymbol{\lambda}^{-1})_{\alpha\nu}, \quad (2.38)$$

onde $(\boldsymbol{\lambda}^{-1})_{\alpha\nu}$ são os elementos da matriz inversa de $\boldsymbol{\lambda}$.

De forma similar ao que foi feito para o modelo SK, a integração na Eq. (2.36) pode ser feita utilizando-se o *método do ponto de sela*. As equações de ponto de sela são dadas pela extremização do funcional $G(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda})$, isto é,

$$\frac{\partial G(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda})}{\partial \lambda_{\alpha\nu}} = 0, \quad \frac{\partial G(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda})}{\partial q_{\alpha\nu}} = 0. \quad (2.39)$$

A solução deste sistema determina as matrizes $\boldsymbol{\lambda}$ e \mathbf{q} de equilíbrio e, nesta aproximação (que se torna exata no limite termodinâmico), segue que

$$[Z^n]_{\text{ca}} = \frac{1}{\sqrt{|\det(\text{Hess}(G(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda})))|}} e^{-NG(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda})}, \quad (2.40)$$

onde $\text{Hess}(G(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda}))$ é a Hessiana de G nos extremos.

Utilizando a primeira condição da Eq. (2.39), podemos escrever $\boldsymbol{\lambda}$ como uma função de \mathbf{q} e, assim, $G(\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda}) = G(\mathbf{q})$. Com efeito, levando-se em conta que $\log(\det(\mathbf{A})) = \text{Tr}(\log(\mathbf{A}))$, temos que $\mathbf{q} = -\boldsymbol{\lambda}^{-1}$ ou $\boldsymbol{\lambda} = -\mathbf{q}^{-1}$. Levando este resultado à Eq. (2.38), e deixando de lado constantes aditivas, temos que

$$2G(\mathbf{q}) = -\frac{\mu}{p} \sum_{\alpha\nu} q_{\alpha\nu}^p - \log(\det(\mathbf{q})) - b^2 \sum_{\alpha\nu} q_{\alpha\nu}, \quad (2.41)$$

onde definimos $\mu \equiv p(\beta J)^2/2$ e $b \equiv \beta h$.

Usando, agora, a segunda condição da Eq. (2.39), temos

$$\mu q_{\alpha\nu}^{p-1} + b^2 + (\mathbf{q}^{-1})_{\alpha\nu} = 0, \quad \forall \alpha \neq \nu, \quad (2.42)$$

que determina $q_{\alpha\nu}$ para $\alpha \neq \nu$, já que os elementos da diagonal são fixados no valor $q_{\alpha\alpha} = 1$ pela condição esférica.

A obtenção dos elementos da matriz inversa \mathbf{q}^{-1} para um caso genérico é bastante difícil. Crisanti e Sommers [4] encontraram as soluções da Eq. (2.42) para dois casos com diferentes hipóteses simplificadoras: *simetria de réplicas* e *primeiro estágio de quebra de simetria de réplicas* [14].

Uma vez determinado $G(\mathbf{q})$, podemos obter a energia livre por spin a partir da Eq. (2.40). Como na seção 2.2.1, fatores n provenientes das somas sobre réplicas garantem que $G(\mathbf{q})$ é no mínimo de ordem n . Então, para N grande mas finito, o limite $n \rightarrow 0$ permite expandir a exponencial Eq. (2.40). Então, levando em conta que $s(\infty) = [1 + \log(2\pi)]/2$ é a entropia no limite de altas temperaturas, segue que podemos escrever a energia livre média por spin, no caso de simetria de réplicas, como

$$f = -\frac{s(\infty)}{\beta} + \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} G(q), \quad (2.43)$$

onde $s = S/N$.

Vamos, agora, calcular a segunda derivada de G com respeito a $q_{\alpha\nu}$, com o intento de estudarmos o sinal dos autovalores associados à forma quadrática em questão e, por conseguinte, a *estabilidade* da solução de ponto de sela (2.42). Seja $\epsilon^{\alpha\nu}$ um desvio de $q_{\alpha\nu}$ em relação à solução de ponto de sela. Esses desvios satisfazem as condições $\epsilon^{\alpha\nu} = \epsilon^{\nu\alpha}$ (válida para $q_{\alpha\nu}$ em geral) e $\epsilon^{\alpha\alpha} = 0$ (pela condição esférica).

Assim, substituindo-se $q_{\alpha\nu} \rightarrow q_{\alpha\nu} + \epsilon^{\alpha\nu}$ em (2.41), expandindo em potências de $\epsilon^{\alpha\nu}$ e restando apenas termos de segunda ordem, temos

$$2\delta^2 G = -\mu(p-1) \sum_{\alpha\nu} q_{\alpha\nu}^{p-2} (\epsilon^{\alpha\nu})^2 + \text{Tr}((\mathbf{q}^{-1}\boldsymbol{\epsilon})^2). \quad (2.44)$$

Esta é a forma quadrática que permite encontrar os autovalores e estudar seus respectivos sinais, sendo que as soluções de (2.42) são *estáveis* se os autovalores forem positivos e *instáveis* no caso contrário. Novamente, Crisanti e Sommers [4] abordam a equação (2.44) a partir da hipótese de simetria de réplica. Por fim, os autores mostram que, dentro do esquema de Parisi [14], o primeiro estágio de quebra de simetria de réplicas leva à solução exata para este modelo, que é resolvido explicitamente para qualquer p . A transição da fase paramagnética para a de vidro de spins pode ser de primeira ou segunda ordem, dependendo da intensidade do campo magnético externo, e na fase de vidro de spin existem infinitos estados metaestáveis.

2.4 Modelo esférico quântico de vidro de spins

Mostraremos aqui os principais resultados de P. C. Menezes e A. Theumann no estudo do modelo esférico quântico [6]. Os autores mostram que a ação efetiva do modelo é invariante sob uma forma de simetria generalizada de Becchi-Rouet-Stora-Tyutin. A identidade de Ward associada a essa invariância indica que o parâmetro de ordem de vidro de spin é nulo, e um resultado via média recozida (*annealed average*) é exato neste modelo.

O modelo é descrito pelo hamiltoniano,

$$\mathcal{H}_{SG} = \frac{1}{2I} \sum_{i=1}^N \hat{P}_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \hat{S}_i \hat{S}_j + \mu \sum_i \hat{S}_i^2, \quad (2.45)$$

onde I é o momento de inércia dos rotores quânticos [15], as variáveis de spin não contínuas ($-\infty < S_i < \infty$), o *momentum* canonicamente conjugado às variáveis de spin é introduzido via relação de comutação $[\hat{S}_j, \hat{P}_k] = i\delta_{jk}$, as soma em (2.45) significa $i, j = 1, \dots, N$ e os acoplamentos J_{ij} são variáveis aleatórias estatisticamente distribuídas por uma gaussiana de média zero e variância J^2/N . Além disso, μ é um multiplicador de Lagrange que assegura a condição esférica média, Eq. (2.30).

A função de partição Z pode ser expressa como integral funcional [11, 12].

$$Z = \int \prod_i DS_i e^{-\mathcal{A}_i - \mathcal{A}_{SG}}, \quad (2.46)$$

onde a ação não interagente \mathcal{A}_l é dada por

$$\mathcal{A}_l = \int_0^\beta d\tau \sum_i \left[\frac{I}{2} \left(\frac{dS_i(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \mu S_i^2(\tau) - H_i(\tau) S_i(\tau) \right] \quad (2.47)$$

e a parte interagente é

$$\mathcal{A}_{S\mathcal{G}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \int_0^\beta d\tau S_i(\tau) S_j(\tau). \quad (2.48)$$

Após realizarmos as transformadas de Fourier em τ e levando-se em conta que $S_i(\tau)$ é uma variável real, a função geradora pode ser escrita em termos da parte real $R_i(n)$ da transformada de Fourier $S_i(\omega_n) = S_i^*(\omega_n)$, onde $\omega_n = 2\pi n/\beta$ são as frequência de Matsubara para bósons. Como foi mostrado em [8] a função de correlação pode ser obtida da função geradora para duas réplicas,

$$\begin{aligned} \mathcal{W}(H) &= \prod_{n \geq 0} \|\Gamma_{ij}(n)\| \int \prod_{i,\alpha,n \geq 0} dR_{i\alpha}(n) \exp \left(- \sum_{\alpha,n \geq 0} \sum_{ij} \Gamma_{ij}(n) R_{i\alpha}(n) R_{j\alpha}(n) \right) \\ &\times \exp \left(\sum_{i\alpha} H_{i\alpha}(n) R_{i\alpha}(n) \right), \end{aligned} \quad (2.49)$$

onde o índice $\alpha = 1, 2$, $H_{i\alpha}(n)$ são campos auxiliares, e $\Gamma_{ij}(n) = (I\beta\omega_n^2 + 2\beta\mu)\delta_{ij} - J_{ij}\beta$.

O determinante $\|\Gamma_{ij}(n)\|$ pode ser calculado com ajuda dos campos auxiliares de Grassmann χ^* e χ . Assim, (2.49) assume a forma

$$\mathcal{W}(H_\alpha, \gamma) = \prod_{n \geq 0} \int \prod_{i,n \geq 0} d\chi_i^*(n) d\chi_i(n) \prod_{\alpha} dR_{i\alpha} e^{-G(H_\alpha, \gamma)}, \quad (2.50)$$

onde

$$\begin{aligned} G(H_\alpha, \gamma) &= \sum_{ij,n \geq 0} \Gamma_{ij}(n) \left(\frac{\chi_i^*(n)\chi_j(n) + \chi_j^*(n)\chi_i(n)}{2} + \sum_{\alpha} R_{i\alpha}(n) R_{j\alpha}(n) \right) \\ &+ \sum_{i,n \geq 0} \left(\frac{\gamma_i^*(n)\chi_i(n) + \chi_i^*(n)\gamma_i(n)}{2} + \sum_{\alpha} H_{i\alpha}(n) R_{i\alpha}(n) \right), \end{aligned} \quad (2.51)$$

onde $\chi_i^*(n)$ e $\chi_i(n)$ são variáveis complexas de Grassmann anticomutantes, enquanto que $R_{i\alpha}(n)$ ($\alpha = 1, 2$) são variáveis reais comutantes e introduzimos dois campos de Grassmann auxiliares, $\gamma_i(n)$ e $\gamma_i^*(n)$. Como os $\Gamma_{ij}(n)$ são simétricos, quando os campos auxiliares são

tomados iguais a zero o funcional (2.50) torna-se invariante sob a transformação supersimétrica

$$\begin{aligned}
\chi_i'^*(n)/\sqrt{2} &= \chi_i^*(n)/\sqrt{2} + \epsilon^* \sum_{\alpha} R_{i\alpha}(n)/\sqrt{2}, \\
\chi_i'(n)/\sqrt{2} &= \chi_i(n)/\sqrt{2} + \epsilon \sum_{\alpha} R_{i\alpha}(n)/\sqrt{2}, \\
R'_{i\alpha}(n) &= R_{i\alpha}(n) - \frac{\epsilon^* \chi_i(n)}{2} + \frac{\epsilon \chi_i^*(n)}{2},
\end{aligned} \tag{2.52}$$

onde ϵ é uma variável de Grassmann complexa e adotamos a convenção para conjugação complexa $\epsilon^{**} = -\epsilon$, $(\epsilon \chi_i)^* = \epsilon^* \chi_i^{**} = -\epsilon^* \chi_i$. Então, $R'_{i\alpha}(n)$ é uma variável real. A transformação difere infinitesimalmente da unidade, e $\epsilon^* \epsilon$ pode ser ignorado, embora este conceito de certa forma não faça sentido no caso de variáveis de Grassmann.

Agora, é conveniente trocar a notação de superálgebra, introduzindo o supervetor de campos auxiliares $\underline{J}_i^t = (H_{i1} H_{i2} \gamma_i/\sqrt{2} \gamma_i^*/\sqrt{2})$, onde o superscrito t denota a transposição do vetor e $\underline{S} \underline{J}_i^\dagger = (H_{i1} H_{i2} \gamma_i^*/\sqrt{2} - \gamma_i/\sqrt{2})$. Já para as variáveis de campo $\underline{\varphi}_i^t = (R_{i1} R_{i2} \chi_i/\sqrt{2} \chi_i^*/\sqrt{2})$ e $\underline{S} \underline{\varphi}_i = (R_{i1} R_{i2} \chi_i^*/\sqrt{2} - \chi_i/\sqrt{2})$. Desta forma, o funcional \mathcal{W} (2.50) pode ser escrito de forma compacta

$$\mathcal{W}(J) = \prod_{n \geq 0} \int \prod_{i, n \geq 0} d\chi_i^*(n) d\chi_i(n) \prod_{\alpha} dR_{i\alpha} e^{-\frac{1}{2} \sum_{ij} \underline{S} \underline{\varphi}_i^\dagger \mathbf{M}_{ij} \underline{\varphi}_i + \sum_i \underline{S} \underline{J}_i^\dagger \underline{\varphi}_i}, \tag{2.53}$$

que pode ser formalmente integrado, resultando em

$$\mathcal{W}(J) = e^{\frac{1}{2} \sum_{ijn} \underline{S} \underline{J}_i^\dagger \mathbf{Q}_{ij} \underline{J}_i}, \tag{2.54}$$

com as supermatrizes de ordem 4 dadas por

$$\mathbf{Q}_{ij} = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & \theta_{13} & \theta_{14} \\ q_{21} & q_{22} & \theta_{23} & \theta_{24} \\ \theta_{31} & \theta_{32} & v_{33} & 0 \\ \theta_{41} & \theta_{42} & 0 & v_{44} \end{pmatrix}_{ij}. \tag{2.55}$$

Por simetria, devemos ter

$$\begin{aligned} q_{11} &= q_{22} = \langle R_{i\alpha} R_{i\alpha} \rangle = v_{33} = v_{44} = \langle \chi^* \chi \rangle, \\ v_{34} &= v_{43} = \langle \chi \chi \rangle = \langle \chi^* \chi^* \rangle = 0. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Para derivar a identidade de Ward, levamos em conta que o sistema permanece invariante quando os campos são sujeitos à transformação de supersimetria (2.52) $\underline{\varphi}'_i = \mathbf{A} \underline{\varphi}_i$, onde

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\epsilon^*/\sqrt{2} & \epsilon/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & -\epsilon^*/\sqrt{2} & \epsilon/\sqrt{2} \\ \epsilon/\sqrt{2} & \epsilon/\sqrt{2} & 1 & 0 \\ \epsilon^*/\sqrt{2} & \epsilon^*/\sqrt{2} & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{I} + \mathbf{D}. \quad (2.57)$$

Então, o sistema deve permanecer também invariante quando os campos externos em (2.54) são transformados através de $\underline{J}' = \mathbf{A} \underline{J}$ e $\underline{S} \underline{J}' = \underline{S} \underline{J} \mathbf{S} \mathbf{A}^\dagger$, onde $\mathbf{S} \mathbf{A}^\dagger$ é uma determinada matriz superadjunta (Apêndice de [6]). Esta condição conduz a $\mathbf{S} \mathbf{D}^\dagger \mathbf{Q} + \mathbf{Q} \mathbf{D} = \mathbf{0}$, de onde deduzimos que $v_{33} = q_{11} + q_{12}$ e $v_{44} = q_{22} + q_{21}$. Com isso, de (2.56) obtemos que o “overlap” entre as duas réplicas é $q_{12} = q_{21} = 0$.

Em conclusão, o parâmetro de ordem de vidro de spins $q = q_{12}$ anula-se identicamente. Logo, fazer a média via recozimento (*annealing*) é exato no modelo esférico quântico, assim como discutido em [8] para o modelo clássico.

Capítulo 3

Modelo Esférico quântico de vidro de spins com interação de p spins

Estudaremos, neste capítulo, o *modelo esférico quântico de vidro de spins com interação a p -spins*. O modelo é obtido pela quantização do modelo clássico de Crisanti e Sommers [4], substituindo as variáveis clássicas de spin por operadores canônicos de posição [10, 15] e introduzindo *momenta* canonicamente conjugados aos operadores “de spin”, como foi feito em [6] para o modelo com interação de pares. Esses *momenta* aparecem em um termo energia cinética no hamiltoniano, contendo um momento de inércia, de forma que o sistema de spins pode ser interpretado como um sistema de rotores quânticos. O vínculo esférico é mantido.

Utilizaremos o formalismo das integrais de caminho de Feynman [11, 12] com o intento de escrevermos a função de partição do sistema como uma função dos acoplamentos aleatórios J_{i_1, \dots, i_p} . A média configuracional para obter a energia livre será tratada via método de réplicas.

3.1 O Modelo

O hamiltoniano do modelo esférico quântico de vidro de spin com interação de p spins é dado por

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2I} \sum_{i=1}^N \hat{P}_i^2 - \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1 \dots i_p} \hat{S}_{i_1} \dots \hat{S}_{i_p} + \mu \sum_{i=1}^N \hat{S}_i^2, \quad (3.1)$$

onde os operadores de spin têm autovalores contínuos $S_i \in (-\infty, \infty)$, \hat{P}_i é o operador momento canonicamente conjugado a \hat{S}_i , satisfazendo a relação de comutação

$$[\hat{S}_i, \hat{P}_j] = i\delta_{i,j}, \quad (3.2)$$

I é o momento de inércia dos spins (rotores quânticos) [10,15], e μ é multiplicador de Lagrange que assegura o vínculo esférico médio

$$\sum_{i=1}^N \langle \hat{S}_i^2 \rangle = N. \quad (3.3)$$

$J_{i_1 \dots i_p}$ são os elementos de uma matriz aleatória simétrica, sendo o valor de cada elemento estatisticamente distribuído de acordo com uma gaussiana de média zero e variância $\sigma^2 = J^2 p! / 2N^{p-1}$, que escala com N , assegurando uma energia livre extensiva. Como a distribuição é a mesma para quaisquer conjuntos de p spins, o alcance do acoplamento é infinito (campo médio), como no modelo SK.

Escrevemos a função de partição $Z(\mathbf{J})$ como

$$Z = \int \left[\prod_{i=1}^N dS_i \right] (S_1, \dots, S_N | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} | S_1, \dots, S_N), \quad (3.4)$$

onde $|S_1, \dots, S_N\rangle$ denota o *produto tensorial* entre os autovetores de spins locais $|S_i\rangle \forall i \in \{1, \dots, N\}$, isto é,

$$|S_1, \dots, S_N\rangle = |S_1\rangle |S_2\rangle \cdots |S_N\rangle. \quad (3.5)$$

Seguindo a prescrição de Feynman para as *integrais de caminho* [11,12], subdividimos o intervalo $[0, \beta]$ em M partes, definindo um intervalo $\epsilon \equiv \beta/M$, que se torna infinitesimal no limite $M \rightarrow \infty$. Por analogia com propagadores, podemos visualizar cada intervalo ϵ como a diferença entre dois “tempos” (imaginários), de forma que o intervalo de “tempo” $[0, \beta]$ fica discretizado e $\tau_n - \tau_{n-1} = \epsilon$ ($n = 1, \dots, M-1, M$), sendo os extremos dados por $\tau_0 = 0$ e $\tau_M = \beta$. Escrevendo $\exp(-\beta \hat{\mathcal{H}})$ como um produto de M termos $\exp(-\epsilon \hat{\mathcal{H}})$ e inserindo identidades na base de autovetores de spins para cada “tempo” discreto, podemos escrever o

integrando da Eq. (3.4) como um produto de propagadores

$$\mathcal{U}_{n,n-1} = \langle S_{1\tau_n} | \langle S_{2\tau_n} | \dots \langle S_{N\tau_n} | e^{-\epsilon \hat{\mathcal{H}}} | S_{1\tau_{n-1}} \rangle | S_{2\tau_{n-1}} \rangle \dots | S_{N\tau_{n-1}} \rangle. \quad (3.6)$$

No limite $M \rightarrow \infty$, quando $\epsilon \rightarrow 0$, considerando que os comutadores entre as partes não comutantes de $\epsilon \hat{\mathcal{H}}$ são de $\mathcal{O}(\epsilon^2)$, podemos escrever, usando a Eq. (3.1),

$$e^{-\epsilon \hat{\mathcal{H}}} \simeq e^{-\epsilon \frac{1}{2I} \sum_{i=1}^N \hat{P}_i^2} e^{\epsilon \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1 \dots i_p} \hat{S}_{i_1} \dots \hat{S}_{i_p}} e^{-\epsilon \mu \sum_{i=1}^N \hat{S}_i^2}. \quad (3.7)$$

Inserindo esta forma na Eq. (3.6), os operadores de spin atuam diretamente sobre os vetores da base, gerando os respectivos autovalores. Para o termo envolvendo os *momenta*, considerando que seus autovetores também formam uma base, inserimos a identidade

$$\int \left[\prod_{k=1}^N dP_{k\tau_n} \right] |P_{1\tau_n}, \dots, P_{N\tau_n}\rangle \langle P_{1\tau_n}, \dots, P_{N\tau_n}| = \mathbf{I} \quad (3.8)$$

à esquerda do operador exponencial e utilizamos as autofunções de momentum,

$$\langle S_i | P_j \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iP_j S_i}. \quad (3.9)$$

Isso resulta em

$$\mathcal{U}_{n,n-1} = \int \left[\prod_{k=1}^N \frac{dP_{k\tau_n}}{2\pi} e^{iP_{k\tau_n}(S_{k\tau_n} - S_{k\tau_{n-1}}) - \frac{\epsilon P_{k\tau_n}^2}{2I}} \right] e^{\epsilon \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1 \dots i_p} S_{i_1\tau_{n-1}} \dots S_{i_p\tau_{n-1}}} e^{-\mu \epsilon \sum_i S_{i\tau_{n-1}}^2}. \quad (3.10)$$

A integração sobre os momenta pode ser realizada, pois é gaussiana. Voltando a escrever o produto de exponenciais como a exponencial de uma soma, fazendo a substituição $\epsilon \rightarrow d\tau$ para tomar o limite $M \rightarrow \infty$, no qual a soma sobre os intervalos de tempo se transforma em uma integral, podemos escrever o propagador entre os tempos inicial ($\tau_i = 0$) e final ($\tau_f = \beta$) na forma

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(S_1, \dots, S_N, 0; S_1, \dots, S_N, \beta) &= \int_{S_i(0)}^{S_i(\beta)} \mathcal{D}[S_i(\tau)] e^{-\int_0^\beta d\tau \left[\sum_i \frac{1}{2} \left(\frac{dS_i(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \mu \sum_i S_i^2(\tau) \right]} \\ &\times e^{\int_0^\beta d\tau \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1 \dots i_p} S_{i_1}(\tau) \dots S_{i_p}(\tau)}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Por fim, tendo em vista que a função de partição (3.4) é a soma dos elementos da diagonal do propagador (3.11), temos a condição $S_i(0) = S_i(\beta)$ e a função de partição assume a forma

$$Z(\mathbf{J}) = \int_{S_i(0)=S_i(\beta)} \mathcal{D}[S_i(\tau)] e^{-\int_0^\beta \frac{I}{2} \sum_i \left(\frac{dS_i(\tau)}{d\tau}\right)^2 - \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1 \dots i_p} S_{i_1}(\tau) \dots S_{i_p}(\tau) + \mu \sum_{i=1}^N S_i(\tau)^2}. \quad (3.12)$$

3.1.1 Média configuracional – método de réplicas

A conexão com a termodinâmica dá-se através do grande potencial termodinâmico Ω [16], já que podemos fazer uma analogia entre o parâmetro μ da condição esférica e o potencial químico. Como observado anteriormente, estamos interessados na média temperada (*quenched*) e devemos calcular

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} [\log(Z(\mathbf{J}))]_{\text{ca}} \quad (3.13)$$

o que, através do método de réplicas (ver Seção 2.2.1), implica em escrever

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{[Z^n(\mathbf{J})]_{\text{ca}} - 1}{n}, \quad (3.14)$$

onde $Z^n(\mathbf{J})$ é entendido como um produto sobre n réplicas idênticas do sistema, isto é,

$$Z^n(\mathbf{J}) = \prod_{\alpha=1}^n Z_\alpha(\mathbf{J}), \quad (3.15)$$

Notemos que o termo complicado na Eq. (3.14) é a função de partição replicada $[Z^n(\mathbf{J})]_{\text{ca}}$. Após realizarmos a média configuracional, com a já mencionada distribuição gaussiana das constantes de troca, obtemos

$$\begin{aligned} [Z^n(\mathbf{J})]_{\text{ca}} &= \int' \mathcal{D}[S_i^\alpha(\tau)] e^{-\int_0^\beta d\tau \sum_{i\alpha} \left[\frac{I}{2} \left(\frac{dS_i^\alpha(\tau)}{d\tau}\right)^2 + \mu S_i^\alpha(\tau)^2 \right]} \\ &\times e^{\frac{NJ^2}{4} \sum_{\alpha,\nu} \frac{p!}{N^p} \sum_{i_1 < \dots < i_p} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' S_{i_1}^\alpha(\tau) S_{i_1}^\nu(\tau') \dots S_{i_p}^\alpha(\tau) S_{i_p}^\nu(\tau')}, \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde a “linha” na integral indica a condição $S_i^\alpha(0) = S_i^\alpha(\beta)$. A restrição $i_1 < \dots < i_p$ na segunda exponencial apenas evita a soma múltipla dos mesmos termos de interação, podendo ser substituída como segue

$$\sum_{i_1 < \dots < i_p} \rightarrow \frac{1}{p!} \sum_{i_1, \dots, i_p}, \quad (3.17)$$

considerando estar implícito que $J_{i_1 \dots i_p}$ só é não nulo se todos os índices são distintos. Com isto, a função de partição replicada fica

$$\begin{aligned} [Z^n(\mathbf{J})]_{\text{ca}} &= \int' \mathcal{D}[S_i^\alpha(\tau)] e^{-\int_0^\beta d\tau \sum_{i\alpha} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dS_i^\alpha(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \mu S_i^{\alpha 2}(\tau) \right]} \\ &\times e^{\frac{NJ^2}{4} \sum_{\alpha, \nu} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' \left[\frac{1}{N} \sum_i S_i^\alpha(\tau) S_i^\nu(\tau') \right]^p}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

O termo de interação pode ser desacoplado introduzindo campos $q_{\alpha\nu}(\tau, \tau')$ e $\lambda_{\alpha\nu}(\tau, \tau')$ pela identidade (análoga à introduzida por A. Crisanti e H. Sommers [4])

$$1 = \int \mathcal{D}[q(\tau, \tau')] \mathcal{D}[\lambda(\tau, \tau')] e^{-\frac{1}{2\beta^2} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' \sum_{\alpha\nu} \lambda_{\alpha\nu}(\tau, \tau') (Nq_{\alpha\nu}(\tau, \tau') - \sum_i S_i^\alpha(\tau) S_i^\nu(\tau'))}, \quad (3.19)$$

o que permite escrever

$$[Z^n(\mathbf{J})]_{\text{ca}} = \int \mathcal{D}[q(\tau, \tau')] \mathcal{D}[\lambda(\tau, \tau')] e^{-NG[\mathbf{q}(\tau, \tau'), \lambda(\tau, \tau')]}, \quad (3.20)$$

onde

$$\begin{aligned} G[\mathbf{q}(\tau, \tau'), \lambda(\tau, \tau')] &= -\frac{J^2}{4} \sum_{\alpha\nu} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' q_{\alpha\nu}^p(\tau, \tau') \\ &+ \frac{1}{2\beta^2} \sum_{\alpha\nu} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' \lambda_{\alpha\nu}(\tau, \tau') q_{\alpha\nu}(\tau, \tau') \\ &- \log \left\{ \int \mathcal{D}[S^\alpha(\tau)] e^{-\int_0^\beta d\tau \sum_\alpha \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dS^\alpha(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \mu S^{\alpha 2}(\tau) \right]} \right. \\ &\times \left. e^{\frac{1}{2\beta^2} \sum_{\alpha\nu} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' \lambda_{\alpha\nu}(\tau, \tau') S^\alpha(\tau) S^\nu(\tau')} \right\}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

A presença do fator N no expoente na Eq. (3.20) permite realizar as integrações sobre os campos $q_{\alpha\nu}(\tau, \tau')$ e $\lambda_{\alpha\nu}(\tau, \tau')$ utilizando o *método do ponto de sela*, como vimos na seção 2.2.1. As equações de ponto de sela são obtidas via derivação funcional, isto é,

$$\frac{\delta G[\mathbf{q}(\tau, \tau'), \lambda(\tau, \tau')]}{\delta q_{\alpha\nu}(\tau, \tau')} = 0; \quad \frac{\delta G[\mathbf{q}(\tau, \tau'), \lambda(\tau, \tau')]}{\delta \lambda_{\alpha\nu}(\tau, \tau')} = 0. \quad (3.22)$$

Destas equações obtemos que

$$\lambda_{\alpha\nu}(\tau, \tau') = \frac{(\beta J)^2}{2} p q_{\alpha\nu}^{p-1}(\tau, \tau'), \quad q_{\alpha\nu}(\tau, \tau') = \langle S^\alpha(\tau) S^\nu(\tau') \rangle_{\mathcal{A}}, \quad (3.23)$$

onde \mathcal{A} é o expoente que aparece na integração sobre spins na Eq. (3.21) e a média $\langle \dots \rangle_{\mathcal{A}}$ significa média ponderada pelos pesos $e^{\mathcal{A}}$. Estes resultados permitem concluir que os campos $\lambda_{\alpha\nu}(\tau, \tau')$ e $q_{\alpha\nu}(\tau, \tau')$ são simétricos nos tempos imaginários τ e τ' e, portanto, só dependem da diferença $\tau - \tau'$. Com isso, podemos simplificar $G[\mathbf{q}(\tau, \tau'), \lambda(\tau, \tau')]$, dada pela Eq. (3.21), que passa a ser escrita na forma

$$\begin{aligned} G[\mathbf{q}(\tau, \tau'), \lambda(\tau, \tau')] &= -\frac{J^2}{4} \beta \sum_{\alpha\nu} \int_0^\beta d\tau q_{\alpha\nu}^p(\tau) + \frac{1}{2\beta} \sum_{\alpha\nu} \int_0^\beta d\tau \lambda_{\alpha\nu}(\tau) q_{\alpha\nu}(\tau) \\ &\quad - \log \left\{ \int \mathcal{D}[S^\alpha(\tau)] e^{\mathcal{A}} \right\}, \end{aligned} \quad (3.24)$$

com

$$\mathcal{A} = - \int_0^\beta d\tau \sum_{\alpha} \left[\frac{I}{2} \left(\frac{dS^\alpha(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \mu S^{\alpha 2}(\tau) \right] + \frac{1}{2\beta^2} \sum_{\alpha\nu} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' \lambda_{\alpha\nu}(\tau - \tau') S^\alpha(\tau) S^\nu(\tau'). \quad (3.25)$$

3.2 Primeiros passos para uma solução exata

Resolver o problema significa, no contexto deste trabalho, encontrar uma forma analítica para o grande potencial termodinâmico, no limite de número de réplicas $n \rightarrow 0$ e para um sistema macroscópico ($N \rightarrow \infty$), a partir da qual possam ser obtidas propriedades físicas do sistema. Para progredir nesse objetivo, vamos tentar resolver as integrais que aparecem na função de partição replicada e obter formas explícitas para determinar os campos a partir das equações de ponto de sela.

Inicialmente, introduzimos representações de Fourier para as quantidades dependentes do tempo imaginário. Trata-se de séries, pois o intervalo de definição desse tempo é finito. Para $S^\alpha(\tau)$ temos

$$S^\alpha(\tau) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_m \tau} S^\alpha(\omega_m), \quad (3.26)$$

onde $\omega_m = \frac{2\pi m}{\beta}$, $m \in \mathcal{Z}$, são as *frequências de Matsubara* (para “bósons”, pois as variáveis têm uma álgebra de comutação) [12]. Os coeficientes $S^\alpha(\omega_m)$ são dados por

$$S^\alpha(\omega_l) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_l \tau} S^\alpha(\tau). \quad (3.27)$$

De forma similar,

$$q_{\alpha\nu}(\tau - \tau') = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_m(\tau-\tau')} q_{\alpha\nu}(\omega_m), \quad (3.28)$$

com

$$q_{\alpha\nu}(\omega_l) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_l \tau} q_{\alpha\nu}(\tau), \quad (3.29)$$

e

$$\lambda_{\alpha\nu}(\tau) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_m \tau} \lambda_{\alpha\nu}(\omega_m), \quad (3.30)$$

com

$$\lambda_{\alpha\nu}(\omega_m) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_m \tau} \lambda_{\alpha\nu}(\tau). \quad (3.31)$$

Logo, o funcional (3.24) assume a forma

$$\begin{aligned} G[\mathbf{q}(\omega_m), \lambda_{\omega_m}] &= -\frac{J^2 \beta}{4} \sum_{\alpha\nu} \int_0^\beta d\tau \left[\sum_m e^{-i\omega_m \tau} q_{\alpha\nu}(\omega_m) \right]^p + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\nu,m} \lambda_{\alpha\nu}(\omega_m) q_{\alpha\nu}^*(\omega_m) \\ &- \log \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_m dS^\alpha(\omega_m) dS^{*\alpha}(\omega_m) \right] e^{-\beta \sum_{\alpha,m} [\frac{1}{2}\omega_m^2 + \mu] |S^\alpha(\omega_m)|^2} \right. \\ &\times \left. e^{\frac{1}{2} \sum_{\alpha,\nu,m} \lambda_{\alpha\nu}(\omega_m) S^{*\alpha}(\omega_m) S^\nu(\omega_m)} \right\}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

O termo de maior complexidade é o argumento do logaritmo. A integração sobre os spins fica facilitada se separarmos $S^\alpha(\omega_m)$ e $\lambda_{\alpha\nu}(\omega_m)$ em partes real e imaginária. Além disso, utilizamos a integral gaussiana generalizada,

$$\int d^n x e^{-\frac{1}{2} \sum_{i,j} x_i A_{i,j} x_j - \frac{1}{2} D \sum_i x_i^2} = \frac{(2\pi)^{n/2}}{\sqrt{|\det(\mathbf{A} + D\mathbf{I})|}}, \quad (3.33)$$

Portanto, a função de partição replicada torna-se

$$[Z^n]_{\text{ca}} = \mathcal{N}^N \int \mathcal{D}[q_{\alpha\nu}(\omega_m)] \mathcal{D}[\lambda_{\alpha\nu}(\omega_m)] e^{-NG[\mathbf{q}(\omega_m), \lambda(\omega_m)]}, \quad (3.34)$$

com

$$\begin{aligned}
G[\mathbf{q}(\omega_m), \boldsymbol{\lambda}(\omega_m)] &= -\frac{J^2\beta}{4} \sum_{\alpha\nu} \int_0^\beta d\tau \left[\sum_m e^{-i\omega_m\tau} q_{\alpha\nu}(\omega_m) \right]^p + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\nu,m} \lambda_{\alpha\nu}(\omega_m) q_{\alpha\nu}^*(\omega_m) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_m \log [\det ([I\omega_m^2\beta + 2\beta\mu]\mathbf{I} - \lambda(\omega_m))]. \tag{3.35}
\end{aligned}$$

Em (3.34) introduzimos a constante de normalização \mathcal{N} , que deve ser escolhida de forma conveniente, como veremos mais adiante.

A integração (3.34) pode ser realizada via método do ponto de sela como no capítulo (3.3). Inicialmente, eliminamos a variável $\lambda_{\alpha\nu}(\omega_m)$ por meio da equação de ponto de sela

$$\frac{\delta G[\mathbf{q}(\omega_m), \boldsymbol{\lambda}(\omega_m)]}{\delta \lambda_{\alpha\nu}(\omega_m)} = 0, \tag{3.36}$$

da qual se obtém

$$\boldsymbol{\lambda}(\omega_m) = [I\omega_m^2\beta + 2\beta\mu]\mathbf{I} - \mathbf{q}^{-1}(\omega_m), \tag{3.37}$$

onde $\mathbf{q}^{-1}(\omega_m)$ denota a matriz inversa de $\mathbf{q}(\omega_m)$.

Finalmente, o funcional (3.35) se escreve como um funcional unicamente de $\mathbf{q}(\omega_m)$,

$$\begin{aligned}
G[\mathbf{q}(\omega_m)] &= -\frac{J^2\beta}{4} \sum_{\alpha\nu} \int_0^\beta d\tau \left[\sum_m e^{-i\omega_m\tau} q_{\alpha\nu}(\omega_m) \right]^p - \frac{1}{2} \sum_m \log [\det (\mathbf{q}(\omega_m))] \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha,m} [I\omega_m^2\beta + 2\beta\mu] q_{\alpha,\alpha}(\omega_m). \tag{3.38}
\end{aligned}$$

Deste modo, o grande potencial termodinâmico Ω é dado por

$$\frac{\beta\Omega}{N} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} G[\mathbf{q}(\omega_m)] - \log \mathcal{N}, \tag{3.39}$$

com $G[\mathbf{q}(\omega_m)]$ dada por (3.38) e $\mathbf{q}(\omega_m)$ sendo solução da equação de ponto de sela

$$\frac{\delta G[\mathbf{q}(\omega_m)]}{\delta q_{\alpha\nu}} = 0, \tag{3.40}$$

isto é, como solução de

$$\frac{\beta J^2 p}{2} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_m \tau} q_{\alpha\nu}^{p-1}(\tau) + [\mathbf{q}^{-1}(\omega_m)]_{\alpha\nu} = [I\omega_m^2 \beta + 2\beta\mu] \delta_{\alpha\nu}. \quad (3.41)$$

Não foi possível tratar analiticamente esta equação para um valor genérico de p e sem outras hipóteses simplificadoras. Por esse motivo, daremos continuidade à nossa investigação do modelo através de casos particulares. Em primeiro lugar, observamos que a Eq. (3.41) assume uma forma relativamente simples no caso $p = 2$. Assim, dedicaremos a próxima seção ao estudo desse caso. No capítulo 4, passaremos a analisar uma aproximação usual nesse tipo de problema, que é a *Aproximação Estática*. Como a denominação permite inferir, essa aproximação considera os campos $q_{\alpha\nu}$ como independentes do tempo. Como teste dessa aproximação, voltaremos a analisar o caso $p = 2$, comparando com os resultados obtidos na seção 3.3, e estudaremos o limite $p \rightarrow \infty$. Finalmente, no capítulo 5, ainda na aproximação estática, abordaremos o primeiro caso “não trivial”, $p = 3$.

3.3 Um caso solúvel: $p = 2$

Conforme comentamos ao final do capítulo anterior, neste capítulo abordaremos o caso $p = 2$, para o qual a Eq. (3.41) assume uma forma simples, explicitamente,

$$(\beta J)^2 \mathbf{q}(\omega_m) + \mathbf{q}(\omega_m)^{-1} = (I\omega_m^2 \beta + 2\beta\mu) \mathbf{I}. \quad (3.42)$$

Consequentemente, o funcional (3.38) pode ser escrito como

$$G[\mathbf{q}(\omega_m)] = \frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{\alpha,\nu,m} q_{\alpha\nu}^2(\omega_m) + \sum_m \log \left\{ \det \left[(I\beta\omega_m^2 + 2\beta\mu) \mathbf{I} - (\beta J)^2 \mathbf{q}(\omega_m) \right] \right\}, \quad (3.43)$$

3.3.1 Solução com simetria de réplicas

Para trabalharmos com as Eqs. (3.42) e (3.43) de forma mais explícita, apesar da forma relativamente simples da primeira, é necessário formular alguma hipótese sobre a estrutura de $\mathbf{q}(\omega_m)$. O que é usualmente utilizado, como já vimos na revisão do modelo (clássico) SK (seção 2.2), é a hipótese (ou *ansatz*) de **simetria de réplicas**. Tal hipótese consiste em supor

que

$$q_{\alpha\nu}(\omega_m) = [q_0(\omega_m) - q(\omega_m)]\delta_{\alpha\nu} + q(\omega_m), \quad (3.44)$$

isto é, estamos supondo que a matriz $\mathbf{q}(\omega_m)$ possui apenas dois tipos de elementos, a saber, os diagonais, $q_0(\omega_m)$, e os fora da diagonal, $q(\omega_m)$.

Esta hipótese simplificadora nos permite explicitar os elementos da matriz inversa $\mathbf{q}(\omega_m)^{-1}$,

$$[\mathbf{q}^{-1}(\omega_m)]_{\alpha\alpha} = \frac{q_0(\omega_m) + (n-2)q(\omega_m)}{(q_0(\omega_m) - q(\omega_m))[q_0(\omega_m) + (n-1)q(\omega_m)]} \xrightarrow{n \rightarrow 0} \frac{q_0(\omega_m) - 2q(\omega_m)}{(q_0(\omega_m) - q(\omega_m))^2} \quad (3.45)$$

e

$$[\mathbf{q}^{-1}(\omega_m)]_{\alpha\nu} = \frac{-q(\omega_m)}{(q_0(\omega_m) - q(\omega_m))[q_0(\omega_m) + (n-1)q(\omega_m)]} \xrightarrow{n \rightarrow 0} \frac{-q(\omega_m)}{(q_0(\omega_m) - q(\omega_m))^2}. \quad (3.46)$$

Assim, a equação de ponto de sela (3.42) se resume às relações

$$(\beta J)^2 q_0(\omega_m) + \frac{q_0(\omega_m) - 2q(\omega_m)}{(q_0(\omega_m) - q(\omega_m))^2} = I\beta\omega_m^2 + 2\beta\mu, \quad (3.47)$$

$$(\beta J)^2 q(\omega_m) - \frac{q(\omega_m)}{(q_0(\omega_m) - q(\omega_m))^2} = 0. \quad (3.48)$$

Soluções das equações de ponto de sela

Nosso objetivo é escrever o funcional (3.43) como uma função das frequências e da temperatura. Para tal, temos que obter os campos $q_0(\omega_m)$ e $q(\omega_m)$ a partir das equações (3.47) e (3.48).

Pela equação (3.48), $q(\omega_m) = 0$ é sempre uma solução possível. Colocando-a em (3.47), obtemos uma equação quadrática em $q_0(\omega_m)$, cuja solução é

$$q_0(\omega_m) = \frac{2\beta\mu + I\beta\omega_m^2 - \sqrt{(2\beta\mu + I\beta\omega_m^2)^2 - 4(\beta J)^2}}{2(\beta J)^2}, \quad (3.49)$$

onde guardamos apenas o sinal negativo na raiz quadrada para garantir um limite não divergente quando $J \rightarrow 0$. Deve-se notar que esta solução só existe na fase paramagnética (PM), ou seja para $T > T_c$, sendo T_c a temperatura crítica para a transição entre essa fase e a de vidro de spins (VS).

A Eq. (3.49) está em concordância com o resultado de [6]. Nesse trabalho também foi

mostrado que o potencial químico μ se fixa no valor $\mu_c = J$ para $T \leq T_c$. Podemos verificar que isso acontece buscando uma solução com $q(\omega_m) \neq 0$. Neste caso, as Eqs.(3.47) e (3.48) levam às relações

$$q(\omega_m) = q_0(\omega_m) - \frac{1}{\beta J}, \quad (3.50)$$

$$I\beta\omega_m^2 = 2\beta(J - \mu), \quad (3.51)$$

que são análogas às obtidas por de De Dominicis [17].

Notemos que a Eq. (3.51) implica em que só existe solução com $q(\omega_m) \neq 0$ para $\mu = J$ e $\omega_m = 0$. Então, o parâmetro de ordem de vidro de spins é $q(0) \equiv q$, que pode ser obtido da Eq. (3.50) se conhecermos $q_0(0)$. Isto pode ser feito com o auxílio da condição esférica média, que pode ser escrita como

$$\sum_m q_0(\omega_m) = 1. \quad (3.52)$$

Temos, então,

$$q_0(0) = 1 - \sum_{m \neq 0} q_0(\omega_m), \quad (3.53)$$

onde os $q_0(\omega_m)$ que aparecem na soma do lado direito são dados pela Eq. (3.49), pois as soluções para $\omega_m \neq 0$ só podem corresponder a $q(\omega_m) = 0$. Levando à Eq. (3.50) e usando o fato de que a solução é válida para $\mu = \mu_c = J$, obtemos q como uma função da temperatura ($T = 1/\beta$) expressa por

$$q(T) = 1 - \frac{1}{\beta J} \sum_m \left[1 + \frac{I}{2J} \omega_m^2 - \sqrt{\left(1 + \frac{I}{2J} \omega_m^2\right)^2 - 1} \right], \quad (3.54)$$

com a soma não restrita, pois o termo correspondente a $m = 0$ deste último somatório reproduz exatamente o último termo do lado direito da Eq. (3.50).

Potencial químico

A *condição esférica média*, Eq. (3.52), juntamente com a Eq. (3.49), permite obter o potencial químico na fase PM como função da temperatura. Para explicitar a função $\mu(T)$, bem como a função $q(T)$ na fase VS, dada pela Eq. (3.54), devemos realizar as somas sobre frequências de

Matsubara envolvidas nessas equações. Isso pode ser feito com o auxílio da relação genérica

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} F(\omega_m) = \frac{\beta}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{e^{\eta z}}{e^{\beta z} - 1} F(iz) dz \quad (3.55)$$

que é trivialmente verificada se no interior do contorno Γ a função $F(iz)$ é analítica e estão contidos todos os pólos de $(e^{\beta z} - 1)^{-1}$, que ocorrem para $z = i\omega_m$.

Para a condição esférica (3.52), a Eq. (3.49) indica que

$$F(iz) = \frac{2\beta\mu - I\beta z^2 - \sqrt{(2\beta\mu - I\beta z^2)^2 - 4(\beta J)^2}}{2(\beta J)^2} \quad (3.56)$$

Deformando-se de forma apropriada o contorno Γ (detalhes no Apêndice A), obtemos

$$\frac{1}{2\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} dx \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} \coth\left(\frac{\beta x}{2}\right) = 1, \quad (3.57)$$

onde $L_{\pm} = \sqrt{2(\mu \pm J)}$ e, portanto, a integral sobre a variável real x está definida somente se $\mu \geq J$.

Resultados de soluções numéricas da Eq. (3.57) para alguns valores do parâmetro I estão apresentados na Fig. 3.1. Pode-se notar que as curvas $\mu(T)$ atingem o valor limite $\mu_c = J$ em diferentes temperaturas, ou seja, a temperatura crítica T_c , abaixo da qual μ fica fixo, depende do valor de I , como seria de esperar.

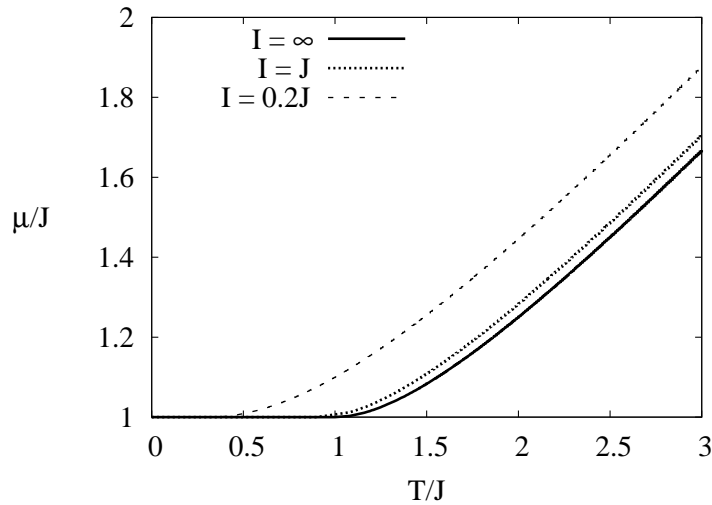


Figura 3.1: Solução numérica da equação (3.57) que apresenta μ como função da temperatura para valores diferentes do momento de inércia I . Note que para cada valor de I , μ “sticks” em $\mu_c = J$ para diferentes valores de temperatura.

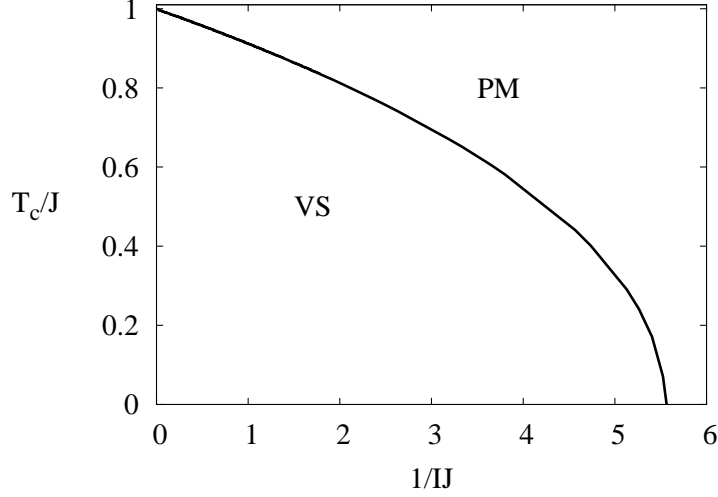


Figura 3.2: Diagrama de Fases para o modelo esférico quântico de vidro de spins com $p = 2$.

As curvas mostradas na Fig. 3.1 incluem o limite clássico do modelo (referido como $I = \infty$). Esse limite é mais facilmente tomado na Eq. (3.57) fazendo-se a mudança de variável $\sqrt{I}x \rightarrow y$. Para $I \rightarrow \infty$, segue que $\coth\left(\frac{\beta y}{2\sqrt{I}}\right) \simeq \frac{2\sqrt{I}}{\beta y}$. Após novas mudanças de variáveis, chega-se em

$$\frac{1}{2\pi\beta J^2} \int_0^{4J} \frac{\sqrt{w(4J-w)}}{(w+2\mu_{\text{clas}}-2J)} dw = 1. \quad (3.58)$$

A integral pode ser resolvida, resultando em

$$\mu_{\text{clas}} + \sqrt{\frac{\mu_{\text{clas}} + J}{\mu_{\text{clas}} - J}}(J - \mu_{\text{clas}}) = \beta J^2. \quad (3.59)$$

A solução desta equação para μ_{clas} é

$$\mu_{\text{clas}} = \frac{1}{2\beta} [1 + (\beta J)^2], \quad (3.60)$$

que está de acordo com a expressão encontrada na Ref. [8].

Diagrama de fases

Fixando-se $\mu = J$ na Eq. (3.57), a solução ocorre para um único valor de $\beta = 1/T_c$, determinando-se, assim, a temperatura crítica em função dos parâmetros do modelo. Isso permite construir o diagrama de fases mostrado na Fig. 3.2. Esse diagrama está de acordo com o obtido na Ref. [6].

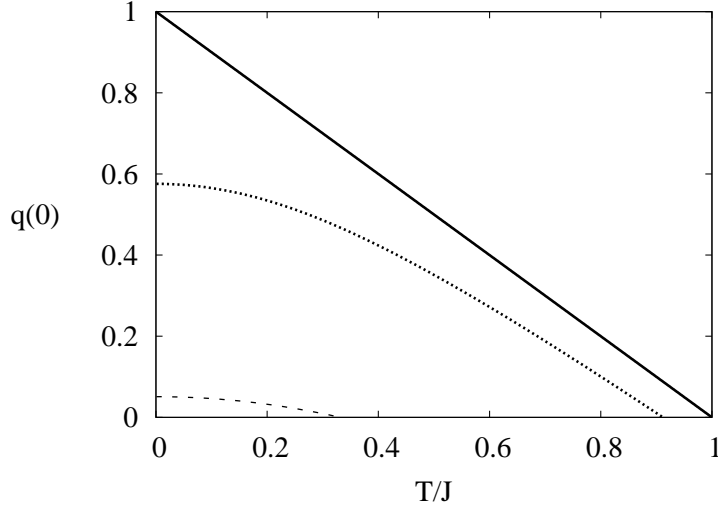


Figura 3.3: Parâmetro de ordem para o modelo esférico quântico de vidro de spins com $p=2$. Linha sólida corresponde à $J I = \infty$, linha pontilhada $J I = 1$ e linha tracejada $J I = 0.2$.

O gráfico mostra a fronteira entre as fases de vidro de spins e paramagnética. O ponto sobre a linha $1/JI = 0$ corresponde ao limite clássico do vidro de spins, $T_c = J$. Deve-se notar a existência de um ponto crítico quântico em $1/JI_c \approx 5.55$ (que concorda com resultados anteriores [10, 15]), quando a temperatura crítica para a transição se anula. Nessa região temos uma transição de fase quântica ao variarmos o parâmetro I a $T = 0$.

Parâmetro de ordem

O parâmetro de ordem $q(T)$ é calculado a partir da Eq. (3.54) através da mesma transformação da soma sobre frequências de Matsubara em integral, e envolve essencialmente a mesma integral que aparece na Eq. (3.57), mas com $\mu = J$. Temos, então,

$$q(T) = 1 - \frac{1}{2\pi J^2} \int_0^{2\sqrt{\frac{J}{T}}} dx \sqrt{4J^2 - (2J - Ix^2)^2} \coth\left(\frac{\beta x}{2}\right), \quad (3.61)$$

válida para $T \leq T_c$, pois $q(T > T_c) = 0$.

Soluções numérica da equação (3.61) estão mostradas na Fig. (3.3), onde podemos ver a influência do momento de inércia (fator quântico). Os efeitos quânticos são aumentados quando se reduz I , observando-se a redução do overlap entre réplicas [18]. A figura também mostra o limite clássico ($J I = \infty$), que pode ser calculado pelo mesmo procedimento utilizado

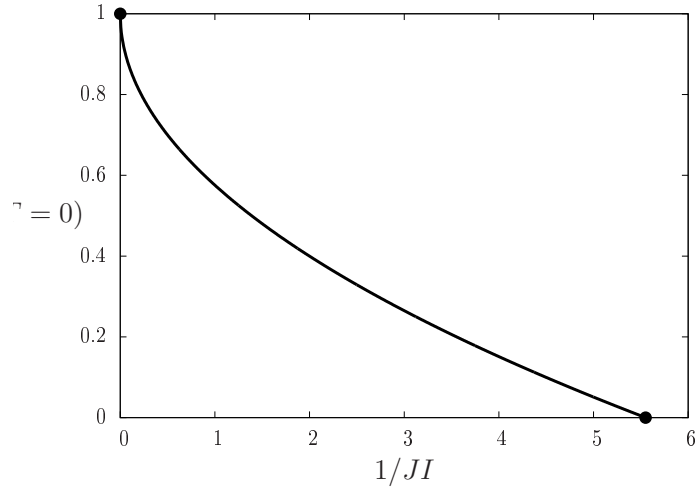


Figura 3.4: Parâmetro de ordem para o modelo esférico quântico de vidro de spins com $p = 2$, no limite $T = 0$, em função de $1/JI$.

para o potencial químico, resultando em

$$q_{\text{clas}}(T) = 1 - \frac{1}{2\pi\beta J^2} \int_0^{4J} \frac{\sqrt{w(4J-w)}}{w} dw. \quad (3.62)$$

A solução da integral é simples e se obtém

$$q_{\text{clas}}(T) = 1 - \frac{T}{J}. \quad (3.63)$$

Este resultado foi também obtido analiticamente por K. T. Kopéc e R. Pirc [19].

O valor limite de $q(T)$ em $T = 0$ também pode ser obtido analiticamente. Tomando-se o limite $\beta \rightarrow \infty$ na Eq. (3.61) e usando o fato de que, nesse limite, $\coth\left(\frac{\beta x}{2}\right) \rightarrow 1$, tem-se que

$$q(T=0) = 1 - \frac{1}{2\pi J^2} \int_0^{2\sqrt{\frac{J}{I}}} dx \sqrt{4J^2 - (2J - Ix^2)^2}. \quad (3.64)$$

A integral ser resolvida exatamente, obtendo-se

$$q(T=0) = 1 - \sqrt{\frac{JI_c}{JI}}, \quad (3.65)$$

onde $JI_c = 16/9\pi^2$ (que corresponde ao valor de $1/JI_c \simeq 5.55$, mencionado anteriormente) e a solução é válida para $I \geq I_c$. O gráfico de $q(T=0)$ em função de $1/JI$ é apresentado na Fig. 3.4, onde podemos observar, em particular, o limite $q_{\text{clas}}(T=0) = 1$ e o ponto $1/JI_c$ onde

$q(T = 0)$ se anula.

Energia livre

Podemos calcular a energia livre $\mathcal{F} = \Omega - \mu N$ a partir da Eq. (3.39) e usando a Eq. (3.43). Sob a hipótese de simetria de réplicas, obtemos a seguinte expressão para o determinante que aparece em (3.43),

$$\begin{aligned} \det [(I\beta\omega_m^2 + 2\beta\mu)\mathbf{I} - (\beta J)^2 \mathbf{q}(\omega_m)] &= [(I\beta\omega_m^2 + 2\beta\mu) + (\beta J)^2(q(\omega_m) - q_0(\omega_m))]^{n-1} \\ &\times [(I\beta\omega_m^2 + 2\beta\mu) - (\beta J)^2((n-1)q(\omega_m) - q_0(\omega_m))] . \end{aligned} \quad (3.66)$$

Logo, chegamos em

$$\frac{\beta\mathcal{F}}{N} = \begin{cases} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{(\beta J)^2}{4} q_0^2(\omega_m) - \frac{1}{2} \log [q_0(\omega_m)] \right\} - \beta\mu - \log \mathcal{N} , & \text{se } T > T_c , \\ \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{(\beta J)^2}{4} [q_0(\omega_m) - q(\omega_m)]^2 - \frac{1}{2} \log [q_0(\omega_m) - q(\omega_m)] \right\} - \beta\mu - \log \mathcal{N} , & \text{se } T \leq T_c . \end{cases} \quad (3.67)$$

Na verdade, as duas formas acima são equivalentes, sendo a segunda a mais genérica, tendo-se em conta que $q(\omega_m) = 0$ na fase PM. Além disso, a soma das equações de ponto de sela (3.47) e (3.48) permite constatar que tanto $q_0(\omega_m)$ na fase PM quanto $[q_0(\omega_m) - q(\omega_m)]$ na fase VS são dados pelas mesmas expressões. Assim, a diferença está no comportamento do potencial químico, que aparece explicitamente e também dentro das expressões nas somas sobre frequências, como vimos antes.

Neste ponto, cabe ressaltar que a Eq. (3.67) reproduz, via método das réplicas (média temperada), o resultado obtido na Ref. [6] com média recozida, verificando que os dois tratamentos são equivalentes para o modelo esférico quântico de vidro de spins com $p = 2$.

Vamos calcular explicitamente a energia livre como uma função da temperatura (os detalhes estão contidos no Apêndice B). Para tal, recorreremos novamente ao procedimento que leva soma sobre frequências em integrais no plano complexo, como já feito anteriormente. Após um desenvolvimento matemático relativamente longo mas simples, obtemos para a energia livre

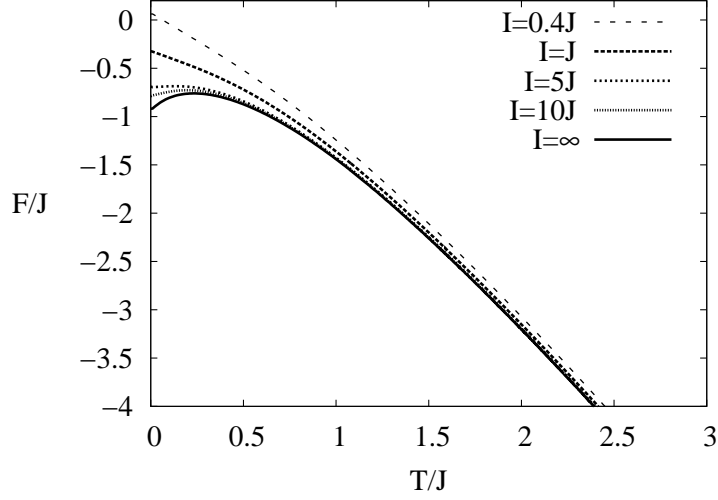


Figura 3.5: Energia Livre como função da temperatura para o modelo esférico quântico de vidro de spins com $p = 2$.

deste sistema

$$\frac{\beta\mathcal{F}}{N} = \begin{cases} \frac{1}{\pi J^2} \int_{L_-}^{L_+} dy y \log \left[\sinh \left(\frac{\beta y}{2\sqrt{I}} \right) \right] \sqrt{4J^2 - (2\mu - y^2)^2} - \beta\mu - \frac{1}{2} \log \left(\frac{1}{IJ} \right), & \text{se } T > T_c; \\ \frac{1}{\pi J^2} \int_0^{2\sqrt{J}} dy y \log \left[\sinh \left(\frac{\beta y}{2\sqrt{I}} \right) \right] \sqrt{4J^2 - (2J - y^2)^2} - \beta J - \frac{1}{2} \log \left(\frac{1}{IJ} \right), & \text{se } T \leq T_c, \end{cases} \quad (3.68)$$

onde $L_{\pm} = \sqrt{2(\mu \pm J)}$, e a constante de normalização \mathcal{N} foi escolhida de modo a obtermos um limite finito para a energia livre quando $I \rightarrow \infty$ (limite clássico).

Soluções numéricas de (3.68) são mostradas na Fig. 3.5. Observamos que, para cada temperatura, foi usado o correspondente valor de $\mu(T)$ obtido anteriormente. O limite clássico, também mostrado na figura, é obtido da forma usual, isto é, considerando o limite $I \rightarrow \infty$, quando temos que $\sinh \left(\frac{\beta y}{2\sqrt{I}} \right) \approx \frac{\beta y}{2\sqrt{I}}$, de onde segue que

$$\begin{aligned} \beta\mathcal{F}_{\text{clas}} &= \frac{1}{2} \log \left(\beta\mu + \sqrt{(\beta\mu)^2 - (\beta J)^2} \right) + \frac{1}{4} \frac{\beta\mu - \sqrt{(\beta\mu)^2 - (\beta J)^2}}{\beta\mu + \sqrt{(\beta\mu)^2 - (\beta J)^2}} \\ &\quad - \beta\mu - \log \left(\frac{\sqrt{\beta J}}{2} \right). \end{aligned} \quad (3.69)$$

Esta energia livre (clássica) difere daquelas encontradas por [8,20] devido à última contribuição logarítmica. Tal discrepância surge da escolha da constante de normalização \mathcal{N} . Se escolhermos \mathcal{N} seguindo a prescrição de Feynman [12], obtemos resultados não físicos no regime quântico para valores finitos de I como, por exemplo, calor específico negativo para baixas temperaturas.

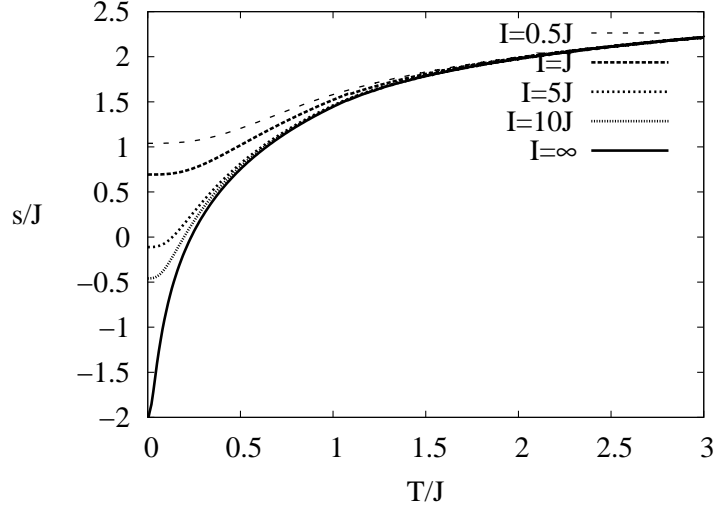


Figura 3.6: Entropia como função da temperatura para o modelo esférico quântico de vidro de spins com $p=2$.

Entropia

A partir da energia livre podemos calcular a (densidade de) *entropia* que é dada por

$$s = - \left[\frac{\partial \mathcal{F}/N}{\partial T} \right]_{\mu}, \quad (3.70)$$

onde o índice μ indica que a derivada é feita com μ constante. Utilizando a Eq. (3.68), obtemos

$$s = \frac{1}{2\pi J^2} \int_{L_-}^{L_+} dy y \sqrt{4J^2 - (2\mu - y^2)^2} \left(\frac{\beta y}{\sqrt{I}} \coth \left(\frac{\beta y}{2\sqrt{I}} \right) - 2 \log \left[\sinh \left(\frac{\beta y}{2\sqrt{I}} \right) \right] \right) + \frac{1}{2} \log \left(\frac{1}{IJ} \right), \quad (3.71)$$

tendo-se em conta a variação de μ com a temperatura, inclusive o seu valor fixo na fase VS.

Exemplos da variação de s como a temperatura se encontram na Fig. (3.6), onde pode-se notar que a entropia permanece finita quando $T \rightarrow 0$ para qualquer valor finito de I , enquanto que recuperamos a divergência $s \rightarrow -\infty$ no limite clássico $I \rightarrow \infty$ [8, 20]. Este é um resultado esperado já que o modelo esférico apresenta esta patologia [7, 8, 20].

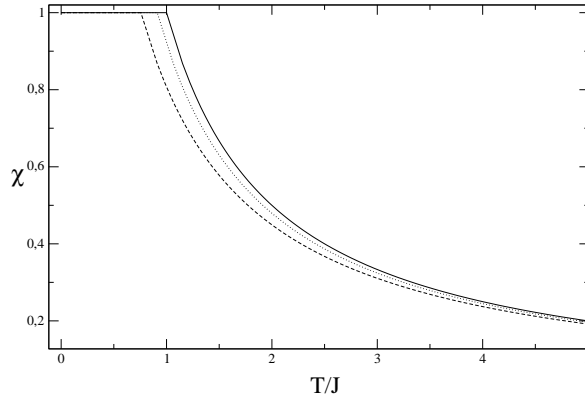


Figura 3.7: Susceptibilidade Estática como função da temperatura para o modelo esférico quântico de vidro de spins com $p=2$. De baixo para cima: $JI = 0.4, 1$ e ∞ .

Susceptibilidade

A *susceptibilidade dinâmica* é a resposta a um campo externo auxiliar $H(\omega_m)$ que, se o adicionamos ao funcional (3.43), nos leva a

$$\chi(\omega_m) = \beta(q_0(\omega_m) - q(\omega_m)), \quad (3.72)$$

(como obtido em [3] para o caso de spins clássicos de Ising, fazendo-se a devida identificação $J_0 = 0$). Levando em conta as Eqs. (3.47) e (3.48), temos explicitamente

$$\chi(\omega_m) = \frac{\omega_m^2 + 2\mu - \sqrt{(2\mu + I\omega_m^2)^2 - 4J^2}}{2J^2}. \quad (3.73)$$

A *verdadeira* susceptibilidade dinâmica, que pode ser medida em laboratório, é definida para frequências reais, e deve ser obtida através da continuação analítica $i\omega_m \rightarrow \omega + i\eta$, no limite $\eta \rightarrow 0^+$. Essa susceptibilidade apresenta partes real e imaginária.

A partir da Eq. (3.73), podemos obter a *susceptibilidade estática*, tomando $\omega_m = 0$. Temos, assim,

$$\chi(0) = \frac{\mu - \sqrt{\mu^2 - J^2}}{J^2}, \quad (3.74)$$

que é constante para $T \leq T_c$ (quando $\mu = J$), apresenta uma cúspide característica em $T = T_c$, e tem um comportamento segundo uma *lei de Curie* (figura (3.7)) para $T \gg T_c$.

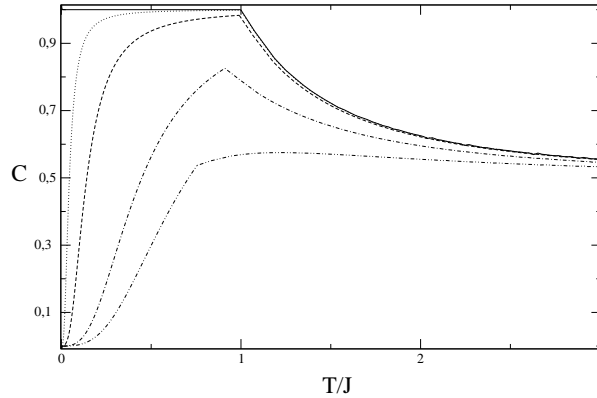


Figura 3.8: Calor específico como função da temperatura para o modelo esférico quântico de vidro de spins com $p=2$. De baixo para cima: $JI = 0.2, 0.4, 1, 10$ e ∞ .

Calor específico

O *calor específico* pode ser obtido a partir de uma derivada da entropia, $c = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)$. Para utilizarmos a Eq. (3.71) devemos considerar a dependência de $\mu(T)$ como a temperatura, sendo inviável escrever uma expressão analítica para c . Alguns resultados numéricos são apresentados nos gráficos da Fig. (3.8), tendo sido obtidos via derivação numérica. É interessante notar que o calor específico se anula em $T = 0$ para valores finitos de I , como esperado em sistemas quânticos [21–24], sendo constante abaixo da temperatura crítica no limite clássico $I \rightarrow \infty$.

3.3.2 Estabilidade das soluções com simetria de réplicas

Devemos observar que a validade do *método do ponto de sela*, utilizado ao longo deste estudo do caso $p = 2$, requer que as soluções da equação de ponto de sela (3.42) resultem em *mínimos* de $G[\mathbf{q}(\omega_m)]$, Eq. (3.43). Precisamos, então, calcular a *segunda variação* de $G(\mathbf{q}(\omega_m))$ com respeito ao campo $q_{\alpha\nu}(\omega_m)$, com o objetivo de estudarmos o sinal dos autovalores associados à forma quadrática em questão e, por conseguinte, a *estabilidade* das soluções de ponto de sela obtidas sob a hipótese de simetria entre as réplicas.

Seguindo as técnicas usuais [13], definimos $\epsilon^{\alpha\nu}$ como sendo desvios de $q_{\alpha,\nu}(\omega_m)$ com respeito à solução ponto de sela com simetria de réplicas ($q_{\alpha,\nu}(\omega_m) = q(\omega_m)$ para $\alpha \neq \nu$). Considerando os desvios estáticos nos campos $q_{\alpha\nu}$, mas mantendo a dinâmica dos spins, retornamos ao funcional (3.32) e eliminamos os campos $\lambda_{\alpha\nu}$ através da primeira igualdade da Eq. (3.23) (que

em $p = 2$ é válida para os campos dependentes de frequência). Temos, então,

$$\begin{aligned}
G(\mathbf{q}(\omega_m)) &= \frac{(\beta J)^2}{4} \sum_{\alpha, \nu} \sum_{m=-\infty}^{\infty} |q_{\alpha, \nu}(\omega_m)|^2 \\
&- \log \left[\int \left[\prod_{\alpha, m} dS^\alpha(\omega_m) dS^{\alpha*}(\omega_m) \right] e^{-\beta \sum_{\alpha, m} [\frac{1}{2}\omega_m^2 + \mu] |S^\alpha(\omega_m)|^2} \right. \\
&\times \left. e^{\frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{\alpha, \nu, m} q_{\alpha, \nu}(\omega_m) S^{\alpha*}(\omega_m) S^\nu(\omega_m)} \right], \tag{3.75}
\end{aligned}$$

Substituindo $q_{\alpha\nu}(\omega_m) = q(\omega_m) + \epsilon^{\alpha\nu}$ neste último funcional, expandimos cada termo em série de potências de $\epsilon^{\alpha\nu}$, retendo apenas termos de segunda ordem. A expressão resultante para a segunda variação de $G(\mathbf{q}(\omega_m))$ é

$$\begin{aligned}
\delta^2 G(\mathbf{q}(\omega_m)) &= \frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{\alpha < \nu < \gamma < \delta} \left[\delta_{(\alpha\nu)(\gamma\delta)} - (\beta J)^2 \left(\langle S^{*\alpha}(\omega_m) S^\nu(\omega_m) S^{*\gamma}(\omega_m) S^\delta(\omega_m) \rangle_{L_0} \right) \right] \epsilon^{\alpha\nu} \epsilon^{\gamma\delta} \\
&+ \frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{\alpha < \nu < \gamma < \delta} \left[(\beta J)^2 \left(\langle S^{*\alpha}(\omega_m) S^\nu(\omega_m) \rangle_{L_0} \langle S^{*\gamma}(\omega_m) S^\delta(\omega_m) \rangle_{L_0} \right) \right] \epsilon^{\alpha\nu} \epsilon^{\gamma\delta}, \tag{3.76}
\end{aligned}$$

onde $\langle \dots \rangle_{L_0}$ significa média ponderada pelos pesos dados pelo integrando no logaritmo de (3.75) com $q_{\alpha\nu}(\omega_m) = q(\omega_m)$ (3.44).

Esta forma quadrática deve ser *positivo definida* [25] para uma solução estável do problema.

A matriz \mathbf{M} associada a esta forma quadrática tem três tipos diferentes de elementos os quais listaremos doravante. Com efeito,

$$\left\{ \begin{array}{l}
M_{(\alpha\nu)(\alpha\nu)} = 1 - (\beta J)^2 \left(\langle |S^\alpha(\omega_m)|^2 |S^\nu(\omega_m)|^2 \rangle_{L_0} - \langle S^{*\alpha}(\omega_m) S^\nu(\omega_m) \rangle_{L_0}^2 \right) =: P; \\
M_{(\alpha\nu)(\alpha\gamma)} = -(\beta J)^2 \left(\langle |S^\alpha(\omega_m)|^2 S^\nu(\omega_m) S^{*\gamma}(\omega_m) \rangle_{L_0} - \langle S^{*\alpha}(\omega_m) S^\nu(\omega_m) \rangle_{L_0}^2 \right) =: Q; \\
M_{(\alpha\nu)(\gamma\delta)} = -(\beta J)^2 \left(\langle S^{*\alpha}(\omega_m) S^\nu(\omega_m) S^{*\gamma}(\omega_m) S^\delta(\omega_m) \rangle_{L_0} - \langle S^{*\alpha}(\omega_m) S^\nu(\omega_m) \rangle_{L_0}^2 \right) =: R.
\end{array} \right. \tag{3.77}$$

As médias que aparecem nos elementos da matriz \mathbf{M} podem ser obtidas via *teorema de*

Wick [12] expressando-as em termos dos campos $q_0(\omega_m)$ e $q(\omega_m)$. No que consiste, temos

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle |S^\alpha(\omega_m)|^2 \rangle_{L_0} = q_0(\omega_m); \\ \langle S^{*\alpha}(\omega_m)S^\nu(\omega_m) \rangle_{L_0} = q(\omega_m); \\ \langle |S^\alpha(\omega_m)|^2 |S^\nu(\omega_m)|^2 \rangle_{L_0} = 2q(\omega_m)^2 + q_0(\omega_m)^2; \\ \langle |S^\alpha(\omega_m)|^2 S^\nu(\omega_m) S^{*\gamma}(\omega_m) \rangle_{L_0} = 2q(\omega_m)^2 + q_0(\omega_m)q(\omega_m); \\ \langle S^{*\alpha}(\omega_m)S^\nu(\omega_m)S^{*\gamma}(\omega_m)S^\delta(\omega_m) \rangle_{L_0} = 3q(\omega_m)^2. \end{array} \right. \quad (3.78)$$

Vamos calcular os autovalores de \mathbf{M} , para n inteiro, e então faremos uma continuação analítica para $n \rightarrow 0$. A matriz \mathbf{M} é diagonalizável uma vez que é real e simétrica. Existem, portanto, um total de $n(n-1)/2$ ($\dim \mathbf{M}$) autovetores linearmente independentes, que podemos escrever na forma

$$|\mathbf{u}\rangle = (\{\epsilon^{\alpha\nu}\}), \quad (3.79)$$

onde $\{\epsilon^{\alpha\nu}\}$ corresponde a um vetor coluna de dimensão $n(n-1)/2$. Estes vetores devem satisfazer a equação de autovalores

$$\mathbf{M} |\mathbf{u}\rangle = \lambda |\mathbf{u}\rangle. \quad (3.80)$$

de Almeida e Thouless demonstraram que é possível gerar todo o espaço de autovetores linearmente independentes do sistema considerando apenas três classes distintas de simetria entre os índices dos autovetores. A vantagem está em escolher autovetores apropriados, que gerem todo o espaço de autovetores e que permitam-nos, através de argumentos de simetria, reduzir a dimensão da matriz a ser diagonalizada, simplificando desta forma o problema.

A primeira classe, correspondente a autovetores com simetria entre todos os índices, i.e., $\epsilon^{\alpha\nu} = a \ \forall \alpha\nu$. Levando-nos a seguinte expressão para este autovalor

$$\lambda_1(n) = P + 2(n-2)Q + \frac{1}{2}(n-2)(n-3)R, \quad (3.81)$$

e para o limite de interesse $n \rightarrow 0$

$$\lambda_1 := \lim_{n \rightarrow 0} \lambda_1(n) = P - 4Q + 3R, \quad (3.82)$$

com degenerescência 1 (isto é, não-degenerado).

A segunda classe de simetria consiste em considerarmos autovetores do tipo, $\epsilon^{\alpha\nu} = a$ para α ou $\nu = \theta$ e $\epsilon^{\alpha\nu} = b$ caso contrário. Os autovetores da primeira classe de simetria estão contidos na classe descrita acima, de modo que asseguramos ortogonalidade igualando o produto escalar entre eles a zero, com efeito assumindo sem perda de generalidade $\theta = 1$ temos uma relação entre a e b , a saber,

$$a = -\frac{(n-2)}{2}b. \quad (3.83)$$

Assim, o autovalor $\lambda_2(n)$ associado a esta classe de simetria é obtido como sendo

$$\lambda_2(n) = P + (n-4)Q + (n-3)R, \quad (3.84)$$

e no limite de interesse

$$\lambda_2 := \lim_{n \rightarrow 0} \lambda_2(n) = P - 4Q + 3R = \lambda_1, \quad (3.85)$$

como ocorre em [13], cuja degenerescência é $n-1$.

A terceira classe de autovetores é simétrica com respeito a todos os índices, exceto para dois deles, $\epsilon^{\theta\beta} = a$ para certos θ, β , $\epsilon^{\theta\alpha} = \epsilon^{\beta\alpha} = b$ e $\epsilon^{\alpha\nu} = c$ caso contrário, de modo que obtemos as seguintes restrições, resultantes das relações de ortogonalidade com os autovetores gerados pelas duas primeiras classes de autovetores

$$b = -\frac{1}{(n-2)}a \quad c = \frac{2}{(n-2)(n-3)}a. \quad (3.86)$$

Portanto, o terceiro autovalor que estamos calculando assume a forma

$$\lambda_3 = P - 2Q + R, \quad (3.87)$$

que é independente de n .

Esta terceira classe de vetores gera toda o espaço de autovetores, uma vez que temos $n(n-1)/2$ maneiras de escolher θ e β , diferentes e não ordenados e este autovalor tem degenerescência $n(n-3)/2$.

O autovalor λ_3 é o *autovalor crítico* de de Almeida e Thouless [13] (o autovalor relevante

para a estabilidade da solução RS).

Os valores de P , Q e R em (3.77) podem ser facilmente expressos em termos de $q_0(\omega_m)$ e $q(\omega_m)$ utilizando-se (3.78). Com efeito,

$$\begin{cases} P = 1 - (\beta J)^2 (q(\omega_m)^2 + q_0(\omega_m)^2); \\ Q = -(\beta J)^2 (q(\omega_m)^2 + q_0(\omega_m)q(\omega_m)); \\ R = -2(\beta J)^2 q(\omega_m)^2. \end{cases} \quad (3.88)$$

Colocando-se (3.88) em (3.82) ou (3.85) segue que $\lambda_{1,2}$ fica

$$\lambda_{1,2} = 1 - (\beta J)^2 [(q_0(\omega_m) - q(\omega_m))^2 - 2q(\omega_m)(q_0(\omega_m) - q(\omega_m))]. \quad (3.89)$$

E por fim o autovalor crítico λ_3 fica dado por

$$\lambda_3 = 1 - (\beta J)^2 (q_0(\omega_m) - q(\omega_m))^2. \quad (3.90)$$

Como vimos nas soluções das equações de ponto de sela (3.47, 3.48), $q(\omega_m) = 0$ é sempre uma solução possível e daí λ_3 fica uma função apenas de $q_0(\omega_m)$. Mas aquelas equações mostram que tanto $q_0(\omega_m)$, quando $q(\omega_m) = 0$, quanto $q_0(\omega_m) - q(\omega_m)$, quando $q(\omega_m) \neq 0$, são dados pela mesma expressão, o que nos leva a

$$\lambda_3 = 1 - \frac{1}{2(\beta J)^2} \left[(2\beta\mu + \beta I\omega_m^2)^2 - (2\beta\mu + \beta I\omega_m^2) \sqrt{(2\beta\mu + \beta I\omega_m^2)^2 - 4(\beta J)^2} - 2(\beta J)^2 \right]. \quad (3.91)$$

Para $T \leq T_c$ vimos que $\mu = \mu_c = J$ e a única frequência relevante é $\omega_m = 0$, com estas informações no autovalor (3.91) concluímos que λ_3 “condensa” no valor zero para $T \leq T_c$, caracterizando a transição. Como λ_3 não é negativo nem positivo para $T \leq T_c$, não podemos dizer que as soluções obtidas via simetria entre réplicas são estáveis ou instáveis. Logo, fazem-se necessário utilizar outras ferramentas para tal aferição. Estas são apresentadas na seção (3.3.3).

3.3.3 Primeiro estágio de quebra de simetria de réplicas

Vimos na seção (3.3.2) que o autovalor crítico de Almeida e Thouless (eq. 3.91) para o modelo esférico quântico de vidro de spins com $p = 2$ (2QSM)

$$\lambda_3 = 1 - (\beta J)^2 (q_o(\omega_m) - q(\omega_m))^2, \quad (3.92)$$

é positivo para $T > T_c$ e se fixa no valor 0 (caracterizando a fase condensada) para $T \leq T_c$ (*estabilidade marginal*).

Vamos utilizar a *1RSB* para verificar se tal comportamento de λ_3 caracteriza a existência de outras soluções estáveis além daquelas obtidas via RS.

A *1RSB* de G. Parisi [14] é obtida dividindo a matriz dos overlap's $\mathbf{q}(\omega_m)$, de ordem $n \times n$, em n/m_1 blocos (ou *clusters*) de dimensões $m_1 \times m_1$ cada. Os elementos de $\mathbf{q}(\omega_m)$ pertencentes a blocos diagonais, cujos índices satisfazem $\alpha \neq \nu$ serão denotados por $q_{\alpha\nu}(\omega_m) = q_1(\omega_m)$, e os com índices satisfazendo $\alpha = \nu$ são $q_{\alpha,\alpha}(\omega_m) = q_o(\omega_m)$ e, finalmente, os demais elementos de $\mathbf{q}(\omega_m)$ (fora dos blocos) ficam $q_{\alpha\nu}(\omega_m) = q_2(\omega_m)$.

Em outras palavras, réplicas num mesmo “cluster” têm overlap $q_o(\omega_m)$ na diagonal, $q_1(\omega_m)$ fora da diagonal deste e, por fim, para clusters diferentes temos overlap $q_2(\omega_m)$.

Introduzindo a matriz ε definida por:

$$\varepsilon_{\alpha\nu} = \begin{cases} 1; \text{ se } \alpha \text{ e } \nu \in \text{Bloco Diagonal} \\ 0; \text{ se não pertence} \end{cases} \quad (3.93)$$

podemos convenientemente escrever a seguinte parametrização para $\mathbf{q}(\omega_m)$.

$$q_{\alpha\nu}(\omega_m) = (q_o(\omega_m) - q_1(\omega_m))\delta_{\alpha\nu} + (q_1(\omega_m) - q_2(\omega_m))\varepsilon_{\alpha\nu} + q_2(\omega_m), \quad (3.94)$$

onde $\delta_{\alpha\nu}$ é o delta de Kronecker.

Um esboço de tal matriz $\mathbf{q}(\omega_m)$ está apresentado abaixo para $m_1 = 3$.

$$\mathbf{q}(\omega_m) = \begin{pmatrix} q_o(\omega_m) & q_1(\omega_m) & q_1(\omega_m) & & \vdots & & \\ q_1(\omega_m) & q_o(\omega_m) & q_1(\omega_m) & \cdots & q_2(\omega_m) & \cdots & \\ q_1(\omega_m) & q_1(\omega_m) & q_o(\omega_m) & & \vdots & & \\ & & & q_o(\omega_m) & q_1(\omega_m) & q_1(\omega_m) & \\ & \vdots & & q_1(\omega_m) & q_o(\omega_m) & q_1(\omega_m) & \\ \cdots & q_2(\omega_m) & \cdots & q_1(\omega_m) & q_1(\omega_m) & q_o(\omega_m) & \\ & \vdots & & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.95)$$

É possível diagonalizar $\mathbf{q}(\omega_m)$ e mostrar que seus autovalores são:

$$\begin{cases} \eta_o = q_o(\omega_m) - q_1(\omega_m); & \text{com } deg. = \frac{n}{m_1}(m_1 - 1) \\ \eta_1 = q_o(\omega_m) - (1 - m_1)q_1(\omega_m) - m_1q_2(\omega_m); & \text{com } deg. = \frac{n}{m_1} - 1 \\ \eta_2 = q_o(\omega_m) - (1 - m_1)q_1(\omega_m) - (m_1 - n)q_2(\omega_m); & \text{com } deg. = 1, \end{cases} \quad (3.96)$$

onde *deg.* denota a degenerescência de cada autovalor.

Já a matriz inversa $\mathbf{q}^{-1}(\omega_m)$ vem a ser dada pela seguinte parametrização:

$$(\mathbf{q}^{-1}(\omega_m))_{\alpha\nu} = A\delta_{\alpha,\nu} + B\varepsilon_{\alpha\nu} + C, \quad (3.97)$$

com,

$$\begin{cases} A = \frac{1}{\eta_o}; \\ B = -\frac{q_1(\omega_m) - q_2(\omega_m)}{\eta_o\eta_2} \underset{n \rightarrow 0}{=} -\frac{q_1(\omega_m) - q_2(\omega_m)}{\eta_o\eta_1}; \\ C = -\frac{q_2(\omega_m)}{\eta_1\eta_2} \underset{n \rightarrow 0}{=} -\frac{q_2(\omega_m)}{\eta_1^2}. \end{cases} \quad (3.98)$$

Note que o limite $n \rightarrow 0$ implica em $\eta_1 \rightarrow \eta_2$, além disso $m_1 \in [0, 1]$ [26].

É importante salientar que a forma RS da matriz dos overlap's $\mathbf{q}(\omega_m)$ está “contida” na forma 1RSB, bastando tomar os limites $m_1 \rightarrow 1$ e $q_1(\omega_m), q_2(\omega_m) \rightarrow q(\omega_m)$. Com isto recuperamos, por conseguinte, a inversa $\mathbf{q}_{RS}^{-1}(\omega_m)$ (3.45) e (3.46).

Agora lembremos que o funcional $G[\mathbf{q}(\omega_m)]$ (3.43) do sistema é dado por

$$G(\mathbf{q}(\omega_m)) = \frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{\alpha\nu, m=0} q_{\alpha\nu}(\omega_m)^2 + \sum_{m=0} \log [\det ([I\beta\omega_m^2 + 2\beta\mu] \mathbf{I} - (\beta J)^2 \mathbf{q}(\omega_m))], \quad (3.99)$$

assim, o grande potencial termodinâmico fica:

$$\Omega(\omega_m) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \left[\frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{\alpha\nu, m=0} q_{\alpha\nu}(\omega_m)^2 + \sum_{m=0} \log [\det ([I\beta\omega_m^2 + 2\beta\mu] \mathbf{I} - (\beta J)^2 \mathbf{q}(\omega_m)) \right]. \quad (3.100)$$

Utilizando (3.97) juntamente com (3.98) em (3.100) vemos que cada um de seus termos assumem as respectivas formas (no limite $n \rightarrow 0$):

$$\frac{1}{n} \sum_{\alpha\nu, m=0} q_{\alpha\nu}(\omega_m)^2 \underset{n \rightarrow 0}{=} \sum_{m=0} (q_o(\omega_m)^2 + (m_1 - 1)q_1(\omega_m)^2 - m_1 q_2(\omega_m)^2), \quad (3.101)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \log [\det (\mathbf{M}(\omega_m))] &\underset{n \rightarrow 0}{=} - \frac{(\beta J)^2 q_2(\omega_m)}{[I\beta\omega_m^2 + 2\beta\mu] - (\beta J)^2 (q_o(\omega_m) + (m_1 - 1)q_1(\omega_m) - m_1 q_2(\omega_m))} \\ &+ \frac{m_1 - 1}{m_1} \log [[I\beta\omega_m^2 + 2\beta\mu] - (\beta J)^2 (q_o(\omega_m) - q_1(\omega_m))] \\ &+ \frac{1}{m_1} \log [[I\beta\omega_m^2 + 2\beta\mu] - (\beta J)^2 (q_o(\omega_m) + (m_1 - 1)q_1(\omega_m) - m_1 q_2(\omega_m))], \end{aligned} \quad (3.102)$$

onde $\mathbf{M}(\omega_m) = [I\beta\omega_m^2 + 2\beta\mu] - (\beta J)^2 \mathbf{q}(\omega_m)$ e o limite $n \rightarrow 0$ em (3.102) deve ser tomado com cuidado.

Assim, com (3.101) e (3.102) o grande potencial termodinâmico $\Omega(\omega_m)$ (3.100) se torna:

$$\begin{aligned} \Omega_{1RSB}(\omega_m) &= \frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{m=0} (q_o(\omega_m)^2 + (m_1 - 1)q_1(\omega_m)^2 - m_1 q_2(\omega_m)^2) \\ &+ \frac{m_1 - 1}{m_1} \sum_{m=0} \log [[I\beta\omega_m^2 + 2\beta\mu] - (\beta J)^2 (q_o(\omega_m) - q_1(\omega_m))] \\ &+ \frac{1}{m_1} \sum_{m=0} \log [[I\beta\omega_m^2 + 2\beta\mu] - (\beta J)^2 (q_o(\omega_m) + (m_1 - 1)q_1(\omega_m) - m_1 q_2(\omega_m))] \\ &- \sum_{m=0} \frac{(\beta J)^2 q_2(\omega_m)}{[I\beta\omega_m^2 + 2\beta\mu] - (\beta J)^2 (q_o(\omega_m) + (m_1 - 1)q_1(\omega_m) - m_1 q_2(\omega_m))}. \end{aligned} \quad (3.103)$$

Prosseguindo, devemos encontrar as equações de ponto de sela para os parâmetros $q_o(\omega_m)$, $q_1(\omega_m)$, $q_2(\omega_m)$ e m_1 as quais são obtidas pela extremização de (3.103), ou seja, por:

$$\frac{\partial \Omega_{1SRB}}{\partial q_o(\omega_m)} = \frac{\partial \Omega_{1RSB}}{\partial q_1(\omega_m)} = \frac{\partial \Omega_{1RSB}}{\partial q_2(\omega_m)} = \frac{\partial \Omega_{1RSB}}{\partial m_1} = 0, \quad (3.104)$$

donde obtemos o sistema de equações de ponto de sela (na respectiva ordem de (3.104))

$$0 = q_o(\omega_m) - \frac{m_1 - 1}{m_1} \frac{1}{A_o} - \frac{1}{m_1 A_1} - \frac{(\beta J)^2 q_2(\omega_m)}{A_1^2} \quad (3.105)$$

$$0 = (m_1 - 1) \left\{ q_1(\omega_m) + \frac{1}{m_1 A_o} - \frac{(\beta J)^2 q_2(\omega_m)}{A_1^2} - \frac{1}{m_1 A_1} \right\} \quad (3.106)$$

$$0 = q_2(\omega_m) \left\{ 1 - \frac{(\beta J)^2}{A_1^2} \right\} \quad (3.107)$$

$$0 = \frac{(\beta J)^2}{2} \left[(q_1(\omega_m)^2 - q_2(\omega_m)^2) - \frac{2(\beta J)^2 q_2(\omega_m)(q_1(\omega_m) - q_2(\omega_m))}{A_1^2} - \frac{2(q_1(\omega_m) - q_2(\omega_m))}{m_1 A_1} \right] + \frac{1}{m_1^2} \log \left[\frac{A_o}{A_1} \right], \quad (3.108)$$

onde temos eliminado a solução incompatível $m_1 = 0$ e, além disso, introduzimos as notações A_o e A_1 dadas por:

$$A_o = [I\beta\omega_m + 2\beta\mu] - (\beta J)^2 (q_o(\omega_m) - q_1(\omega_m)), \quad (3.109)$$

$$A_1 = [I\beta\omega_m + 2\beta\mu] - (\beta J)^2 (q_o(\omega_m) + (m_1 - 1)q_1(\omega_m) - m_1 q_2(\omega_m)). \quad (3.110)$$

Soluções das equações de ponto de sela 1RSB

Da equação (3.107) vemos que $q_2(\omega_m) = 0$ sempre é uma solução. Daí, com isto em (3.106) temos que $(m_1 - 1)q_1(\omega_m) = 0$ donde $m_1 = 1$ ou $q_1(\omega_m) = 0$. Quaisquer uns destes resultados nos levam à solução (paramagnética) obtida via simetria de réplicas (RS), por exemplo, substituindo estes em (3.105) obtemos a equação (3.47) (com $q(\omega_m) = 0$, já que $A_o = A_1$). Com efeito, $q_2(\omega_m) = q_1(\omega_m) = q_{RS}(\omega_m) = 0$ e

$$q_o(\omega_m) = \frac{(I\beta\omega_m^2 + 2\beta\mu) \pm \sqrt{(I\beta\omega_m^2 + 2\beta\mu)^2 - 4(\beta J)^2}}{2(\beta J)^2}.$$

Conclusão, se $q_2(\omega_m) = 0$ então a quebra de simetria de réplicas não adiciona novas soluções

recaindo nas obtidas via (RS).

Por outro lado, se consideramos agora em (3.107) que $q_2(\omega_m) \neq 0$, então deve valer que $1 - \frac{(\beta J)^2}{A_1^2} = 0$, donde $A_1^2 = (\beta J)^2$. Com este resultado em (3.106) chegamos em

$$(m_1 - 1) \left\{ q_1(\omega_m) - q_2(\omega_m) + \frac{1}{m_1 A_o} - \frac{1}{m_1 A_1} \right\} = 0. \quad (3.111)$$

De (3.111) temos que uma solução possível é $m_1 = 1$, daí com isto (além de $A_1^2 = (\beta J)^2$) em (3.105) temos

$$q_o(\omega_m) - q_2(\omega_m) = \frac{1}{(I\beta\omega_m^2 + 2\beta\mu) - (\beta J)^2(q_o(\omega_m) - q_2(\omega_m))} \quad (3.112)$$

cuja solução é, justamente, a obtida via solução RS no caso em que consideramos $q_{RS}(\omega_m) \neq 0$ (ou seja $q_2(\omega_m) = q_{RS}(\omega_m)$).

Por fim, se $m_1 \neq 1$ então de (3.111) segue que

$$q_1(\omega_m) - q_2(\omega_m) + \frac{1}{m_1 A_o} - \frac{1}{m_1 A_1} = 0. \quad (3.113)$$

Subtraindo-se (3.105) de (3.113) (levado-se em conta que $A_1^2 = (\beta J)^2$) obtemos

$$q_o(\omega_m) - q_1(\omega_m) = \frac{1}{(I\beta\omega_m^2 + 2\beta\mu) - (\beta J)^2(q_o(\omega_m) - q_1(\omega_m))}. \quad (3.114)$$

Novamente, a solução de (3.114) é a obtida via RS com $q_1(\omega_m) = q_{RS}(\omega_m)$.

Provamos assim que o modelo é (RS). Portanto, as propriedades do modelo esférico quântico de vidro de spins (com $p = 2$) devem ser descritas ou por meio de uma média recozida (annealed average) [6] ou por meio da fase condensada [27] na teoria RS [28].

Capítulo 4

Aproximação Estática: limites $p = 2$ e

$$p \rightarrow \infty$$

Como citado no fim da seção (3.2), buscamos alguma aproximação, além da hipótese de simetria entre réplicas [3], que nos permita deixar o problema mais tratável do ponto de vista analítico. O que faremos nesta seção é aplicar, ao nosso modelo, as técnicas desenvolvidas no artigo de Obuchi, Nishimori e Sherrington [5] (para o caso de um sistema quântico de vidro de spins com interação a p -spins na presença de campo transverso). Nesse trabalho, após terem executado toda abordagem do método das réplicas, os autores utilizam a Aproximação Estática (*Static Approximation*) [29] no modelo abordado pelos mesmos.

Seguindo então a proposta de [5], supomos que os campos $q_{\alpha,\nu}(\tau, \tau')$ e $\lambda_{\alpha,\nu}(\tau, \tau')$ sejam independentes do tempo imaginário τ (mas mantendo os spins dinâmicos) e também supomos, de antemão, simetria entre as réplicas. temos, portanto,

$$\begin{cases} \lambda_{\alpha,\nu}(\tau, \tau') = \lambda, & \lambda_{\alpha,\alpha}(\tau, \tau') = \lambda_0; \\ q_{\alpha,\nu}(\tau, \tau') = q, & q_{\alpha,\alpha}(\tau, \tau') = q_0. \end{cases} \quad (4.1)$$

Agora, com (4.1) e as transformadas de Fourier das variáveis de spins no funcional (3.24), separando o *modo de frequência zero* ($\omega_m = 0$) e utilizando mais uma vez uma transformação

de Hubbard-Stratonovich, somos levados a

$$\begin{aligned}
G[\mathbf{q}, \lambda] &= -\frac{(\beta J)^2}{4} [n(n-1)q^p + nq_0^p] + \frac{1}{2}n(n-1)\lambda q + \frac{1}{2}n\lambda_0 q_0 \\
&- \log \left[\int Dz \int \left[\prod_{\alpha} dS^{\alpha}(0) \right] e^{(-\mu\beta + \frac{\lambda_0 - \lambda}{2}) \sum_{\alpha} S^{\alpha}(0)^2 + \sqrt{\lambda} z \sum_{\alpha} S^{\alpha}(0)} \right. \\
&\times \left. \int \left[\prod_{m>0} \prod_{\alpha} dS^{\alpha}(\omega_m) dS^{*\alpha}(\omega_m) \right] e^{-\sum_{\alpha, m>0} [I\omega_m^2\beta + 2\beta\mu] |S^{\alpha}(\omega_m)|^2} \right]. \quad (4.2)
\end{aligned}$$

As integrais sobre as variáveis de spins são gaussianas e, portanto, podem ser realizadas sem maiores dificuldades. Com efeito, após efetuar tais integrações, levando em conta que

$$\begin{aligned}
\sum_{m>0} \log(I\omega_m^2\beta + 2\beta\mu) &= \frac{1}{2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \log(I\omega_m^2\beta + 2\beta\mu) - \frac{1}{2} \log(2\beta\mu) = \\
&= \log \left[2 \sinh \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{\frac{2\mu}{I}} \right) \right] - \frac{1}{2} \log(2\beta\mu), \quad (4.3)
\end{aligned}$$

onde a segunda igualdade se deve a uma identidade encontrada em [11], chegamos na seguinte expressão para o grande potencial termodinâmico (via aproximação estática (AE), apêndice (C))

$$\begin{aligned}
\frac{\beta\Omega_{AE}}{N} &= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} G[\mathbf{q}, \lambda] = \\
&= -\frac{(\beta J)^2}{4} [q_0^p - q^p] - \frac{\lambda q}{2} + \frac{\lambda_0 q_0}{2} + \frac{1}{2} \log(2\beta\mu - (\lambda_0 - \lambda)) - \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda}{2\beta\mu - (\lambda_0 - \lambda)} \right) \\
&+ \log \left[2 \sinh \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{\frac{2\mu}{I}} \right) \right] - \frac{1}{2} \log(2\beta\mu) - \frac{1}{2} (1 + \log(2\pi)). \quad (4.4)
\end{aligned}$$

Vamos utilizar o método do ponto de sela sobre o grande potencial termodinâmico (4.4). As condições de extremo são $0 = \delta\Omega_{AE}/\delta q$, $0 = \delta\Omega_{AE}/\delta q_0$, $0 = \delta\Omega_{AE}/\delta \lambda$ e $0 = \delta\Omega_{AE}/\delta \lambda_0$, que nos dão, respectivamente, as equações de ponto de sela,

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda = \frac{(\beta J)^2}{2} p q^{p-1}; \\ \lambda_0 = \frac{(\beta J)^2}{2} p q_0^{p-1}; \\ q = \frac{\lambda}{(2\beta\mu - (\lambda_0 - \lambda))^2}; \\ q_0 = \frac{\lambda}{(2\beta\mu - (\lambda_0 - \lambda))^2} + \frac{1}{(2\beta\mu - (\lambda_0 - \lambda))}. \end{array} \right. \quad (4.5)$$

Uma relação importante, na hora de escrevermos Ω_{AE} como uma função apenas dos campos q e q_0 (parâmetros de ordem) (e não de λ , λ_0), é obtida pela subtração da última equação de (4.5) pela penúltima. Com efeito

$$\frac{1}{(2\beta\mu - (\lambda_0 - \lambda))} = q_0 - q. \quad (4.6)$$

Assim, com (4.5) e (4.6) somos levamos à seguinte equação de ponto de sela para os campos q e q_0 ,

$$\frac{(\beta J)^2}{2} p q_{\alpha,\nu}^{p-1} + (\mathbf{q}^{-1})_{\alpha,\nu} = 2\beta\mu\delta_{\alpha,\nu}, \quad (4.7)$$

onde os elementos da matriz inversa são dados por (analogamente a (3.45), (3.46))

$$(\mathbf{q}^{-1})_{\alpha,\alpha} = \frac{q_0 - 2q}{(q_0 - q)^2}, \quad (4.8)$$

e

$$(\mathbf{q}^{-1})_{\alpha,\nu} = \frac{-q}{(q_0 - q)^2}. \quad (4.9)$$

Prosseguindo, a *condição esférica média* pode ser escrita como

$$\frac{\partial \left(\frac{\beta\Omega_{AE}}{N} \right)}{\partial(\beta\mu)} = 1, \quad (4.10)$$

o que nos resulta em

$$q_0 = 1 + \frac{1}{2\beta\mu} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{2\mu I}} \coth \left[\beta \sqrt{\frac{\mu}{2I}} \right]. \quad (4.11)$$

Por fim, levando em conta que a energia livre se relaciona com o grande potencial termodinâmico via $\beta\mathcal{F}_{AE} = \beta\Omega_{AE} - \beta N\mu$, e utilizando (4.5) e (4.6), segue que podemos escrever a energia livre sob as hipóteses (4.1), de modo que os campos λ e λ_0 sejam eliminados, ficando esta então escrita como função de q , q_0 e μ . Explicitamente,

$$\begin{aligned} \frac{\beta\mathcal{F}_{AS}}{N} &= -\frac{(\beta J)^2}{4} [q_0^p - q^p] - \frac{1}{2} \log(q_0 - q) - \frac{q}{2(q_0 - q)} + \log \left[2 \sinh \left[\frac{\beta}{2} \sqrt{\frac{2\mu}{I}} \right] \right] - \frac{1}{2} \log(2\beta\mu) \\ &- \beta\mu(1 - q_0) - \log(\mathcal{N}) - \frac{1}{2}(1 + \log(2\pi)), \end{aligned} \quad (4.12)$$

onde \mathcal{N} é a mesma proposta no capítulo (3.3), já que o modelo deve ser válido para o caso

especial $p = 2$. Estes campos podem ser obtidos (a princípio) como funções da temperatura pela solução do sistema de equações acopladas (ver (4.7), (4.8), (4.9) e (4.11)),

$$\begin{cases} \frac{(\beta J)^2}{2} p q^{p-1} - \frac{q}{(q_0 - q)^2} & = 0; \\ \frac{(\beta J)^2}{2} p q_0^{p-1} + \frac{q_0 - 2q}{(q_0 - q)^2} & = 2\beta\mu; \\ 1 + \frac{1}{2\beta\mu} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{2\mu I}} \coth \left[\beta \sqrt{\frac{\mu}{2I}} \right] & = q_0. \end{cases} \quad (4.13)$$

Um dos focos principais de nosso trabalho é o estudo das soluções do sistema (4.13) para $p \geq 3$ (já que o caso $p = 2$ já foi tratado no capítulo (3.3)), com o intento de obtermos $q_o(\beta)$, $q(\beta)$ e $\mu(\beta)$. De fato, vamos nos concentrar no estudo analítico detalhado para o caso (não trivial) $p = 3$, o qual apresentaremos no capítulo 5. Antes disto, vamos revisitar o caso $p = 2$ à luz da aproximação estática afim de avaliar sua validação como uma “boa” aproximação, bem como apresentar um estudo do limite $p \rightarrow \infty$ em que o tratamento analítico se torna menos árduo.

4.1 Teste da Aproximação Estática para $p = 2$

Nesta seção vamos abordar o modelo esférico quântico de vidro de spins com interação a p -spins, sob a hipótese da Aproximação Estática (AE) para o caso especiais $p = 2$. Neste caso, vamos nos preocupar em fazer paralelos com os resultados obtidos no capítulo (3.3) onde resolvemos o problema exatamente. Esta atitude é extremamente importante pois nos permite averiguar em qual regime a (AE) é, de fato, uma boa aproximação e em qual não é tão boa assim, justificando sua aplicação no capítulo (3).

Para o caso especial $p = 2$, o sistema de equações de ponto de sela (4.13) assume a forma

$$\begin{cases} (\beta J)^2 q - \frac{q}{(q_0 - q)^2} & = 0; \\ (\beta J)^2 q_0 + \frac{q_0 - 2q}{(q_0 - q)^2} & = 2\beta\mu; \\ 1 + \frac{1}{2\beta\mu} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{2\mu I}} \coth \left[\beta \sqrt{\frac{\mu}{2I}} \right] & = q_0. \end{cases} \quad (4.14)$$

Este sistema de equações (4.14) nos permite obter $q_o(T)$, $q(T)$ e $\mu(T)$ como funções da temperatura para cada I fixo. É didaticamente interessante estudarmos em separado os dois tipos de soluções induzidas pela primeira equação de (4.14), a saber, $q = 0$ e $q \neq 0$. A primeira

está associada a fase paramagnética (PM), já a segunda a fase vidro de spin (VS).

4.1.1 Solução paramagnética

Notemos que a primeira equação de (4.14) sempre admite como solução (trivial) $q = 0$, que caracteriza a fase paramagnética. Substituindo-se $q = 0$ na segunda equação de (4.14), segue que a fase (PM) é descrita pelo sistema de equações

$$\begin{cases} (\beta J)^2 q_0^2 - 2(\beta J) \left(\frac{\mu}{J}\right) + 1 & = 0; \\ 1 + \frac{1}{2\beta\mu} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{2\mu I}} \coth \left[\beta\sqrt{\frac{\mu}{2I}}\right] & = q_0. \end{cases} \quad (4.15)$$

Notemos que a primeira equação de (4.15) é um polinômio de segundo grau na variável q_0 , podendo ser solucionada via Baskara, obtendo

$$q_0 = \frac{\left(\frac{\mu}{J}\right) - \sqrt{\left(\frac{\mu}{J}\right)^2 - 1}}{(\beta J)}, \quad (4.16)$$

que é análoga a equação (3.49) para $\omega_m = 0$ (aproximação estática). Além disso, para que $q_0 \in \mathcal{R}$ é necessário que se tenha o discriminante em (4.16) não negativo, ou seja, $\mu \geq J$ donde concluímos que $\mu_c^{AE} = J$ para $T \leq T_c^{AE}$, onde T_c^{AE} é a temperatura crítica abaixo da qual μ “condensa” no valor J sob a hipótese de aproximação estática (AE). Este é o mesmo valor de “sticks” para μ obtido no capítulo (3.3) onde tratamos o modelo exatamente.

Para obtermos $\mu(T)$ como uma função da temperatura para $T > T_c^{AE}$, substituímos (4.16) na condição esférica (segunda equação de (4.15)) temos então que

$$\begin{cases} \frac{\left(\frac{\mu}{J}\right) - \sqrt{\left(\frac{\mu}{J}\right)^2 - 1}}{(\beta J)} & = 1 + \frac{1}{2\beta J} \left(\frac{J}{\mu}\right) - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{2JI}} \left(\frac{J}{\mu}\right) \coth \left[(\beta J)\sqrt{\frac{1}{2JI}} \left(\frac{\mu}{J}\right)\right]; & \text{se } T > T_c^{AE} \\ \mu_c^{AE} & = J. & \text{se } T \leq T_c^{AE} \end{cases} \quad (4.17)$$

A solução numérica de (4.17) para diferentes valor de I está apresentada na figura (4.1). Podemos ver que o comportamento qualitativo de μ como uma função da temperatura, sob a hipótese de aproximação estática, é o mesmo daquele obtido via solução exata (figura (3.1)). Deste modo, para cada I temos que μ “sticks” no mesmo valor J obtido via solução exata, mas em valores (ligeiramente) diferentes de temperatura crítica, isto é, $T_c^{Exact} \neq T_c^{AE}$ como

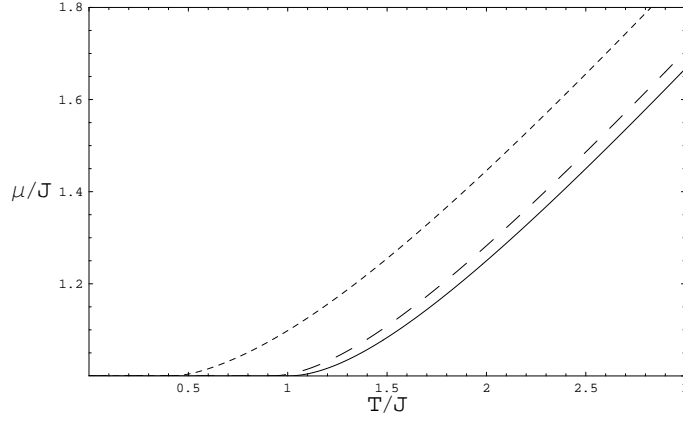


Figura 4.1: Solução numérica da equação (4.17) que apresenta μ como função da temperatura para valores diferentes do momento de inércia I , a saber, $JI = 0.2$ linha tracejado curto, $JI = 1$ linha tracejado longo e $JI = \infty$ linha contínua. Note que, assim como obtivemos para o caso de uma abordagem exata, para cada valor de I , μ “sticks” em $\mu_c = J$ para diferentes valores de temperatura crítica.

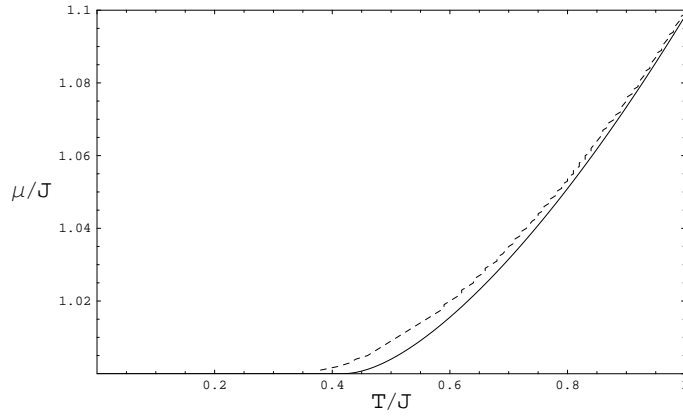


Figura 4.2: Potencial químico obtido via abordagem exata (3.57) $\mu_{Exact}(T)$ linha tracejada e obtido via aproximação estática $\mu_{AE}(T)$ (4.17) linha contínua, ambos para $JI = 0.2$.

veremos no diagrama de fases (figura (4.3)).

De fato, o interessante é comparar μ_{Exact} com μ_{AE} para salientar o quão boa é (ou não) a hipótese de aproximação estática. Para tal, vamos escolher $JI = 0.2$ (boa influência quântica) e plotamos num mesmo gráfico $\mu_{Exact}(T)$ dado pela equação (3.57), bem como $\mu_{AE}(T)$ dado por (4.17). Este resultado comparativo está apresentado na figura (4.2).

Observamos pela figura (4.2) que, quando a influência quântica é relevante (neste caso $JI = 0.2$), o potencial químico $\mu_{Exact}(T)$ (linha tracejada) e $\mu_{AE}(T)$ (linha contínua) diferem para baixas temperaturas e tornam-se semelhantes a medida que a temperatura aumenta (limite clássico). Além disso, vemos que a aproximação estática superestima a temperatura crítica, isto é, $T_c^{AE} \geq T_c^{Exact}$ (figura (4.3)) não sendo, portanto, uma boa aproximação no regime quântico.

Já o caso clássico pode ser estudado analiticamente pois, quanto $JI \rightarrow \infty$, $\coth \left[(\beta J) \sqrt{\frac{1}{2JI} \left(\frac{\mu}{J} \right)} \right] \approx$

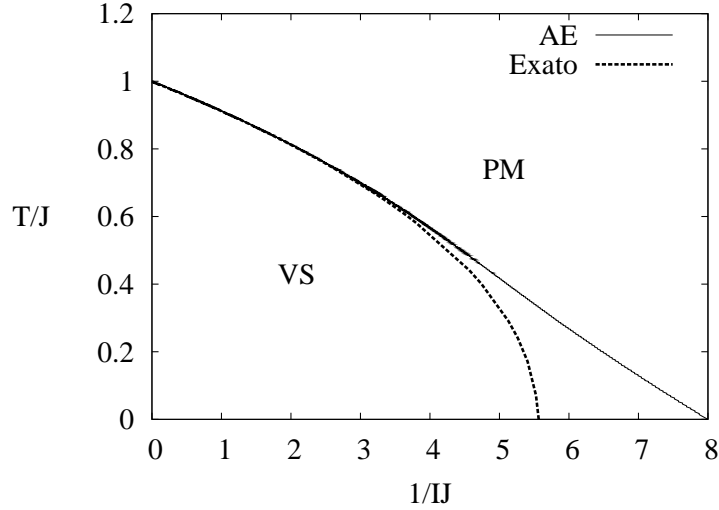


Figura 4.3: Diagrama de fase $p = 2$. Linha pontilhada T_c^{Exact} e linha contínua T_c^{AE} .

$\frac{1}{\beta J} \sqrt{2JI \left(\frac{J}{\mu}\right)}$ em (4.17). Donde obtemos (para $T > T_c^{AE}$),

$$\frac{2\beta\mu_{clas}^{AE}}{\beta J} = \beta J + \frac{1}{\beta J}, \quad (4.18)$$

que é a mesma expressão obtida com a solução exata sob o mesmo limite (equação (3.60)). Isto nos mostra que a aproximação estática é uma boa aproximação no limite clássico.

Na temperatura crítica T_c^{AE} temos $\mu = \mu_c^{AE} = J$, com este valor em (4.16) obtemos $q_o = \frac{T_c^{AE}}{J}$. Logo, com estas informações na condição esférica (segunda equação de (4.15)) obtemos a equação que nos fornece T_c^{AE} para cada I e, por conseguinte, o diagrama de fases (plano T_c^{AE}/J , $1/II$) como sendo

$$\frac{1}{2} \left(\frac{T_c^{AE}}{J} \right) = 1 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{2JI}} \coth \left[\left(\frac{J}{T_c^{AE}} \right) \sqrt{\frac{1}{2JI}} \right]. \quad (4.19)$$

A solução numérica de (4.19) está apresentada na figura (4.3), onde incluímos no mesmo “plot” a linha crítica obtida por (3.57) via abordagem exata para efeito de comparação.

Como temos concluído ao longo deste capítulo, o diagrama de fases (4.3) nos permite reafirmar nossa conjectura de que a aproximação estática é uma boa aproximação no limite clássico ($1/II$ pequeno) e que não serve para descrever com exatidão nosso modelo quando a influência quântica torna-se relevante ($1/II > 4.0$). Tal discrepância deve-se ao fato de que, para obtermos a correta temperatura crítica do sistema fez necessário realizarmos uma soma

sobre todas as (infinitas) frequências, enquanto que na aproximação estática a única frequência em consideração é $\omega_m = 0$. Por fim, o valor de I_c^{AE} (corte com o eixo horizontal) pode ser obtido analiticamente tomando o limite $T_c^{AE} \rightarrow 0$ em (4.18), sob este limite $\coth \left[\left(\frac{J}{T_c^{AE}} \right) \sqrt{\frac{1}{2JI}} \right] \approx 1$, donde obtemos $1/JI_c^{AE} = 8$ que concorda perfeitamente com o valor estima no gráfico e difere do valor crítico de I obtido exatamente, a saber, $1/JI_c^{Exact} = \frac{9\pi^2}{16} \approx 5.5$. A fase paramagnética existe acima da curva de coexistência, enquanto a fase vidro de spin abaixo da mesma.

4.1.2 Solução de vidro de spins

A fase vidro de spins (VS) é caracterizada pela solução não nula de q na primeira equação de (4.14), assim podemos cancelar tal solução e escrever

$$(\beta J)^2 = \frac{1}{(q_o - q)^2}, \quad (4.20)$$

de onde sai que $q = q_o - \left(\frac{T}{J}\right)$ (análoga a equação (3.50)) com este valor de q na segunda equação de (4.14) obtemos $\mu = J$ que é a solução crítica análoga a equação (3.51) para o caso $\omega_m = 0$ (AE). Mostrando-nos que a solução $q \neq 0$ é válida para $T < T_c^{AE}$.

Agora, subtraindo-se a primeira e segunda equação de (4.14) obtemos uma equação de segundo grau na variável $\Lambda = q_o - q$,

$$(\beta J)^2 \Lambda^2 - 2\beta\mu\Lambda + 1 = 0, \quad (4.21)$$

cuja solução é dada por:

$$\Lambda = \frac{\left(\frac{\mu}{J}\right) - \sqrt{\left(\frac{\mu}{J}\right)^2 - 1}}{(\beta J)}, \quad (4.22)$$

que é a mesma dada por (4.16) para q_o (quando $q = 0$).

Assim como fizemos no capítulo (3.3), para $T < T_c^{AE}$ a condição esférica em (4.14) deixa de ser válida (sendo $\mu = J$) mas possibilita-nos obter uma expressão para o parâmetro de ordem de vidro de spins $q(T)$ como uma função da temperatura. Com efeito, utilizando-se $q = q_o - \left(\frac{T}{J}\right)$ e q_o dado pela condição esférica com $\mu = J$ obtemos

$$q(T) = 1 - \frac{1}{2\beta J} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{2JI}} \coth \left[\beta J \sqrt{\frac{1}{2JI}} \right], \quad (4.23)$$

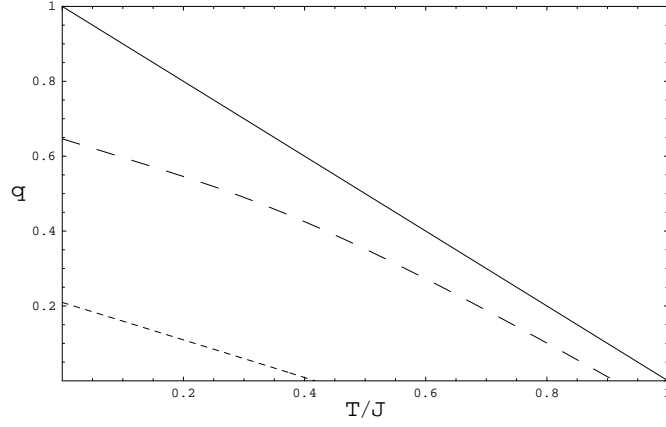


Figura 4.4: Parâmetro de ordem de vidro de spins $q(T)$ para $p = 2$ via aproximação estática para diferentes valores de I . Linha tracejado curto $JI = 0.2$, linha tracejado longo $JI = 1$ e linha contínua $JI = \infty$.

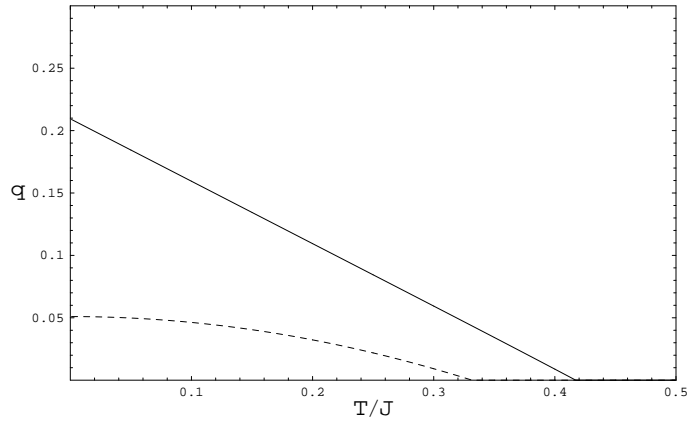


Figura 4.5: Parâmetro de ordem de vidro de spins $q(T)$ como uma função da temperatura. Linha tracejada corresponde a solução exata, enquanto que linha contínua corresponde a obtida solução via aproximação estática, ambas curvas foram geradas com $JI = 0.2$.

para $T < T_c^{AE}$, para $T \geq T_c^{AE}$ temos $q(T) = 0$. A solução numérica de (4.23) está apresentada na figura (4.4), que possui um comportamento qualitativo análogo ao obtido via solução exata (figura (3.3)) mas diferente quantitativamente para I relativamente pequenos (maior influência quântica), onde o localização da temperatura crítica (quando $q = 0$) difere daquela obtida exatamente, ou seja, $T_c^{AE} \neq T_c^{Exact}$.

Para efeito de comparação, “plotamos” num mesmo gráfico (figura (4.5)) o parâmetro de ordem de vidro de spins obtido via aproximação estática (equação (4.23)) e o obtido exatamente (equação (3.61)) para $JI = 0.2$. Novamente vemos que $T_c^{AE} > T_c^{Exact}$.

O limite clássico de (4.23) pode ser obtido analiticamente pois, quando fazemos $I \rightarrow \infty$, temos $\coth \left[\beta J \sqrt{\frac{1}{2JI}} \right] \approx \frac{1}{\beta J} \sqrt{2JI}$, donde obtemos, para $T < T_c^{AE}$

$$q_{I \rightarrow \infty} = 1 - \frac{T}{J}, \quad (4.24)$$

que é mesma expressão obtida via abordagem exata (equação (3.63)) sob o mesmo limite. Comprovando, mais uma vez, que a aproximação estática é uma boa aproximação no limite clássico ($I \rightarrow \infty$), mas vai se tornando menos aceitável conforme a influência quântica toma lugar (diminuindo-se I). Por fim, é possível calcularmos $q(T = 0)$ em (4.23) por meio do limite $T \rightarrow 0$. Com efeito, quando $T \rightarrow 0$ temos $\coth \left[\beta J \sqrt{\frac{1}{2JI}} \right] \approx 1$, daí $q(T = 0) = 1 - \sqrt{\frac{1}{8JI}}$ e lembrando que $1/JI_c^{AE} = 8$ temos, finalmente,

$$q(T = 0) = 1 - \sqrt{\frac{JI_c^{AE}}{JI}}, \quad (4.25)$$

que tem o mesmo formato daquela obtida exatamente (3.65) e nos fornece os cortes no eixo vertical de (4.4).

4.2 O limite $p \rightarrow \infty$

Nesta seção vamos abordar o modelo esférico quântico de vidro de spins com interação a p -spins, sob a hipótese da Aproximação Estática (AE) no limite $p \rightarrow \infty$.

Neste caso ($p = \infty$), apresentamos a energia livre bem como as demais quantidades termodinâmicas relevantes do sistema. Tal modelo apresenta-se extremamente simples no ponto de vista analítico, sendo encontrado apenas na fase paramagnética para qualquer temperatura. D. Gross e Mezard [30] estudaram, neste limite, o modelo clássico com spins de Ising, mostrando que tal modelo é análogo ao modelo *modelo de energia aleatória* (REM) [31]. T. Obuchi, H. Nishimori e D. Sherrington [5] estudaram o *modelo a campo transverso* no limite $p = \infty$ e sob (AE) e mostraram que, sob este limite, a aproximação estática torna-se exata.

Lembremos que as equações de ponto de sela de q_0 , q e μ para um p genérico são dadas por

$$\begin{cases} \frac{(\beta J)^2}{2} p q^{p-1} - \frac{q}{(q_0 - q)^2} & = 0; \\ \frac{(\beta J)^2}{2} p q_0^{p-1} + \frac{q_0 - 2q}{(q_0 - q)^2} & = 2\beta\mu; \\ 1 + \frac{1}{2\beta\mu} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{2\mu I}} \coth \left[\beta \sqrt{\frac{\mu}{2I}} \right] & = q_0. \end{cases} \quad (4.26)$$

Da primeira equação de (4.26) temos como solução trivial $q = 0$, caracterizando a fase paramagnética (PM). Entretanto, devemos notar que esta é a única solução para admissível para q . Com efeito, temos da primeira equação de (4.26) que sob o limite $p \rightarrow \infty$, $\frac{(\beta J)^2}{2} p q^{p-1} \rightarrow$

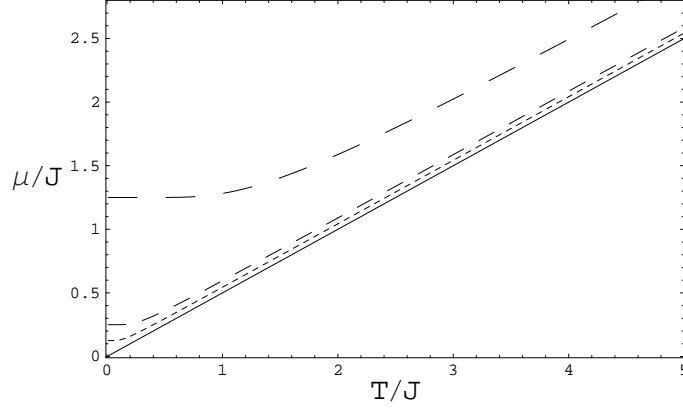


Figura 4.6: Potencial químico como uma função da temperatura para diferentes valores de I para o caso $p = \infty$. Tracejado longo $JI = 0.1$, tracejado intermediário $JI = 0.5$, tracejado curto $JI = 1$ e linha contínua $JI = \infty$.

0 (se $0 \leq q < 1$), donde $q = 0$ ou $\frac{(\beta J)^2}{2} p 1^{p-1} \rightarrow \infty$ (se $q = 1$), donde $q = \infty$ (impossível) ou $q_o = q = 1$ que não pode ocorrer para uma temperatura finita. Logo, $q = 0$ é a única solução admissível. Portanto, no limite $p \rightarrow \infty$ o sistema apresenta apenas fase paramagnética.

Assim, com $q = 0$ na segunda equação de (4.26) obtemos

$$\frac{(\beta J)^2}{2} p q_o^p - 2\beta\mu q_o + 1 = 0. \quad (4.27)$$

Daí, em (4.27) temos que $\frac{(\beta J)^2}{2} p q_o^p \rightarrow 0$ (se $q_o < 1$) quando $p \rightarrow \infty$. Logo, (4.27) se torna:

$$q_o = \frac{1}{2\beta\mu}. \quad (4.28)$$

Substituindo (4.28) na condição esférica (terceira equação de (4.26)) obtemos,

$$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{2\mu I}} \coth \left[\beta \sqrt{\frac{\mu}{2I}} \right] = 1, \quad (4.29)$$

que nos permite obter $\mu(T)$ como uma função da temperatura para cada I fixo, cuja solução numérica está apresentada na figura (4.6).

Alguns limites de (4.29) podem ser analisados. Por exemplo, para altas temperaturas $\beta \rightarrow 0$ segue que $\mu \rightarrow T/2$ que está de acordo com (3.60) no limite clássico. Além disso, quando $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) temos $\mu(T = 0) = \frac{1}{8I}$ que são, justamente, os pontos de corte no eixo vertical no gráfico (4.6).

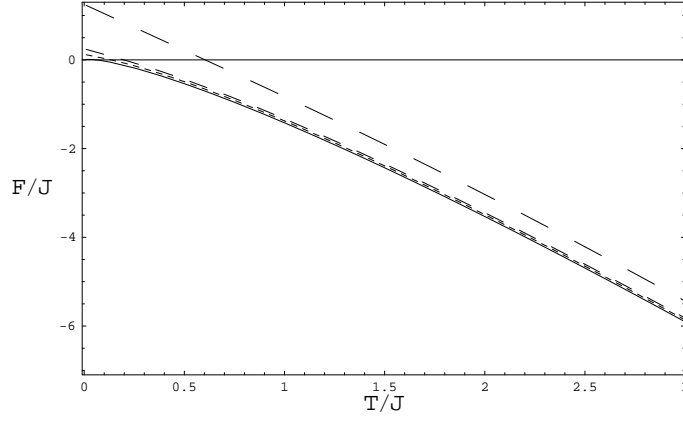


Figura 4.7: Energia livre no limite $p \rightarrow \infty$ para diferentes valores de I . Tracejado longo $JI = 0.1$, tracejado intermediário $JI = 0.5$, tracejado curto $JI = 1$ e linha contínua $JI = \infty$

A energia livre (4.12) assume a forma, para $q = 0$, conforme dada abaixo

$$\begin{aligned} \frac{\beta \mathcal{F}_{AS}}{N} &= -\frac{(\beta J)^2}{4} q_0^p - \frac{1}{2} \log(q_0) + \log \left[2 \sinh \left[\frac{\beta}{2} \sqrt{\frac{2\mu}{I}} \right] \right] - \frac{1}{2} \log(2\beta\mu) - \beta\mu(1 - q_0) - \\ &- \frac{1}{2} \log \left(\frac{1}{JI} \right) - \frac{1}{2} (1 + \log(2\pi)). \end{aligned} \quad (4.30)$$

Mas, quando $p \rightarrow \infty$ temos $q_0^p \rightarrow 0$ e $q_0 = \frac{1}{2\beta\mu}$, assim podemos escrever (4.30) como uma função da temperatura, resultando em

$$\frac{\mathcal{F}(T)_{p=\infty}}{J} = -\frac{T}{2J} (1 + \log(2\pi)) + \frac{T}{J} \log \left[2 \sinh \left(\frac{1}{2T} \sqrt{\frac{2\mu}{I}} \right) \right] - \frac{\mu}{J} \left(1 - \frac{T}{2\mu} \right) - \frac{T}{2J} \log \left(\frac{1}{JI} \right), \quad (4.31)$$

onde $\mu(T)$ como uma função da temperatura é obtido por (4.29) para cada I fixo. O gráfico da energia livre (4.31) como uma função da temperatura está apresentado na figura (4.7).

A linha contínua em (4.7) é o limite clássico de (4.31), isto é $I \rightarrow \infty$. Sob este limite $\mu \rightarrow T/2$ e $\sinh \left(\frac{1}{2T} \sqrt{\frac{2\mu}{I}} \right) \rightarrow \frac{1}{2T} \sqrt{\frac{2\mu}{I}}$. Assim, com estes resultados em (4.31) obtemos

$$\frac{\mathcal{F}(T)_{I,p=\infty}}{J} = -\frac{T}{2J} (1 + \log(2\pi)) - \frac{T}{2J} \log \left(\frac{T}{J} \right), \quad (4.32)$$

que difere ligeiramente da obtida por D. Gross e M. Mezard [30], onde tratam o modelo clássico com spins de Ising.

A entropia como uma função da temperatura $s(T)_{p=\infty} = - \left(\frac{\partial \mathcal{F}(T)_{I,p=\infty}}{\partial T} \right)_{\mu=cte}$, daí uti-

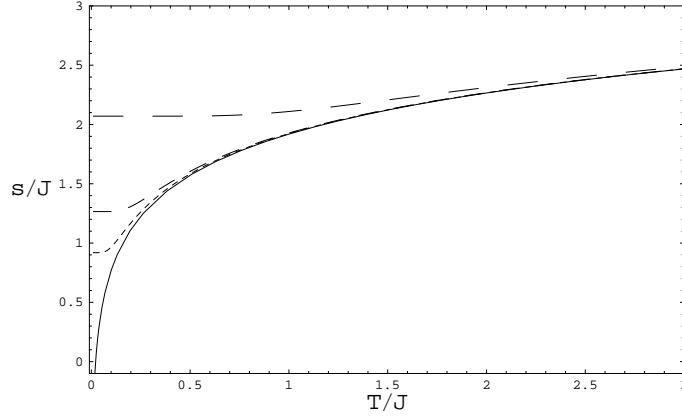


Figura 4.8: Entropia no limite $p \rightarrow \infty$ para diferentes valores de I . Tracejado longo $JI = 0.1$, tracejado intermediário $JI = 0.5$, tracejado curto $JI = 1$ e linha contínua $JI = \infty$

lizando (4.31) obtemos

$$\begin{aligned} \frac{s(T)_{p=\infty}}{J} &= \frac{1}{2J}(1 + \log(2\pi)) + \frac{1}{2TJ}\sqrt{\frac{2\mu}{I}} \coth\left[\frac{1}{2T}\sqrt{\frac{2\mu}{I}}\right] - \frac{1}{J} \log\left[2 \sinh\left(\frac{1}{2T}\sqrt{\frac{2\mu}{I}}\right)\right] + \\ &+ \frac{1}{2J} \log\left(\frac{1}{JI}\right) - \frac{1}{2J}, \end{aligned} \quad (4.33)$$

onde novamente $\mu(T)$ é obtido via (4.29). Resultados numéricos de (4.33) são apresentados na figura (4.8), onde percebemos a permanência da patologia $s \rightarrow -\infty$ quando $T \rightarrow 0$ característica do modelo esférico [7, 8, 20] no limite clássico $I \rightarrow \infty$.

A linha contínua no gráfico (4.8) é o limite clássico de (4.33) $s(T)_{I,p=\infty}$, que pode ser obtida exatamente do mesmo modo que procedemos com a energia livre (4.32). De fato, derivando (4.32) obtemos

$$\frac{s(T)_{I,p=\infty}}{J} = \frac{1}{2J}(2 + \log(2\pi)) + \frac{1}{2J} \log\left(\frac{T}{J}\right). \quad (4.34)$$

Por fim, o calor específico como uma função da temperatura é dado por $c(T)_{p=\infty} = T \left(\frac{\partial s(T)_{p=\infty}}{\partial T}\right)$, onde diferentemente ao que fizemos para obter a entropia, temos que considerar $\mu(T)$ como uma função da temperatura e calcular a derivada de (4.33) utilizando regra da cadeia. Feito isto, vamos obter $c(T, d\mu(T)/dT)_{p=\infty}$ (uma função de T e $d\mu(T)/dT$), onde para eliminarmos $d\mu(T)/dT$ devemos derivar implicitamente (4.29) obtendo:

$$d\mu(T)/dT = \frac{2\mu^2 \operatorname{csch}^2\left[\frac{1}{T}\sqrt{\frac{\mu}{2I}}\right]}{T \left[IT\sqrt{\frac{2\mu}{I}} \coth\left[\frac{1}{T}\sqrt{\frac{\mu}{2I}}\right] + \mu \operatorname{csch}^2\left[\frac{1}{T}\sqrt{\frac{\mu}{2I}}\right]\right]}. \quad (4.35)$$

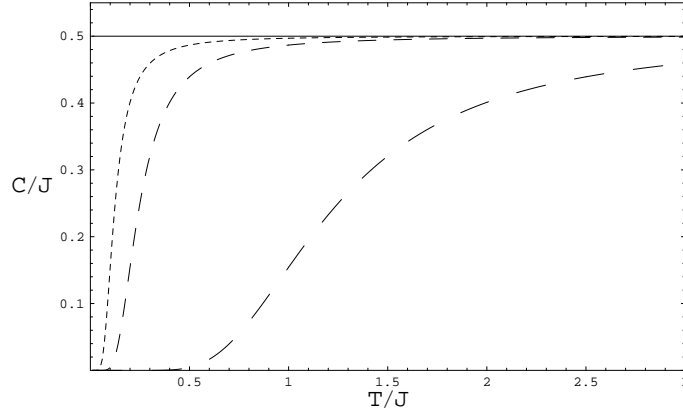


Figura 4.9: Calor específico no limite $p \rightarrow \infty$ para diferentes valores de I . Tracejado longo $JI = 0.1$, tracejado intermediário $JI = 0.5$, tracejado curto $JI = 1$ e linha contínua $JI = \infty$

Logo, substituindo (4.35) em $c(T, d\mu(T)/dT)_{p=\infty}$, mencionado no parágrafo acima, obtemos $c(T)_{p=\infty}$ como uma função só da temperatura e que fica dado por

$$\frac{c(T)_{p=\infty}}{J} = \frac{\left(\frac{\mu}{J}\right) \coth \left[\frac{1}{T} \sqrt{\frac{\mu}{2I}} \right]}{T \sqrt{2\mu I} + IT^2 \sinh \left[\frac{1}{T} \sqrt{\frac{2\mu}{I}} \right]}, \quad (4.36)$$

onde, mais uma vez, $\mu(T)$ é dado em (4.29). O gráfico de $c(T)_{p=\infty}$ em função da temperatura para diferentes valores de I está apresentado na figura (4.9).

Notemos que para qualquer I finito o calor específico é nula quanto $T = 0$ e no limite clássico $I \rightarrow \infty$ temos $\frac{c(T)_{I,p=\infty}}{J} = 1/2$, obedecendo uma lei de Dulong e Petit semelhantemente ao que ocorre no Sólido de Einstein [16].

Conforme provado no trabalho de T. Obuchi, H. Nishimori e D. Sherrington (Phase Diagram of the p-Spin-Interacting Spin Glass with Ferromagnetic Bias and Transverse Field in the Infinite-p Limit) [5], a aproximação estática (AE) torna-se exata no limite $p = \infty$. Assim, acreditamos que em nossos resultados também apresentamos exatidão, no sentido que, se iniciássemos sem a suposição de (AE) recairíamos nos mesmos resultados sob o limite $p = \infty$.

Capítulo 5

Aproximação estática no caso $p = 3$

Nesta seção vamos estudar (de forma analítica) as soluções do sistema (4.13) para o caso especial (não trivial) $p = 3$, onde vamos apresentar explicitamente os campos q_o e q como funções da temperatura. Por fim, apresentamos o diagrama de fases associado a tais soluções.

Antes de iniciarmos com o caso particular de interesse $p = 3$, é relevante analisarmos alguns casos limites. Para o limite clássico ($I \rightarrow \infty$ ou $\beta \rightarrow 0$) segue da terceira equação (a qual chamaremos doravante de condição esférica) de (4.13) que $\coth[\beta\sqrt{\frac{\mu}{2I}}] \approx \frac{1}{\beta}\sqrt{\frac{2I}{\mu}}$ nos conduzindo a $q_o = 1$, que está de acordo com o obtido por A. Crisanti e H. Sommer [4] para o p -spins clássico. Com $q_o = 1$ na primeira equação de (4.13) retomamos a equação de ponto de sela para o parâmetro de ordem q obtida para o modelo clássico [4]. Além disso, sob este limite de altas temperaturas, esperamos encontrar apenas fase paramagnética, isto é, $q = 0$. Daí, com $q_o = 1$ e $q = 0$ na segunda equação de (4.13) obtemos

$$\frac{2\beta\mu_{clas}}{\beta J} = \left(\frac{p}{2}\right)\beta J + \frac{1}{\beta J}, \quad (5.1)$$

que concorda com A. Theumann [8] para o caso especial $p = 2$ e é uma generalização para $p > 2$.

Para finalizarmos esta parte introdutória, vamos rerepresentar o sistema de equações (4.13)

para o caso de estudo $p = 3$. Com efeito,

$$\begin{cases} \frac{(\beta J)^2}{2} 3q^2 - \frac{q}{(q_0 - q)^2} & = 0; \\ \frac{(\beta J)^2}{2} 3q_0^2 + \frac{q_0 - 2q}{(q_0 - q)^2} & = 2\beta\mu; \\ 1 + \frac{1}{2\beta\mu} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{2\mu I}} \coth \left[\beta\sqrt{\frac{\mu}{2I}} \right] & = q_0. \end{cases} \quad (5.2)$$

5.1 Solução paramagnética

Notemos que a primeira equação do sistema (5.2) sempre admite $q = 0$ como sendo uma solução. Tal solução corresponde à fase paramagnética [3], onde $q_0 \neq 0$ é obtido através da solução do sistema (derivado de (5.2) com $q = 0$ na segunda equação)

$$\begin{cases} \frac{3}{2}(\beta J)^2 q_0^3 - 2(\beta J) \left(\frac{\mu}{J}\right) q_0 + 1 & = 0; \\ 1 + \frac{1}{2(\beta J)} \left(\frac{J}{\mu}\right) - \frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{J}{\mu}\right) \frac{1}{2(JI)}} \coth \left[(\beta J) \sqrt{\left(\frac{\mu}{J}\right) \frac{1}{2(JI)}} \right] & = q_0, \end{cases} \quad (5.3)$$

O sistema de equações (5.3) nos permite, a princípio, obter $q_0(T)$ e $\mu(T)$ como funções da temperatura para cada I fixo. Devemos observar que a primeira equação em (5.3) é cúbica, o que nos permite solucioná-la analiticamente via fórmula de Cardano [32], obtendo as três raízes

$$q_o^1 = -\sqrt[3]{\frac{1}{3(\beta J)^2} - i\sqrt{\left(\frac{4\beta\mu}{9(\beta J)^2}\right)^3 - \left(\frac{1}{3(\beta J)^2}\right)^2}} - \sqrt[3]{\frac{1}{3(\beta J)^2} + i\sqrt{\left(\frac{4\beta\mu}{9(\beta J)^2}\right)^3 - \left(\frac{1}{3(\beta J)^2}\right)^2}} \quad (5.4)$$

$$q_o^2 = -\omega \sqrt[3]{\frac{1}{3(\beta J)^2} - i\sqrt{\left(\frac{4\beta\mu}{9(\beta J)^2}\right)^3 - \left(\frac{1}{3(\beta J)^2}\right)^2}} - \omega^* \sqrt[3]{\frac{1}{3(\beta J)^2} + i\sqrt{\left(\frac{4\beta\mu}{9(\beta J)^2}\right)^3 - \left(\frac{1}{3(\beta J)^2}\right)^2}} \quad (5.5)$$

$$q_o^3 = -\omega^* \sqrt[3]{\frac{1}{3(\beta J)^2} - i\sqrt{\left(\frac{4\beta\mu}{9(\beta J)^2}\right)^3 - \left(\frac{1}{3(\beta J)^2}\right)^2}} - \omega \sqrt[3]{\frac{1}{3(\beta J)^2} + i\sqrt{\left(\frac{4\beta\mu}{9(\beta J)^2}\right)^3 - \left(\frac{1}{3(\beta J)^2}\right)^2}} \quad (5.6)$$

onde temos escolhido $\sqrt[3]{-1} = -1$, $\omega = -1/2 + i\sqrt{3}/2$ e $\omega^* = -1/2 - i\sqrt{3}/2$.

O que precisamos fazer agora é discutir e aplicar algum método para decidir quais destas soluções (5.4), (5.5) e (5.6) são fisicamente aceitáveis. Escolhemos fazer uma abordagem gráfica, ou seja, para cada par das quantidades βJ e $\beta\mu$ fixadas, plotamos a função $h(q_0) := \frac{3}{2}(\beta J)^2 q_0^3 - 2(\beta\mu)q_0 + 1$, analisamos suas raízes ($h(q_0) = 0$) avaliando quais destas estão no

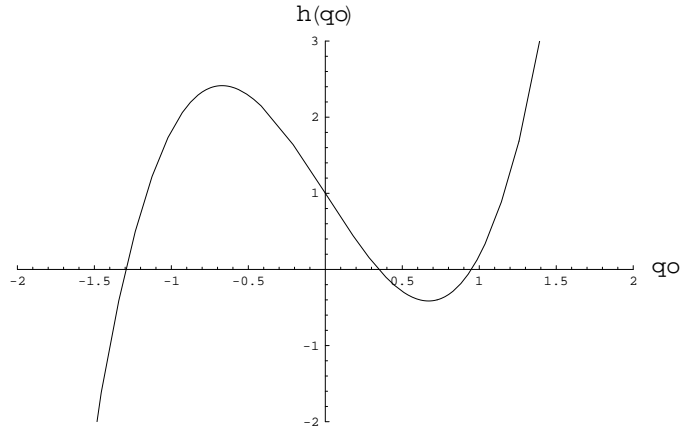


Figura 5.1: Gráfico da equação cúbica $h(q_0) := \frac{3}{2}(\beta J)^2 q_0^3 - 2(\beta \mu)q_0 + 1$, onde escolhemos $\beta J = 1.25$ e $\beta \mu = 1.58$, nos dando $q_o^1 = -1.3$, $q_o^2 = 0.35$ e $q_o^3 = 0.95$.

intervalo de valores físicos para q_o , ou seja, $q_o \in [0, 1]$. Daí, com as mesmas escolhas de βJ e $\beta \mu$ feitas anteriormente, substituímos em (5.4), (5.5) e (5.6) e vemos (geometricamente) qual raiz tem valor que concorda com o referido q_o .

As várias escolhas que fizemos para βJ e $\beta \mu$ nos levaram sempre ¹ a resultados análogos aos apresentados na figura (5.1).

Para gerar esta figura (5.1) escolhemos $\beta J = 1.25$ e $\beta \mu = 1.58$ e obtemos, por (5.4), (5.5) e (5.6), $q_o^1 = -1.3$, $q_o^2 = 0.35$ e $q_o^3 = 0.95$. Mostrando que $q_o^1 < 0$ e $q_o^2 \leq q_o^3$. Donde podemos eliminar a solução não física q_o^1 já que é sempre negativa. Resta-nos verificar se, de fato, q_o^2 e q_o^3 são soluções estáveis. Para tal, vamos utilizar a energia livre (4.12) retendo apenas termos que dependam de q_o , obtemos daí (para $q = 0$ e $p = 3$)

$$\beta F(q_o) = -\frac{(\beta J)^2}{4} q_o^3 - \frac{1}{2} \log(q_o) - \beta \mu(1 - q_o). \quad (5.7)$$

Isto nos possibilita adotar um procedimento análogo à fenomenologia de Landau [16], que consiste em expandir a anergia livre em termos de um parâmetro de ordem, refletindo a simetria do sistema físico em questão. As soluções estáveis estão associadas aos mínimos de (5.7), enquanto as instáveis aos máximos.

Logo, escolhendo os mesmos valores $\beta J = 1.25$ e $\beta \mu = 1.58$ que foram utilizados para plotar $h(q_o)$ (figura (5.1)) construímos o gráfico de $\beta F(q_o)$ e $h(q_o)$ versus q_o no mesmo “plot”. Esse resultado está apresentado na figura (5.2).

¹De fato, para altas temperaturas $\beta \ll 1$ encontramos apenas $q_o^2 \in [0, 1]$ e, para uma determinada temperatura encontramos $q_o^2 = q_o^3$.

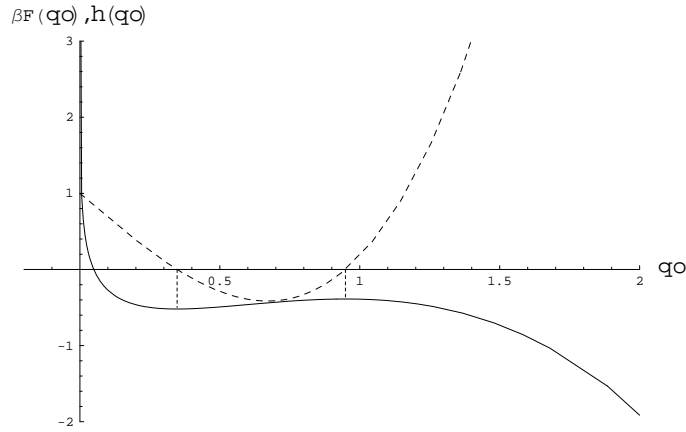


Figura 5.2: Gráfico de $h(q_0)$ e $\beta F(q_0)$ para $\beta J = 1.25$ e $\beta \mu = 1.58$. Linha tracejada corresponde ao gráfico da equação cúbica $h(q_0)$, enquanto a linha contínua corresponde a “energia livre” $\beta F(q_0)$.

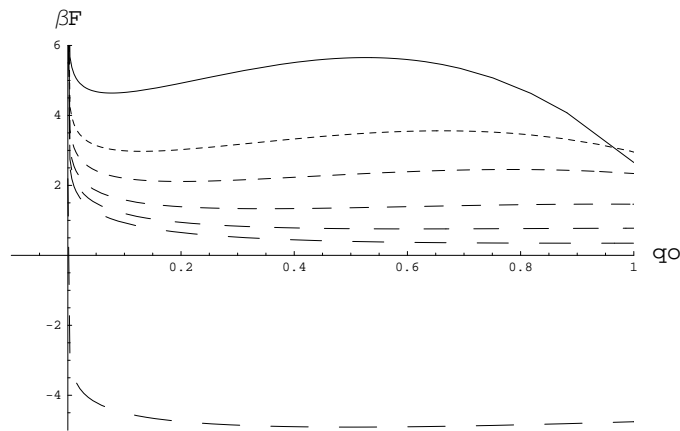


Figura 5.3: Gráfico de $\beta F(q_0)$ para alguns valores diferentes de temperatura (β). De altas para baixas temperaturas, no gráfico de baixo para cima.

Pela figura (5.2) vemos que as raízes de $h(q_0)$, a saber, q_0^2 e q_0^3 concordam exatamente com os extremos de $\beta F(q_0)$. Sendo q_0^2 associada ao mínimo da energia livre e, por outro lado, q_0^3 estando associado ao máximo da mesma. Deste modo, o campo q_0^2 representa uma fase paramagnética estável ($PM1$), enquanto que q_0^3 uma fase paramagnética instável ($PM2$), que pode dar origem a instabilidade dinâmica [33].

Para finalizarmos esta parte, vamos apresentar na figura (5.3) um gráfico de $\beta F(q_0)$ para alguns valores distintos de temperatura. De baixo para cima estamos diminuindo a temperatura.

Notemos que, para altas temperaturas (curva inferior) temos apenas um mínimo para $\beta F(q_0)$, caracterizando uma única fase paramagnética ($PM1$) associada a q_0^2 . Conforme diminuimos a temperatura, a curva vai tendendo a formar um platô (para uma certa temperatura T_c) onde temos a coexistência $q_0^2 = q_0^3$ (quarta curva de cima para baixo). Por fim, para temperaturas ainda mais baixas, os dois extremos de $\beta F(q_0)$ tomam forma apresentando

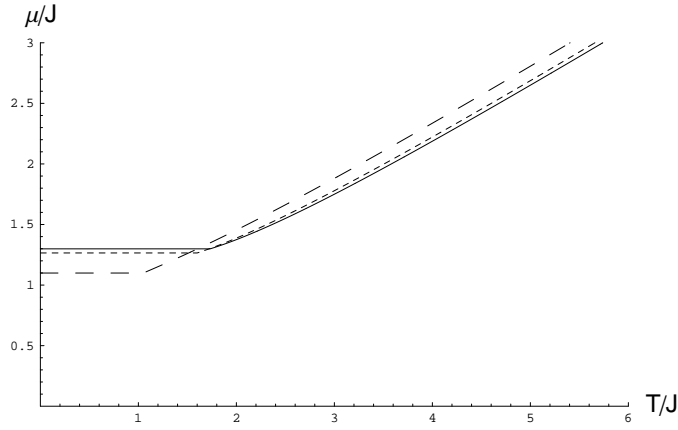


Figura 5.4: Potencial químico μ como função da temperatura para diferentes valores de IJ e $p = 3$. Linha com tracejado longo $IJ = 1/4$, linha com tracejado curto $IJ = 1$ e linha contínua $JI = \infty$.

as duas fases paramagnéticas ($PM1$) e ($PM2$) associadas a q_o^2 e q_o^3 respectivamente.

Prosseguindo nossa análise, segue de (5.5) ou (5.6) que q_o^2 e q_o^3 são reais se o discriminante Δ , presente dentro da raiz quadrada for não negativo [32], isto é,

$$\left(\frac{4\beta\mu}{9(\beta J)^2}\right)^3 \geq \left(\frac{1}{3(\beta J)^2}\right)^2 \quad (5.8)$$

De (5.8) segue que, abaixo de uma certa temperatura T_c (que chamaremos de temperatura crítica), μ “sticks” no valor constante μ_c [6–8, 20, 28] dado por

$$\frac{\mu_c}{J} = \frac{3^{4/3}}{4} \sqrt[3]{\frac{T_c}{J}}, \quad (5.9)$$

para $T \leq T_c$. Para obtermos $\mu(T)$ para $T > T_c$ substituímos $q_o^3(\beta, \mu)$ (equação (5.6)) na condição esférica (segunda equação de (5.3)), ou seja,

$$\begin{aligned} q_o^3(\beta, \mu) &= 1 + \frac{1}{2\beta\mu} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{2\mu I}} \coth \left[\beta \sqrt{\frac{\mu}{2I}} \right], & \text{se } T > T_c \\ \frac{\mu_c}{J} &= \frac{3^{4/3}}{4} \sqrt[3]{\frac{T_c}{J}}, & \text{se } T \leq T_c. \end{aligned} \quad (5.10)$$

O gráfico de $\mu(T)$ para diferentes valores do momento de inércia dos rotores quânticos JI está apresentado na figura (5.4).

Notemos que, diferentemente do que ocorre com o caso $p = 2$ (figura (3.1)), μ_c não é o mesmo para todos os valores de JI mas sim aumenta se JI aumenta.

Na temperatura crítica T_c temos $\mu = \mu_c$, caracterizado pela igualdade em (5.8). Com isto

em (5.5) e (5.6) obtemos $q_o^2 = q_o^3 = \sqrt[3]{\frac{1}{3} \left(\frac{T_c}{J}\right)^2}$, ou seja, coexistência das fases (PM1) e (PM2). A linha de coexistência que separa tais fases é obtida substituindo-se $q_o = \sqrt[3]{\frac{1}{3} \left(\frac{T_c}{J}\right)^2}$ e (5.9) na condição esférica (segunda equação de (5.3)). Deste modo, obtemos

$$\frac{1}{3} \sqrt[3]{\frac{1}{3} \left(\frac{T_c}{J}\right)^2} = 1 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2}{3^{4/3}} \left(\frac{1}{JI}\right)} \sqrt[3]{\frac{J}{T_c}} \coth \left[\left(\frac{J}{T_c}\right) \sqrt{\frac{3^{4/3}}{8} \left(\frac{1}{JI}\right)} \sqrt[3]{\frac{T_c}{J}} \right]. \quad (5.11)$$

A equação (5.11) nos fornece o diagrama da fases $T_c/J \times 1/JI$ (vide figura (3.2) para caso $p = 2$). Vamos apresentá-lo somente depois de analisarmos a solução $q \neq 0$ (seção (5.3)). Por hora, se tomamos o limite $1/JI \rightarrow 0$ de (5.11) (corte no eixo T_c/J) temos que $\coth \left[\left(\frac{J}{T_c}\right) \sqrt{\frac{3^{4/3}}{8} \left(\frac{1}{JI}\right)} \sqrt[3]{\frac{T_c}{J}} \right] \approx \left(\frac{T_c}{J}\right) \sqrt{\frac{8}{3^{4/3}} (JI)} \sqrt[3]{\frac{J}{T_c}}$. Donde, $T_c/J = \sqrt{3}$ que difere do caso $p = 2$ onde, sob o mesmo limite, $T_c/J = 1$.

5.2 Fase de vidro de spins

Na seção (5.1) estudamos a solução paramagnética do modelo. Tal fase é caracterizada pela solução $q = 0$ da primeira equação de (4.13). Por outro lado, se $q \neq 0$ passamos a caracterizar a fase vidro de spin (VS) e podemos escrever, novamente da primeira equação de ponto de sela (4.13),

$$\frac{3}{2}(\beta J)^2 q - \frac{1}{(q_o - q)^2} = 0. \quad (5.12)$$

Assim como fizemos para o caso $p = 2$, vamos obter uma relação explícita para a quantidade $y = q_o - q$. Para tal, se substituimos (5.12) na segunda equação de (4.13) junto com a propriedade $q_o^2 - q^2 = (q_o - q)(q_o + q)$ chegamos na equação polinomial cúbica

$$\frac{3}{2}(\beta J)^2 (q_o - q)^3 - 2\beta\mu(q_o - q) + 3 = 0. \quad (5.13)$$

A equação cúbica (5.13) pode ser resolvida analiticamente via fórmula de Cardano [32], donde obtemos as três raízes (na variável $y = q_o - q$)

$$y_1 = -\sqrt[3]{\frac{1}{(\beta J)^2} - i\sqrt{\left(\frac{4\beta\mu}{9(\beta J)^2}\right)^3 - \frac{1}{(\beta J)^4}}} - \sqrt[3]{\frac{1}{(\beta J)^2} + i\sqrt{\left(\frac{4\beta\mu}{9(\beta J)^2}\right)^3 - \frac{1}{(\beta J)^4}}}; \quad (5.14)$$

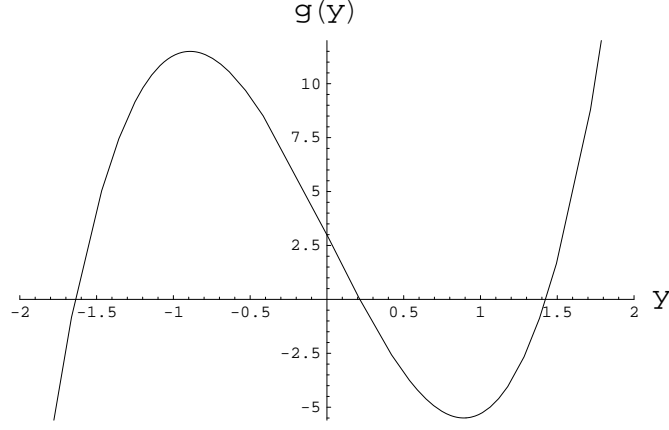


Figura 5.5: Gráfico da cúbica $g(y) := \frac{3}{2}(\beta J)^2 y^3 - 2\beta\mu y + 3$, onde escolhemos $\beta J = 2$ e $\beta\mu = 7.15$ nos dando $y_1 = -1.64$, $y_2 = 0.21$ e $y_3 = 1.42$.

$$y_2 = -\omega \sqrt[3]{\frac{1}{(\beta J)^2} - i\sqrt{\left(\frac{4\beta\mu}{9(\beta J)^2}\right)^3 - \frac{1}{(\beta J)^4}}} - \omega^* \sqrt[3]{\frac{1}{(\beta J)^2} + i\sqrt{\left(\frac{4\beta\mu}{9(\beta J)^2}\right)^3 - \frac{1}{(\beta J)^4}}}; \quad (5.15)$$

$$y_3 = -\omega^* \sqrt[3]{\frac{1}{(\beta J)^2} - i\sqrt{\left(\frac{4\beta\mu}{9(\beta J)^2}\right)^3 - \frac{1}{(\beta J)^4}}} - \omega \sqrt[3]{\frac{1}{(\beta J)^2} + i\sqrt{\left(\frac{4\beta\mu}{9(\beta J)^2}\right)^3 - \frac{1}{(\beta J)^4}}}, \quad (5.16)$$

onde temos escolhido $\sqrt[3]{-1} = -1$, $\omega = -1/2 + i\sqrt{3}/2$ e $\omega^* = -1/2 - i\sqrt{3}/2$.

Notemos que, como $0 \leq q_o \leq 1$, $0 \leq q \leq 1$ e $q \leq q_o$ segue que $0 \leq y = q_o - q \leq 1$. Assim, adotamos as mesmas técnicas empregadas no caso $q = 0$ estudado na seção (5.1), ou seja, definimos a função $g(y) := \frac{3}{2}(\beta J)^2 y^3 - 2\beta\mu y + 3$ e analisamos suas raízes graficamente (para cada βJ e $\beta\mu$ fixos), confrontando estes valores encontrados com os obtidos pelas expressões (5.14), (5.15) e (5.16) para os mesmo valores de βJ e $\beta\mu$. Os valores fisicamente aceitáveis (a princípio) são aqueles em que $y \in [0, 1]$.

Novamente, as várias escolhas de βJ e $\beta\mu$ conduziram, essencialmente, a resultados análogos aos apresentados na figura (5.5).

A figura (5.5) foi gerada com a escolha $\beta J = 2$ e $\beta\mu = 7.15$, onde obtivemos $y_1 = -1.64$, $y_2 = 0.21$ e $y_3 = 1.42$. Isto nos indica que apenas y_2 está no intervalo fisicamente aceitável para y , já que $y_1 < 0$ e $y_3 > 1$, sendo esta a solução que tomaremos como sendo a correta.

Um estudo da estabilidade das soluções (VS) ($q \neq 0$) e (PM) ($q = 0$) está apresentado na seção (5.4), onde explicitamos o autovalor crítico de de Almeida e Thouless [13].

A raiz y_2 (equação (5.15)) nos ajuda a obter a temperatura crítica de vidro de spins T_{vs} . Com efeito, y_2 é real se o discriminante Δ , presente na raiz quadrada de y_2 for não negativo [32],

ou seja,

$$\left(\frac{4\beta\mu}{9(\beta J)^2}\right)^3 \geq \frac{1}{(\beta J)^4} \quad (5.17)$$

Assim, a condição crítica dá-se através da igualdade em (5.17) obtendo, deste modo,

$$\frac{\mu_{vs}}{J} = \frac{9}{4} \sqrt[3]{\frac{T_{vc}}{J}}, \quad (5.18)$$

onde μ_{vs} é o potencial químico na temperatura crítica de vidro de spins T_{vs} . Entretanto, como o potencial químico μ é uma quantidade física do sistema não pode “condensar” em dois valores distintos. Logo, $\mu_{vs} = \mu_c$, onde μ_c é o potencial químico na temperatura crítica T_c dado por (5.9). Assim, igualando-se (5.18) e (5.9) concluímos que $T_{vs} = T_c/9$, ou seja, a linha crítica que separa a fase vidro de spin da paramagnética é 1/9 daquela que separa as fases (PM1) e (PM2) (equação (5.11)). O diagrama de fases completo será apresentado na subseção (5.3).

Para expressarmos o parâmetro de ordem de vidro de spins q , fazemos uso novamente da condição esférica (segunda equação de (5.3)) e escrevemos $q_o = (q_o - q) + q = y_2 + q$, juntamente com (5.18). Assim, procedendo como no caso $p = 2$, podemos escrever

$$q(T) = 1 + \frac{2T}{9} \sqrt[3]{\frac{J}{T_{vs}}} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2}{9I} \sqrt[3]{\frac{J}{T_{vs}}}} \coth \left[\frac{1}{T} \sqrt{\frac{9}{8I} \sqrt[3]{\frac{T_{vs}}{J}}} \right] - y_2(T), \quad (5.19)$$

para $T \leq T_{vs}$ e $q = 0$ para $T > T_{vs}$. Onde, $y_2(T)$ é obtido por (5.15) com a substituição $\mu = \mu_{vs}$ (equação (5.18)), mais explicitamente,

$$y_2(T) = -\omega \sqrt[3]{\left(\frac{T}{J}\right)^2 - i \sqrt{\left(\frac{T}{J}\right)^3 \sqrt{\frac{T_{vs}}{J} - \frac{T}{J}}} - \omega^* \sqrt[3]{\left(\frac{T}{J}\right)^2 + i \sqrt{\left(\frac{T}{J}\right)^3 \sqrt{\frac{T_{vs}}{J} - \frac{T}{J}}}, \quad (5.20)$$

e $T_{vs} = T_c/9$ com T_c dado por (5.11) para cada I .

A solução numérica de (5.19) está apresentada na figura (5.6), onde podemos ver que quanto maior a influência quântica (menor J/I) menor o overlap entre réplicas [18,28] além da localização da temperatura T_{vs} para os referidos valores de J/I .

Alguns casos limites de (5.19) podem ser analisados, a saber, limite clássico $I \rightarrow \infty$ e de baixas temperaturas $T \rightarrow 0$. No primeiro limite $I \rightarrow \infty$ temos em (5.19) $\coth \left[\frac{1}{T} \sqrt{\frac{9}{8I} \sqrt[3]{\frac{T_{vs}}{J}}} \right] \approx$

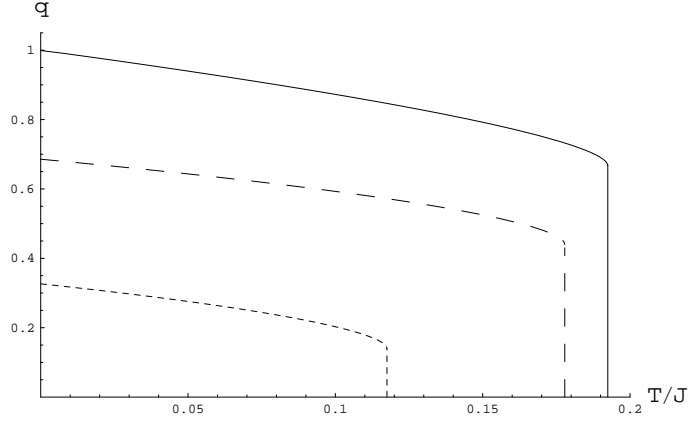


Figura 5.6: Parâmetro de ordem de vidro de spins q como uma função da temperatura para diferentes valores de JI . Linha contínua $JI = \infty$, linha tracejado longo $JI = 1$ e linha tracejado curto $JI = 1/4$.

$T \sqrt{\frac{8I}{9}} \sqrt[3]{\frac{J}{T_{vs}}}$ e $T_{vs}/J = \sqrt{3}/9$. Assim,

$$q(T)_{I \rightarrow \infty} = 1 + \omega \sqrt[3]{\left(\frac{T}{J}\right)^2 - i \sqrt{\left(\frac{T}{J}\right)^3 \sqrt{\frac{\sqrt{3}}{9} - \frac{T}{J}}} + \omega^* \sqrt[3]{\left(\frac{T}{J}\right)^2 + i \sqrt{\left(\frac{T}{J}\right)^3 \sqrt{\frac{\sqrt{3}}{9} - \frac{T}{J}}}. \quad (5.21)$$

E, por fim, no limite de baixas temperaturas $T \rightarrow 0$ temos em (5.19) $\coth \left[\frac{1}{T} \sqrt{\frac{9}{8I}} \sqrt[3]{\frac{J}{T_{vs}}} \right] \approx 1$ e $y_2 \approx 0$. Logo,

$$q(T \rightarrow 0) = 1 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2}{9I}} \sqrt[3]{\frac{J}{T_{vs}}}, \quad (5.22)$$

onde devemos notar a influência explícita do momento de inércia dos rotores quânticos I e implícita via $T_{vs} = T_c/9$, já que T_c é determinada por (5.11) para cada I fixo.

5.3 Diagrama de fases

Nesta subseção vamos analisar o diagrama de fases para o modelo esférico quântico de vidro de spins com $p = 3$. Temos desenvolvido na seção (4) a teoria de réplicas bem como a hipótese de aproximação estática e simetria entre réplicas. Neste contexto, os campos q_o e q são introduzidos na parametrização da matriz dos “overlap’s” \mathbf{q} . Tais campos são fisicamente interessantes já que caracterizam as fases de nosso modelo em estudo, a saber, paramagnética e vidro de spins.

A fase paramagnética é caracterizada, no âmbito de um sistema vidro de spin, pelo parâmetro de ordem $q = 0$. Neste caso, temos dois valores distintos de $q_o \neq 0$, ou seja,

q_o^2 e q_o^3 dados respectivamente por (5.5) e (5.6). O primeiro, q_o^2 está associado a uma fase paramagnética ($PM1$) para altas temperaturas ($T > T_c$) conforme vê-se no diagrama de fases (5.7). Esta fase paramagnética é estável, no sentido que está associada a mínimos da energia livre (figura (5.2)). O segundo, q_o^3 está associada a uma fase paramagnética ($PM2$) que existe abaixo da linha de coexistência, (onde $q_o^2 = q_o^3$, linha pontilhada na figura (5.7)) determinada pela equação (5.11) que nos fornece T_c como uma função de $1/JI$ e acima da linha contínua (determinada por $q = 0$).

Observamos que existe transição de primeira ordem entre as fases ($PM2$) e VS , entretanto a linha contínua não é a de transição e sim a linha de estabilidade da solução $q = 0$. A linha de transição de primeira ordem deve estar na região de coexistência, ou seja, entre a linha contínua e pontilhada.

Esta fase paramagnética é instável, no sentido que está associada a máximos da energia livre (figura (5.2)). Na seção (5.4) vamos estudar a estabilidade destas soluções (além da solução $q = 0$) no sentido de de Almeida e Theules [13]. Pela figura (5.7) vemos que a temperatura crítica no limite clássico $T_c(1/JI = 0) = \sqrt{3}J$, que concorda com o valor deduzido analiticamente na subseção (5.1). Além disso, para $1/JI \approx 5.0$ temos um comportamento reentrante.

A fase vidro de spins (VS) é caracterizada pelo parâmetro de ordem $q \neq 0$. Neste caso, conseguimos obter uma equação cúbica na variável $y = q_o - q$ (equação (5.13)) cuja solução fisicamente aceitável é y_2 (equação (5.15)). Esta solução y_2 nos permite escrever, explicitamente, o parâmetro de ordem de vidro de spins $q(T)$ para $T < T_{vs}$ (equação (5.19)) cuja representação gráfica é apresentada na figura (5.6). Tal parâmetro de ordem define a fase (ordenada) vidro de spins (VS) que existe abaixo da linha crítica (contínua) da figura (5.7).

Notemos a concordância de T_{vs} estimados (para os respectivos valores de JI) na figura (5.6), com os que aparecem na figura (5.7), por exemplo, para $JI = \infty$ temos $T_{vs} = 0.192$ que está de acordo com ambos gráficos. Por fim, devemos observar o comportamento reentrante desta fase. Tal comportamento desaparece quando tratamos a fase (VS) utilizando o primeiro estágio de quebra de simetria de réplicas ($1RSB$) de G. Parisi [14], pois a fase (VS) é instável (no sentido de de Almeida e Thouless [13]) conforme veremos abaixo (seção (5.4)). Além disso, a ($1RSB$) é suficiente [4, 33] para descrever corretamente esta fase.

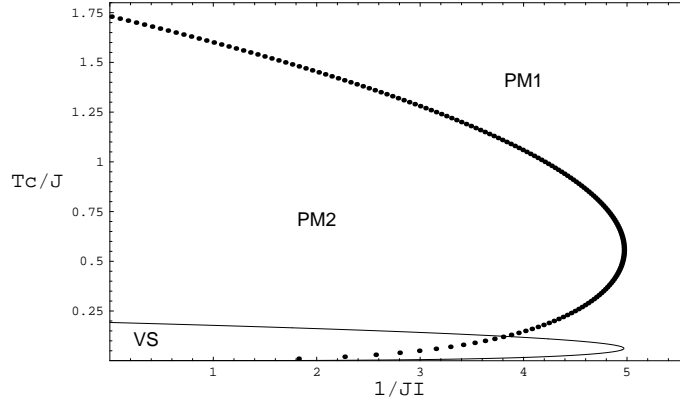


Figura 5.7: Diagrama de fases para o modelo no caso $p = 3$ e sob hipótese de simetria de réplicas (RS) e aproximação estática (AS). Linha pontilhada separa as fases (PM1) e (PM2). Linha contínua separa a fase vidro de spins (VS) das paramagnéticas.

5.4 Estabilidade das soluções com simetria de réplicas

Nesta seção, vamos seguir uma abordagem alternativa para inferir a respeito da estabilidade das soluções réplicas simétricas (RS), diferente daquela apresentada na seção (3.3.2), onde seguimos a exposição de de Almeida e Thouless [13]. De fato, escolhemos seguir o método apresentado por A. Crisanti e H. Sommers [4] (artigo que estamos alicerçando este capítulo), cujas discussões seguem abaixo.

No desenvolvimento da solução do problema, após realizarmos as integrais de caminho, bem como a utilização das transformadas de Fourier chegamos no funcional $G[\mathbf{q}(\omega_m)]$ (3.38)

$$\begin{aligned}
G[\mathbf{q}(\omega_m)] &= -\frac{J^2\beta}{4} \sum_{\alpha,\nu} \int_0^\beta d\tau \left[\sum_m e^{-i\omega_m\tau} q_{\alpha,\nu}(\omega_m) \right]^p - \frac{1}{2} \sum_m \log[\det(\mathbf{q}(\omega_m))] \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha,m} [I\omega_m^2\beta + 2\beta\mu] q_{\alpha,\alpha}(\omega_m).
\end{aligned} \tag{5.23}$$

Sob a hipótese de aproximação estática, segue que $q_{\alpha,\nu}(\omega_m) \rightarrow q_{\alpha,\nu}$ (ou seja, $\omega_m = 0$), assim, (5.23) se torna um funcional independente das frequências, assumindo a forma

$$G[\mathbf{q}] = -\frac{(\beta J)^2}{4} \sum_{\alpha,\nu} q_{\alpha,\nu}^p - \frac{1}{2} \log[\det(\mathbf{q})] + \frac{2\beta\mu}{2} \sum_{\alpha} q_{\alpha,\alpha}. \tag{5.24}$$

Para a análise da estabilidade é necessário calcular a segunda variação de $G[\mathbf{q}]$ (5.24) com respeito a solução réplica simétrica (RS). Sejam q_o e q os elementos da diagonal e fora da diagonal, respectivamente, da matriz dos “overlap’s” \mathbf{q} vistos à luz da hipótese de simetria

entre réplicas. Então, reparametrizando \mathbf{q} como segue

$$\begin{cases} q_{\alpha,\nu} = q + \epsilon^{\alpha,\nu}; \\ q_{\alpha,\alpha} = q_o + \epsilon^{\alpha,\alpha}, \end{cases} \quad (5.25)$$

onde ϵ é uma matriz de infinitésimos. Logo, o funcional (5.24) fica

$$G[\mathbf{q}] = -\frac{(\beta J)^2}{4} \sum_{\alpha,\nu} (q + \epsilon^{\alpha,\nu})^p - \frac{1}{2} \log [\det (\mathbf{q} + \epsilon)] + \frac{2\beta\mu}{2} \sum_{\alpha} (q_o + \epsilon^{\alpha,\alpha}). \quad (5.26)$$

Para obtermos a segunda variação de $G[\mathbf{q}]$, temos que expandir (5.26) em série de potências nos infinitésimos $\epsilon^{\alpha,\nu}$, retendo apenas termos de segunda ordem. Com efeito, a terceira parcela de (5.26) é linear em $\epsilon^{\alpha,\alpha}$, portanto, pode ser desprezada. A primeira parcela é expandida utilizando uma série binomial, o que nos resulta $-\frac{p(p-1)}{8}(\beta J)^2 q^{p-2} \sum_{\alpha,\nu} (\epsilon^{\alpha,\nu})^2$. A segunda parcela é a mais delicada. Primeiramente, temos que utilizar a propriedade: dada uma matriz \mathbf{A} segue que $\log(\det(\mathbf{A})) = \text{Tr}(\log(\mathbf{A}))$, onde $\text{Tr}(\mathbf{A})$ denota o traço da matriz \mathbf{A} [25]. Além disso, é conveniente escrever $\mathbf{q} + \epsilon = \mathbf{q}(\mathbf{I} + \mathbf{q}^{-1}\epsilon)$, assim, podemos utilizar a série de potências da função log, nos resultando em $\frac{1}{4}\text{Tr}[(\mathbf{q}^{-1}\epsilon)^2]$. Esta última expressão deve ser trabalhada com cuidado a fim de que possamos explicitá-la em termos dos elementos de \mathbf{q} e ϵ . Tal sequência de cálculos estão apresentadas no apêndice (D). Logo, a segunda variação de $G[\mathbf{q}]$, com respeito a solução réplica simétrica, assume a forma

$$\begin{aligned} 4\delta^2 G[\mathbf{q}] &= \left[(q_d^{-1} - q_f^{-1})^2 - \frac{p(p-1)(\beta J)^2 q^{p-2}}{2} \right] \sum_{\alpha,\nu} (\epsilon^{\alpha,\nu})^2 + [2q_f^{-1}(q_d^{-1} - q_f^{-1})] \sum_{\alpha,\gamma,\delta} \epsilon^{\alpha,\gamma} \epsilon^{\gamma,\delta} \\ &+ (q_f^{-1})^2 \left(\sum_{\alpha,\nu} \epsilon^{\alpha,\nu} \right)^2, \end{aligned} \quad (5.27)$$

onde q_d^{-1} e q_f^{-1} denotam, respectivamente, os elementos da diagonal e fora da diagonal da matriz inversa \mathbf{q}^{-1} (equações (3.45) e (3.46)).

Os autovalores da forma quadrática (5.27) (que devem ser positivos para soluções estáveis) são obtidos via solução da equação de autovalores

$$\frac{\delta}{\delta \epsilon^{\alpha,\nu}} \delta^2 G = \Lambda \epsilon^{\alpha,\nu}, \quad (5.28)$$

onde Λ é um autovalor a ser determinado.

Isto nos condúz a

$$\begin{aligned} \left[(q_d^{-1} - q_f^{-1})^2 - \frac{p(p-1)(\beta J)^2 q^{p-2}}{2} \right] \epsilon^{\alpha, \nu} &+ q_f^{-1} (q_d^{-1} - q_f^{-1}) \sum_{\gamma} (\epsilon^{\alpha, \gamma} + \epsilon^{\gamma, \nu}) \\ &+ (q_f^{-1})^2 \sum_{\gamma, \delta} \epsilon^{\gamma, \delta} = \Lambda \epsilon^{\alpha, \nu}. \end{aligned} \quad (5.29)$$

Para um n (índice de réplica) finito, existem três diferentes autovalores, dependendo da classe de simetria entre índices de réplicas.

Autovalor-1: (Autovalor crítico de de Almeida e Thouless [13])

Tal autovalor é obtido escolhendo autovetores com

$$\sum_{\nu} \epsilon^{\alpha, \nu} = 0, \quad \forall \alpha. \quad (5.30)$$

Donde segue por (5.29) e utilizando (3.45) e (3.46),

$$\Lambda_1 := \Lambda_{AT} = \frac{1}{(q_o - q)^2} - \frac{p}{2} (p-1) (\beta J)^2 q^{p-2}, \quad (5.31)$$

com degenerescência $n_1 = n(n-3)/2$.

Os demais autovalores são:

Autovalor-2: Que se obtêm pela escolha de autovetores

$$\sum_{\alpha, \nu} \epsilon^{\alpha, \nu} = 0, \quad \text{mas} \quad \sum_{\nu} \epsilon^{\alpha, \nu} \neq 0. \quad (5.32)$$

Chegando em

$$\Lambda_2 = \Lambda_1 - (n-2) q_f^{-1} (q_d^{-1} - q_f^{-1}), \quad (5.33)$$

com degenerescência $n_2 = n-1$.

Por fim, o último autovalor é obtido escolhendo-se autovetores que satisfazem

$$\sum_{\alpha, \nu} \epsilon^{\alpha, \nu} \neq 0, \quad (5.34)$$

resultando em

$$\Lambda_3 = \Lambda_2 - n q_f^{-1} (q_d^{-1} - q_f^{-1}) - n(n-1)(q_f^{-1})^2, \quad (5.35)$$

com degenerescência $n_3 = 1$. Note que, no limite $n \rightarrow 0$, $\Lambda_2 = \Lambda_3$ assim como em [13].

Finalizando esta seção, notemos que na primeira equação de ponto de sela (4.13) $q = 0$ (fase paramagnética) sempre é uma solução possível do sistema. Com este resultado no autovalor crítico Λ_{AT} (5.31) concluímos que

$$\Lambda_{AT} = \frac{1}{q_o^2} \geq 0, \quad (5.36)$$

mostrando, assim, que a solução $q = 0$ é sempre estável para qualquer temperatura.

Por outro lado, se $q \neq 0$ na primeira equação de ponto de sela (4.13), então podemos “eliminar” tal solução. Isto nos permite escrever

$$\frac{(\beta J)^2}{2} p q^{p-2} - \frac{1}{(q_o - q)^2} = 0. \quad (5.37)$$

Com (5.37) no autovalor crítico Λ_{AT} (5.31) podemos escrever

$$\Lambda_{AT} = \frac{(\beta J)^2}{2} p q^{p-2} (2 - p), \quad (5.38)$$

o que nos permite concluir, para o caso especial $p = 2$, que $\Lambda_{AT} = 0$ (conforme seção (3.3.2)) e, além disso, para qualquer outro $p \geq 3$ sempre vale que $\Lambda_{AT} < 0$.

Estes resultados nos indicam a presença de uma solução instável, mostrando assim que a hipótese de simetria entre réplicas não é suficiente para a correta descrição física do modelo na fase de vidro de spins (VS). Logo, a simetria entre as réplicas deve ser quebrada (conforme seção (3.3.3)).

5.5 Quebra de simetria de réplicas

Vimos que o autovalor críticos de de Almeida e Thouless [13] para este modelo em estudo, obtido sob a hipótese de aproximação estática, é positivo na fase paramagnética (5.36) (estável) e é negativo na fase vidro de spin (5.38) ($q \neq 0$) (instável), para $p \geq 3$. Isto já era esperado pois, conforme previsto em [4, 33], o modelo esférico de vidro de spins a p-spins tem a fase

vidro de spin descrita (de modo suficiente) pelo primeira estágio de quebra de simetria de réplicas (*1RSB*).

Vamos seguir as técnicas empregadas na seção (3.3.3), ou seja, seguiremos a teoria de G. Parisi [14] para a quebra de simetria entre as réplicas. Para tal iniciamos com o funcional (3.24),

$$\begin{aligned}
G[\mathbf{q}(\tau, \tau'), \boldsymbol{\lambda}(\tau, \tau')] &= -\frac{J^2}{4}\beta \sum_{\alpha, \nu} \int_0^\beta d\tau q_{\alpha, \nu}(\tau)^p + \frac{1}{2\beta} \sum_{\alpha, \nu} \int_0^\beta d\tau \lambda_{\alpha, \nu}(\tau) q_{\alpha, \nu}(\tau) \\
&- \log \left[\oint \mathcal{D}[S^\alpha(\tau)] e^{-\int_0^\beta d\tau \sum_\alpha \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dS^\alpha(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \mu S^\alpha(\tau)^2 \right]} \right] \\
&\times e^{\frac{1}{2\beta^2} \sum_{\alpha, \nu} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' \lambda_{\alpha, \nu}(\tau - \tau') S^\alpha(\tau) S^\nu(\tau')}, \tag{5.39}
\end{aligned}$$

e vamos também nos concentrar no desenvolvimento apresentado na seção (4). Deste modo, seguindo a exposição de [5], vamos supor que os campos $q_{\alpha, \nu}(\tau - \tau')$ e $\lambda_{\alpha, \nu}(\tau - \tau')$ sejam independentes de τ (aproximação estática) e *1RSB* (em cada um dos campos).

No que consiste, dividimos as matrizes dos campos \mathbf{q} e $\boldsymbol{\lambda}$ de ordem $n \times n$ em n/m_1 blocos de dimensão $m_1 \times m_1$ daí, introduzindo a matriz $\boldsymbol{\varepsilon}$ definida por:

$$\varepsilon_{\alpha, \nu} = \begin{cases} 1; \text{ se } \alpha \text{ e } \nu \in \text{Bloco Diagonal} \\ 0; \text{ c.c.}, \end{cases} \tag{5.40}$$

podemos convenientemente escrever as seguintes parametrizações para \mathbf{q} e $\boldsymbol{\lambda}$.

$$q_{\alpha, \nu} = (q_0 - q_1)\delta_{\alpha, \nu} + (q_1 - q_2)\varepsilon_{\alpha, \nu} + q_2, \tag{5.41}$$

$$\lambda_{\alpha, \nu} = (\lambda_0 - \lambda_1)\delta_{\alpha, \nu} + (\lambda_1 - \lambda_2)\varepsilon_{\alpha, \nu} + \lambda_2, \tag{5.42}$$

onde $\delta_{\alpha, \nu}$ é o delta de Kronecker e uma esboço destas matrizes para $m_1 = 3$ se encontra em (3.95) (para $\boldsymbol{\lambda}$ é análogo).

É possível diagonalizar \mathbf{q} e $\boldsymbol{\lambda}$ e mostrar que seus autovalores são:

$$\begin{cases} \eta_0 = q_0 - q_1; & \text{com } deg. = \frac{n}{m_1}(m_1 - 1) \\ \eta_1 = q_0 - (1 - m_1)q_1 - m_1q_2; & \text{com } deg. = \frac{n}{m_1} - 1 \\ \eta_2 = q_0 - (1 - m_1)q_1 - (m_1 - n)q_2; & \text{com } deg. = 1, \end{cases} \tag{5.43}$$

e

$$\begin{cases} \phi_o = \lambda_o - \lambda_1; & \text{com } deg. = \frac{n}{m_1}(m_1 - 1) \\ \phi_1 = \lambda_o - (1 - m_1)\lambda_1 - m_1\lambda_2; & \text{com } deg. = \frac{n}{m_1} - 1 \\ \phi_2 = \lambda_o - (1 - m_1)\lambda_1 - (m_1 - n)\lambda_2; & \text{com } deg. = 1, \end{cases} \quad (5.44)$$

onde $deg.$ denota a degenerescência de cada autovalor.

Note que a forma (RS) da matriz dos “overlap’s” \mathbf{q} e $\boldsymbol{\lambda}$ (4.1) está “contida” na forma 1RSB, bastando tomar os limites $m_1 \rightarrow 1$, $q_1, q_2 \rightarrow q$ e $\lambda_1, \lambda_2 \rightarrow \lambda$.

Agora, com (5.41) e (5.42) segue que as duas primeira parcelas de (5.39) ficam:

$$-\frac{J^2}{4}\beta \sum_{\alpha,\nu} \int_0^\beta d\tau q_{\alpha,\nu}(\tau)^p = -\frac{(\beta J)^2}{4} [nq_o^p + n(m_1 - 1)q_1^p + n(n - m_1)q_2^p], \quad (5.45)$$

$$\frac{1}{2\beta} \sum_{\alpha,\nu} \int_0^\beta d\tau \lambda_{\alpha,\nu}(\tau) q_{\alpha,\nu}(\tau) = \frac{1}{2} [n\lambda_o q_o + n(m_1 - 1)\lambda_1 q_1 + n(n - m_1)\lambda_2 q_2] \quad (5.46)$$

Seguindo, o termo mais trabalhoso é o que está dentro do log em (5.39). De fato, o único que se torna diferente do caso em que supomos hipótese (RS) (apêndice (C)) é o último. Após realizarmos as transformadas de Fourier nas variáveis de spins e “abrirmos” a soma $\sum_{\alpha,\nu}$ para evidenciar todas diferentes componentes da matriz $\boldsymbol{\lambda}$ no último termo dentro do log em (5.39) e^A , segue que podemos escrever

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2\beta^2} \sum_{\alpha,\nu} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' \lambda_{\alpha,\nu}(\tau - \tau') S^\alpha(\tau) S^\nu(\tau') = \frac{\lambda_o - \lambda_1}{2} \sum_{\alpha} S^\alpha(0)^2 \\ &+ \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{2} \sum_{l=1}^{n/m_1} \left[\sum_{\alpha=(l-1)m_1+1}^{lm_1} S^\alpha(0) \right]^2 + \frac{\lambda_2}{2} \left[\sum_{l=1}^{n/m_1} \sum_{\alpha=(l-1)m_1+1}^{lm_1} S^\alpha(0) \right]^2, \end{aligned} \quad (5.47)$$

onde $\sum_{l=1}^{n/m_1} \sum_{\alpha=(l-1)m_1+1}^{lm_1}$ significa soma nos blocos diagonais de $\boldsymbol{\lambda}$ com $\alpha \neq \nu$.

Logo, linearizando os termos $\frac{\lambda_1 - \lambda_2}{2} \left[\sum_{\alpha=(l-1)m_1+1}^{lm_1} S^\alpha(0) \right]^2$ e $\frac{\lambda_2}{2} \left[\sum_{l=1}^{n/m_1} \sum_{\alpha=(l-1)m_1+1}^{lm_1} S^\alpha(0) \right]^2$ com os campos auxiliares y_l e z , respectivamente (via transformação de Hubbard-Stratonovich (C.12)), separando a frequência de modo zero $\omega_m = 0$ e juntando (5.45) e (5.46) segue que a

expressão (5.39) torna-se mais simples

$$\begin{aligned}
G[\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda}] &= -\frac{(\beta J)^2}{4} [nq_o^p + n(m_1 - 1)q_1^p + n(n - m_1)q_2^p] + n\frac{\lambda_o q_o}{2} + n(m_1 - 1)\frac{\lambda_1 q_1}{2} \\
&+ n(n - m_1)\frac{\lambda_2 q_2}{2} - \log \left[\int \left[\prod_{\alpha} dS^{\alpha}(0) \right] e^{(-\mu\beta + \frac{(\lambda_o - \lambda)}{2}) \sum_{\alpha} S^{\alpha}(0)^2} \right. \\
&\times \prod_{l=1}^{n/m_1} \int Dy_l e^{\sqrt{\lambda_1 - \lambda_2} y_l \sum_{\alpha=(l-1)m_1+1}^{lm_1} S^{\alpha}(0)} \int Dz e^{\sqrt{\lambda_2} z \sum_{l=1}^{n/m_1} \sum_{\alpha=(l-1)m_1+1}^{lm_1} S^{\alpha}(0)} \\
&\times \left. \int \left[\prod_{\alpha, m>0} dS^{\alpha}(\omega_m) dS^{*\alpha}(\omega_m) \right] e^{-\sum_{\alpha, m>0} [I\omega_m^2 \beta + 2\beta\mu] |S^{\alpha}(\omega_m)|^2} \right] \quad (5.48)
\end{aligned}$$

onde $Dx = \frac{dx e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}}$.

O termo dentro do log em (5.48) (o qual chamaremos de I_1) apresenta uma série de integrais gaussianas, que podem ser resolvidas analiticamente (análoga as do apêndice (C)) nos resultando em:

$$\begin{aligned}
I_1 &= \left(\frac{2\pi}{2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda_1)} \right)^{\frac{n}{2m_1}(m_1-1)} \left(\frac{1}{2\beta\mu - (\lambda_o + (m_1 - 1)\lambda_1 - m_1\lambda_2)} \right)^{\frac{n}{2m_1}} \\
&\times \sqrt{\frac{2\beta\mu - (\lambda_o + (m_1 - 1)\lambda_1 - m_1\lambda_2)}{2\beta\mu - (\lambda_o + (m_1 - 1)\lambda_1 - (m_1 - n)\lambda_2)}} \prod_{m>0} \left(\frac{\pi}{I\omega_m^2 \beta + 2\beta\mu} \right)^n. \quad (5.49)
\end{aligned}$$

Logo, voltando com (5.49) em (5.48) podemos escrever o grande potencial termodinâmico $\beta\Omega_{1RSB}/N = \lim_{n \rightarrow 0} G[\mathbf{q}, \boldsymbol{\lambda}]/n$ (condensando todas constante em uma única c) como:

$$\begin{aligned}
\frac{\beta\Omega_{1RSB}}{N} &= -\frac{(\beta J)^2}{4} [q_o^p + (m_1 - 1)q_1^p - m_1 q_2^p] + \frac{\lambda_o q_o}{2} + (m_1 - 1)\frac{\lambda_1 q_1}{2} - m_1 \frac{\lambda_2 q_2}{2} \\
&+ \frac{(m_1 - 1)}{2m_1} \log(2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda_1)) - \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_2}{2\beta\mu - (\lambda_o + (m_1 - 1)\lambda_1 - m_1\lambda_2)} \right) \\
&+ \frac{1}{2m_1} \log(2\beta\mu - (\lambda_o + (m_1 - 1)\lambda_1 - m_1\lambda_2)) + \sum_{m>0} \log(I\omega_m^2 \beta + 2\beta\mu) \\
&- c. \quad (5.50)
\end{aligned}$$

Vamos utilizar o método do ponto de sela sobre o grande potencial termodinâmico (5.50), cujas equações de ponto de sela são obtidas pelas condições de extremo $\partial\beta\Omega_{1RSB}/\partial q_i =$

$\partial\beta\Omega_{1RSB}/\partial\lambda_i = 0$, onde $i \in \{o, 1, 2\}$, resultando em

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_o = \frac{(\beta J)^2}{2} p q_o^{p-1}; \\ \lambda_1 = \frac{(\beta J)^2}{2} p q_1^{p-1}; \\ \lambda_2 = \frac{(\beta J)^2}{2} p q_2^{p-1}; \\ 0 = q_o - \frac{m_1-1}{m_1(2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda_1))} - \frac{\lambda_2}{(2\beta\mu - (\lambda_o + (m_1-1)\lambda_1 - m_1\lambda_2))^2} - \frac{1}{m_1(2\beta\mu - (\lambda_o + (m_1-1)\lambda_1 - m_1\lambda_2))}; \\ 0 = (m_1 - 1)q_1 + \frac{m_1-1}{m_1(2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda_1))} - \frac{(m_1-1)\lambda_2}{(2\beta\mu - (\lambda_o + (m_1-1)\lambda_1 - m_1\lambda_2))^2} - \frac{m_1-1}{m_1(2\beta\mu - (\lambda_o + (m_1-1)\lambda_1 - m_1\lambda_2))}; \\ 0 = -m_1q_2 + \frac{m_1\lambda_2}{(2\beta\mu - (\lambda_o + (m_1-1)\lambda_1 - m_1\lambda_2))^2}, \end{array} \right. \quad (5.51)$$

onde como podemos ver, se $m_1 = 1$ reobtemos o sistema de equações (4.5) via (RS).

As relações (5.52) e (5.53), importantes para que possamos escrever Ω_{1RSB} (5.50) como uma função unicamente dos “overlap’s” q_o , q_1 e q_2 (ou seja, eliminar os campos λ ’s), são obtidas pela manipulação do sistema (5.51),

$$q_o - q_1 = \frac{1}{(2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda_1))}; \quad (5.52)$$

$$q_o + (m_1 - 1)q_1 - m_1q_2 = \frac{1}{(2\beta\mu - (\lambda_o + (m_1 - 1)\lambda_1 - m_1\lambda_2))}. \quad (5.53)$$

Por fim, levando-se em conta que a energia livre se relaciona com o grande potencial termodinâmico via $\beta\mathcal{F}_{1RSB} = \beta\Omega_{1RSB} - \beta N\mu$, utilizando-se (5.51), (5.52) e (5.53) em (5.50) para eliminarmos os λ ’s, com a expressão (4.3) para o somatório sobre as frequências e adicionando as constantes corretas, podemos escrever \mathcal{F}_{1RSB} como uma função de q_o , q_1 , q_2 , m_1 e μ .

$$\begin{aligned} \frac{\beta\mathcal{F}_{1RSB}}{N} &= -\frac{(\beta J)^2}{4} [q_o^p - q_1^p + m_1(q_1^p - q_2^p)] - \frac{(m_1 - 1)}{2m_1} \log(q_o - q_1) \\ &- \frac{1}{2} \frac{q_2}{q_o - q_1 + m_1(q_1 - q_2)} - \frac{1}{2m_1} \log(q_o - q_1 + m_1(q_1 - q_2)) + \log \left[2 \sinh \left[\frac{\beta}{2} \sqrt{\frac{2\mu}{I}} \right] \right] \\ &- \frac{1}{2} \log(2\beta\mu) - \beta\mu(1 - q_o) - \frac{1}{2}(1 + \log(2\pi)) - \frac{1}{2} \log \left(\frac{1}{JI} \right). \end{aligned} \quad (5.54)$$

A energia livre (5.54) pode ser extremizada por meio das equações de ponto de sela

$$\frac{1}{N} \frac{\partial\beta\mathcal{F}_{1RSB}}{\partial q_o} = \frac{1}{N} \frac{\partial\beta\mathcal{F}_{1RSB}}{\partial q_1} = \frac{1}{N} \frac{\partial\beta\mathcal{F}_{1RSB}}{\partial q_2} = \frac{1}{N} \frac{\partial\beta\mathcal{F}_{1RSB}}{\partial m_1} = 0, \quad \frac{1}{N} \frac{\partial\beta\mathcal{F}_{1RSB}}{\partial\beta\mu} = 1, \quad (5.55)$$

onde a última equação em (5.55) se refere a condição esférica média. Explicitamente,

$$\left\{ \begin{array}{l} 2\beta\mu = \frac{(\beta J)^2}{2} p q_o^{p-1} + \frac{m_1-1}{m_1 A_o} - \frac{q_2}{A_1^2} + \frac{1}{m_1 A_1}; \\ 0 = (m_1 - 1) \left\{ \frac{1}{m_1 A_o} - \frac{(\beta J)^2}{2} p q_1^{p-1} + \frac{q_2}{A_1^2} - \frac{1}{m_1 A_1} \right\}; \\ 0 = m_1 \left\{ \frac{(\beta J)^2}{2} p q_2^{p-1} - \frac{q_2}{A_1^2} \right\}; \\ 0 = \frac{q_2(q_1-q_2)}{A_1^2} - \frac{q_1-q_2}{m_1 A_1} - \frac{(\beta J)^2}{2} (q_1^p - q_2^p) + \frac{1}{m_1^2} \log \left[\frac{A_1}{A_o} \right]; \\ q_o = 1 + \frac{1}{2\beta\mu} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{2\mu I}} \coth \left[\beta \sqrt{\frac{\mu}{2I}} \right], \end{array} \right. \quad (5.56)$$

onde $A_o = q_o - q_1$ e $A_1 = q_o - q_1 + m_1(q_1 - q_2)$. Além disso, devemos observar que as três primeiras equações em (5.56) apresentam fatores que dependem de m_1 e reduzem-se a forma (RS) para $m_1 = 1$, a penúltima é usada para determinar o parâmetro de quebra de simetria m_1 e a última é a condição esférica média que nos permite obter $\mu(T)$ como uma função da temperatura e o diagrama de fases que, como esperado, é a mesma obtida via hipótese (RS) já que depende apenas de elementos diagonais da matriz dos “overlap’s”.

5.5.1 Diagrama de fases 1RSB

Vamos considerar no sistema (5.56) o caso particular $p = 3$. Para tal, reescrevemos esse sistema de equações de uma forma mais conveniente, a saber,

$$\left\{ \begin{array}{l} 2\beta\mu = \frac{3(\beta J)^2}{2} [q_o^2 - q_1^2] + \frac{1}{q_o - q_1}; \\ 0 = \frac{3(\beta J)^2}{2} (q_1^2 - q_2^2) - \frac{q_1 - q_2}{(q_o - q_1)(q_o - q_1 + m_1(q_1 - q_2))}; \\ 0 = \frac{3(\beta J)^2}{2} q_2^2 - \frac{q_2}{(q_o - q_1 + m_1(q_1 - q_2))^2}; \\ 0 = \frac{q_2(q_1 - q_2)}{(q_o - q_1 + m_1(q_1 - q_2))^2} - \frac{q_1 - q_2}{m_1(q_o - q_1 + m_1(q_1 - q_2))} - \frac{(\beta J)^2}{2} (q_1^3 - q_2^3) + \frac{1}{m_1^2} \log \left[\frac{q_o - q_1 + m_1(q_1 - q_2)}{q_o - q_1} \right]; \\ q_o = 1 + \frac{1}{2\beta\mu} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{2\mu I}} \coth \left[\beta \sqrt{\frac{\mu}{2I}} \right], \end{array} \right. \quad (5.57)$$

onde já eliminamos as soluções triviais $m_1 = 1$ e $m_1 = 0$ e, além disso, se consideramos o limite clássico $I \rightarrow \infty$ temos, da condição esférica, $q_o = 1$ e daí recorremos as expressões obtidas por Crisanti e Sommers [4], enquanto que se consideramos $q_2 = 0$ temos as expressões obtidas por Cugliandolo [33].

Solução paramagnética

No contexto do ansatz de quebra de simetria de réplica ($1RSB$), a solução paramagnética é caracterizada por $q_1 = q_2 = 0$. Sob estas condições o sistema (5.57) reduz-se a única equação $\frac{3}{2}(\beta J)^2 q_o^3 - 2\beta\mu q_o + 1 = 0$ que é a mesma obtida via hipótese de simetria de réplicas (RS) (primeira equação de (5.3)). Logo, seguindo a análise realizada na subseção (5.1) concluímos que existem duas soluções paramagnéticas, as quais foram denominadas ($PM1$) e ($PM2$) que estão associadas, respectivamente, as soluções q_o^2 e q_o^3 ((5.5), (5.6)) desta equação cúbica. A linha de coexistência que separa as fases ($PM1$) e ($PM2$) (onde $q_o^2 = q_o^3$) é a mesma obtida na subseção (5.1) e está apresentado no diagrama das fases (5.8) por uma linha sólida.

Solução de vidro de spins

A fase vidro de spin é caracterizada, no âmbito da $1RSB$, por $q_1 \neq 0$ e $q_2 \neq 0$. Vamos apresentar inicialmente os resultados obtidos por Crisanti e Sommers [4] e Cugliandolo [33] para a obtenção do valor crítico de m_1 (o qual chamaremos de \tilde{m}_1) que seleciona a linha de instabilidade de Almeida e Theouless [13]. Ambos os autores ignoram a otimização de m_1 e obtêm \tilde{m}_1 como solução de (5.57). Entretanto, seus valores para \tilde{m}_1 não coincidem, daí vamos propor um valor mais geral para \tilde{m}_1 que satisfaça as condições requeridas bem como compatibilize as propostas de [4] e [33].

Linhas de instabilidade

A linha de instabilidade em [4] é obtida expandindo-se a segunda equação de (5.57) (com a devida adaptação $q_o = 1$) em potências de $q_1 - q_2 \rightarrow 0$. Assim, retendo apenas termos de mais baixa ordem, obtemos

$$q_1 - q_2 = -2 \frac{3(\beta J)^2 q_2 - (1 - q_2)^{-2}}{3(\beta J)^2 + 2(m_1 - 2)(1 - q_2)^{-3}}. \quad (5.58)$$

Na transição $q_1 \rightarrow q_2$ e daí o lado direito de (5.58) deve ser nula. Deste modo, a linha de

instabilidade é obtida através

$$3(\beta J)^2 q_1 - \frac{1}{(1 - q_1)^2} = 0, \quad (5.59)$$

o que nos permite concluir que a linha de instabilidade é caracterizada pela condição $\Lambda_{AT} = 0$, onde Λ_{AT} é dado por (5.31).

O particular valor de m_1 que está relacionado com a solução q_1 , responsável por gerar a linha de instabilidade, é obtido expandindo-se a penúltima equação em (5.57) para $q_1 - q_2 \rightarrow 0$ e utilizando-se (5.59), nos conduzindo a seguinte relação entre m_1 e q_1

$$\tilde{m}_{1CS} = \frac{1 - q_1}{2q_1}, \quad (5.60)$$

onde \tilde{m}_{1CS} denota o valor crítico de m_1 obtido em [4] e, para $m_1 \in [0, 1]$, deve valer que $q_1 \in [1/3, 1]$. Em resumo, a diferença $q_1 - q_2$ é zero na linha de instabilidade, mas m_1 tem um valor bem definido em termos de q_1 e é dado por (5.60).

No artigo de Cugliandolo [33] é considerado que a única solução da terceira equação em (5.57) é $q_2 = 0$, deste modo esta equação é descartada em tal artigo. A linha de instabilidade ou de estabilidade marginal é obtida para o valor crítico de m_1 oriundo de $\Lambda_{AT} = 0$, juntamente com a segunda equação em (5.57) (com $q_2 = 0$ e eliminando-se a solução $q_1 = 0$). Explicitamente, temos de encontrar m_1 em

$$\begin{cases} 0 = \frac{1}{(q_o - q_1)^2} - 3(\beta J)^2 q_1 \\ 0 = \frac{1}{(q_o - q_1)(q_o - q_1 + m_1 q_1)} - \frac{3}{2}(\beta J)^2 q_1, \end{cases} \quad (5.61)$$

daí, substituindo a primeira na segunda obtemos o valor crítico de m_1 , que gera a linha de instabilidade de de Almeida e Thouless proposta por L. Cugliandolo. Denotando-o por \tilde{m}_{1LC} segue que

$$\tilde{m}_{1LC} = \frac{q_o - q_1}{q_1}. \quad (5.62)$$

Ansatz para \tilde{m}_1

Noss *ansatz* para o valor crítico de m_1 foi motivado pelo fato de que \tilde{m}_{1CS} e \tilde{m}_{1LC} ((5.60),

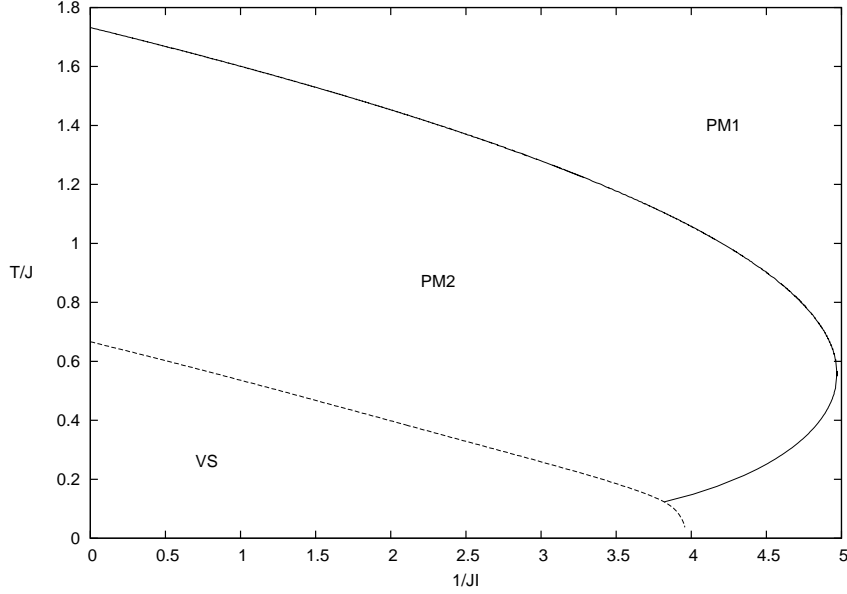


Figura 5.8: Diagrama de fases $T \times 1/I$. Linha sólida separa a fase paramagnética estável ($PM1$) da fase paramagnética instável ($PM2$). A linha tracejada indica a linha de instabilidade de Almeida e Thouless.

(5.62)) não coincidem (nos respectivos limites). Deste modo, propomos um valor \tilde{m}_1 que satisfaça ambos resultados (de [4] e [33]) e, além disso, a condição de estabilidade marginal $\Lambda_{AT} = 0$. Tal ansatz é dado por,

$$\tilde{m}_1 = \frac{q_o - q_1}{q_1 + q_2}. \quad (5.63)$$

Notemos que, ao seguirmos a proposta de [4] $q_o = 1$ e $q_2 \rightarrow q_1$ obtemos por (5.63) $\tilde{m}_1 = \frac{1-q_1}{2q_1}$, que é a mesma expressão (5.60). Por outro lado, seguindo os procedimentos de [33], temos de tomar $q_2 = 0$ em (5.63). Donde, $\tilde{m}_1 = \frac{q_o - q_1}{q_1}$ e assim recaímos na expressão (5.62). Por fim, verificamos a condição $\Lambda_{AT} = 0$. Com efeito, substituindo-se (5.63) na segunda equação em (5.57) obtemos,

$$3(\beta J)^2 q_1 - \frac{1}{(q_o - q_1)^2} = 0, \quad (5.64)$$

que é exatamente a primeira equação em (5.61), ou seja, $\Lambda_{AT} = 0$.

A linha de instabilidade é, portanto, obtida resolvendo-se (numericamente) (5.64) com a primeira e última (condição esférica) equações de (5.57) e está representado pela linha tracejada na figura (5.8).

Devemos observar que, no limite clássico $I \rightarrow \infty$ temos $q_o = 1$ e $q_1 = 1/3$ e daí $\tilde{m}_{1CS} = 1$, enquanto que $\tilde{m}_{1LC} = 2 > 1$ (valor não físico).

Resumindo, a fase paramagnética fica perfeitamente descrita pelo hipótese de simetria entre réplicas (RS) e, deste modo, a linha de coexistência que separa as fases ($PM1$) e ($PM2$)

é obtida pelos procedimentos apresentados na subseção (5.1).

Por fim, a fase vidro de spin (VS) é descrita pela primeira etapa de quebra de simetria de réplicas (*1RSB*). A curva de instabilidade, que separa as fases (VS) de (*PM1*) e (*PM2*), é dada pela condição $\Lambda_{AT} = 0$ que é obtida pela escolha conveniente de $\tilde{m}_1 = \frac{q_0 - q_1}{q_1 + q_2}$. Diferentemente do que ocorre quando tratamos a fase (VS) via (RS), a linha crítica não apresenta comportamento reentrante, sendo $T = 0$ para $1/I_c \approx 3.97$.

Capítulo 6

Considerações Finais

No presente trabalho, foi abordada uma classe particular de modelos teóricos para vidro de spins, a saber, o modelo esférico quântico com interação de p spins.

Inicialmente, o modelo esférico clássico de vidro de spins com interação de p spins, apresentado por A. Crisanti e H. Sommers [4], foi quantizado na forma utilizada por P. Shukla [10] e, posteriormente, por P. Menezes e A. Theumann [6]. As variáveis clássicas de spin foram substituídas por operadores de posição e definidos operadores de momentum canonicamente conjugados, inserindo um termo de energia cinética dependente de um momento de inércia (rotores quânticos). O momento de inércia I serve como parâmetro de controle do caráter quântico do modelo, com o limite clássico recuperado para $I \rightarrow \infty$. Considerando o espectro contínuo desses operadores de spin, foi utilizado um *vínculo esférico* para garantir um valor médio por spin finito no limite termodinâmico. Isso introduz um multiplicador de Lagrange que pode ser visto como um “potencial químico”. O formalismo das integrais de caminho de Feynman [11, 12] foi utilizado para escrever a função de partição do sistema, dependente dos acoplamentos de troca J_{i_1, \dots, i_p} entre p spins. Esses acoplamentos são considerados de alcance infinito e aleatoriamente distribuídos com probabilidade gaussiana de média nula, cuja largura mede o grau de desordem e foi utilizada para definir a escala de energias. As médias sobre configurações da desordem congelada (*quenched*) foram tratadas via *método de réplicas* [3, 9]. O desacoplamento do termo de interação entre spins foi feito, como é usual, introduzindo campos dinâmicos, que se traduzem em correlações (*overlaps*) entre réplicas e podem ser diretamente relacionados a um parâmetro de ordem para caracterizar a fase de vidro de spins.

As equações formais envolvendo os *overlaps* dinâmicos não mostraram que seja possível

obter uma solução analítica para um valor genérico de p . O caso $p = 2$ pode ser tratado de forma mais completa, por não misturar componentes de Fourier dos campos com frequências distintas. Analisando as soluções obtidas sob a hipótese de simetria de réplicas e no primeiro estágio de quebra dessa simetria, demonstramos que a solução com simetria de réplicas é exata para o modelo esférico analisado. Essa solução, isto é, a energia livre do modelo, coincide com a obtida por Theumann e Menezes [6] através de um método que envolve desordem recozida (*annealed*), o que mostra a equivalência desses dois tratamentos para o modelo em questão.

Outros casos foram estudados na *aproximação estática*, isto é, eliminando a dinâmica dos campos de correlação entre réplicas. Esta aproximação foi testada no caso $p = 2$, comparando com os resultados comentados acima, em particular, no que se refere ao comportamento de quantidades físicas em função da temperatura para diferentes valores dos parâmetros do modelo. Com o estudo deste primeiro caso foi possível concluir que um tratamento utilizando a aproximação estática é mais adequado próximo ao regime clássico ou para altas temperaturas. Já no limite $p \rightarrow \infty$ podemos constatar que a aproximação estática torna-se bem mais simples do ponto de vista analítico, porém a única fase encontrada é a paramagnética ($T_c = 0$). A energia livre, bem como as quantidades termodinâmicas, foram calculadas. A comparação com trabalhos anteriores abordando esse limite [5, 30] foi limitada porque esses trabalhos envolvem modelos com spins de Ising. Apesar de que a entropia apresentou a patologia $s \rightarrow -\infty$ para $T \rightarrow 0$ no limite clássico ($I \rightarrow \infty$), foi possível escrever uma expressão explícita para o calor específico, que apresentou um comportamento qualitativo semelhante ao do sólido de Einstein [16], obedecendo uma lei de Dulong e Petit no limite clássico.

Finalmente, foi possível estudar analiticamente as fases paramagnética e de vidro de spins para o caso particular $p = 3$, na aproximação estática e supondo simetria entre réplicas. O comportamento do modelo mostrou-se não trivial. Em particular, embora o potencial químico não varie com a temperatura na fase VS, o seu valor mostrou-se dependente do valor de I , o que não acontece para $p = 2$. Além disso, o diagrama de fases obtido na solução com simetria de réplicas, mostra duas fases paramagnéticas, além da fase de vidro de spins, com reentrância desta última. Tal comportamento se modifica, desaparecendo a reentrância, quando utilizamos o primeiro estágio de quebra de simetria de réplicas (1RSB) de G. Parisi [14], pois verificamos que a fase VS é instável (no sentido de de Almeida e Thouless [13]).

Em conclusão, o modelo esférico quântico de vidro de spins com interação de p spins mostrou-se interessante, permitindo um estudo razoavelmente detalhado, com resultados explícitos para certos limites ou casos particulares. Em princípio, a reação exata entre as componentes dos campos de *overlap* entre réplicas, aqui obtida, pode ser explorada para outros casos. Em outra perspectiva, pode-se pensar na aplicação das técnicas apresentadas nesta tese para estudar a versão quântica do modelo esférico de vidro de spins antiferromagnético, proposto por de Almeida [34].

Apêndice A

Cálculo da Condição Esférica Média

Vamos mostrar, explicitamente, os procedimentos nos cálculos para obtenção da condição esférica média (3.57) partindo de (3.52). Tal equação é de extrema importância para modelo já que nos permite obter a temperatura crítica T_c/J como uma do inverso do momento de inércia dos rotores quânticos $1/JI$ (figura 3.2), além de nos permitir expressar no parâmetro de ordem $q(0)$ (3.61) como uma função da temperatura para cada I fixo.

Iniciamos com a equação (3.52), ou seja,

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} q_o(\omega_m) = 1 \quad (\text{A.1})$$

A fim de realizarmos a soma em (A.1), recorreremos ao procedimento [12] que consiste em substituir as frequências $\omega_m = 2\pi m/\beta$ discretas por uma variável complexa contínua z . Assim, para uma função genérica das frequências $f(\omega_m)$ segue que [12]

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(\omega_m) = \frac{\beta}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{e^{\eta z}}{e^{\beta z} - 1} f(iz) dz, \quad (\text{A.2})$$

onde $i = \sqrt{-1}$ e Γ é um contorno de integração contendo os pólos $z = \omega_m i$ (figura (A.1)).

Logo, utilizando $f(\omega_m) = q_o(\omega_m)$ em (A.2) (juntamente com a equação (3.49) escolhendo

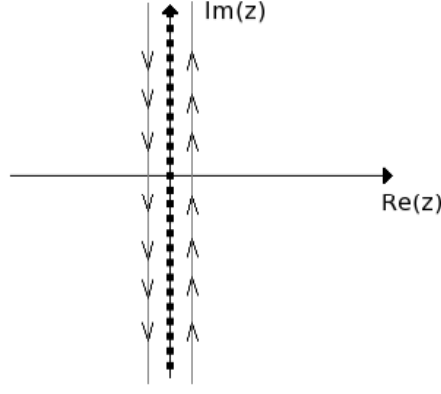


Figura A.1: Contorno Γ para a integração complexa (A.1).

o sinal $-$) segue que

$$\begin{aligned} \xi &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left(\frac{2\beta\mu + \beta I\omega_m^2 - \sqrt{(2\beta\mu + \beta I\omega_m^2)^2 - 4(\beta J)^2}}{2(\beta J)^2} \right) = \\ &= \frac{\beta^2}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{e^{\eta z}}{e^{\beta z} - 1} \left\{ \frac{2\mu - Iz^2}{2(\beta J)^2} \right\} - \frac{\beta^2}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{e^{\eta z}}{e^{\beta z} - 1} \left\{ \frac{\sqrt{(2\mu - Iz^2)^2 - 4J^2}}{2(\beta J)^2} \right\}. \quad (\text{A.3}) \end{aligned}$$

Para que possamos realizar a integração em (A.3), deformamos o contorno de modo a nos livrarmos dos infinitos pólos, e ficar apenas com uma quantidade enumerável deles ou com algum corte. A primeira integral de (A.3) tem pólos apenas sobre o eixo imaginário de z , então, se deformamos o contorno de modo a “fugir” destes pólos, (figura (A.2)(I)), a integral é nula. A segunda integral de (A.3), portanto, possui cortes no eixo real de z , como mostra a figura (A.2) (II).

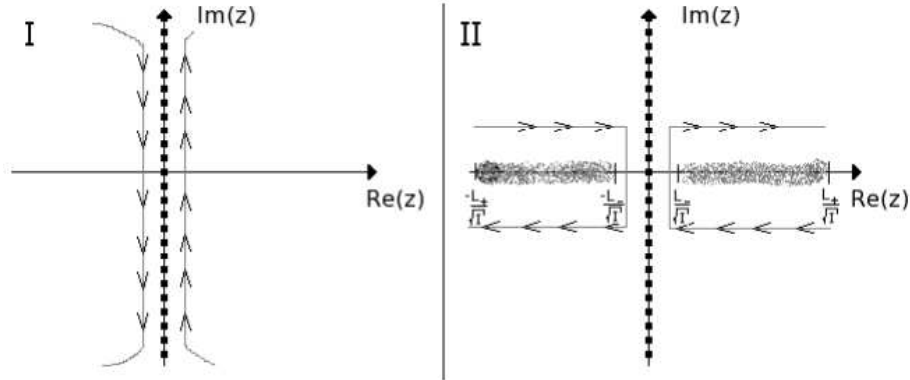


Figura A.2: Contorno Γ para a primeira integral (I) e para a segunda integral (II) em (A.3).

A localização dos cortes no eixo real de z são obtidas impondo a condição de que o integrando de (A.3) seja real, ou seja, que $(2\mu - Iz^2)^2 - 4J^2 \geq 0 : . \frac{2\mu+2J}{I} \geq z^2 \geq \frac{2\mu-2J}{I} : .$

$z \in \left[\frac{-L_+}{\sqrt{I}}, \frac{-L_-}{\sqrt{I}} \right] \cup \left[\frac{L_-}{\sqrt{I}}, \frac{L_+}{\sqrt{I}} \right]$, onde $L_{\pm}^2 = 2\mu \pm 2J$ (figura (A.2) (II)).

Assim, a integral (A.3) pode ser dividida em quatro integrais reais, a saber,

$$I_a = -\frac{1}{4\pi J^2} \int_{-\frac{L_+}{\sqrt{I}}}^{-\frac{L_-}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}; \quad (\text{A.4})$$

$$I_b = \frac{1}{4\pi J^2} \int_{-\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{-\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}; \quad (\text{A.5})$$

$$I_c = \frac{1}{4\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}; \quad (\text{A.6})$$

$$I_d = -\frac{1}{4\pi J^2} \int_{\frac{L_+}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_-}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}. \quad (\text{A.7})$$

Devemos colocar todas integrais acima sob os mesmos extremos de integração, para tal, em I_a e I_b devemos fazer a mudança de variável $x \rightarrow -x$ e inverter os extremos das integrais I_a e I_d . Logo,

$$\tilde{I}_a = -\frac{1}{4\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{-\beta x} - 1} \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}; \quad (\text{A.8})$$

$$\tilde{I}_b = -\frac{1}{4\pi J^2} \int_{\frac{L_+}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_-}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{-\beta x} - 1} \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}; \quad (\text{A.9})$$

$$\tilde{I}_c = \frac{1}{4\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}; \quad (\text{A.10})$$

$$\tilde{I}_d = \frac{1}{4\pi J^2} \int_{\frac{L_+}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_-}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}. \quad (\text{A.11})$$

Logo, somando as integrais \tilde{I}_a , \tilde{I}_b , \tilde{I}_c e \tilde{I}_d , e levando-se em conta que $\sinh(\theta) = (e^{-\theta} - e^{\theta})/2$ e $\cosh(\theta) = (e^{-\theta} + e^{\theta})/2$ chegamos em

$$\xi = \frac{1}{2\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} dx \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} \coth\left(\frac{\beta x}{2}\right). \quad (\text{A.12})$$

Logo, a condição esférica média (3.57) assume a forma

$$\frac{1}{2\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} dx \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} \coth\left(\frac{\beta x}{2}\right) = 1. \quad (\text{A.13})$$

E o parâmetro de ordem (3.61) (para $T \leq T_c$ e $\mu = \mu_c = J$.)

$$q(0) = 1 - \frac{1}{2\pi J^2} \int_0^{2\sqrt{J/I}} dx \sqrt{4J^2 - (2J - Ix^2)^2} \coth\left(\frac{\beta x}{2}\right). \quad (\text{A.14})$$

Apêndice B

Cálculo do Energia Livre para $p = 2$

Vamos apresentar os cálculos que conduzem à energia livre (3.68). Para tal, iniciamos com a expressão (3.67), isto é,

$$\frac{\mathcal{F}}{N} = \begin{cases} \frac{(\beta J)^2}{4\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (q_0(\omega_m)^2 - \frac{1}{2} \log(q_0(\omega_m))) - \mu - \frac{1}{\beta} \log(\mathcal{N}); & \text{se } T > T_c; \\ \frac{(\beta J)^2}{4\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} ((q_0(\omega_m) - q(\omega_m))^2 - \frac{1}{2} \log(q_0(\omega_m) - q(\omega_m))) - J & \text{se } T \leq T_c, \\ -\frac{1}{\beta} \log(\mathcal{N}) & \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

onde devemos trabalhar cada um dos dois primeiros termos separadamente (de qualquer uma dela já que tanto $q_0(\omega_m)$ quanto $q_0(\omega_m) - q(\omega_m)$ são dados pela mesma expressão (3.49)).

Novamente, recorreremos ao procedimento adotado no apêndice (A) que consiste em escrever a soma sobre as frequências como integrais no plano complexo [12] na variável complexa contínua z , ou seja, com auxílio de

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(\omega_m) = \frac{\beta}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{e^{\eta z}}{e^{\beta z} - 1} f(iz) dz, \quad (\text{B.2})$$

onde o contorno Γ é o mesmo encontrado na figura (A.1).

Assim, a primeira parcela de (B.1) fica (com auxílio de (3.49))

$$\begin{aligned}
\tau_1 &= \frac{(\beta J)^2}{4\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left(\frac{2\beta\mu + \beta I\omega_m^2 - \sqrt{(2\beta\mu + \beta I\omega_m^2)^2 - 4(\beta J)^2}}{2(\beta J)^2} \right)^2 \\
&= \frac{1}{16\beta(\beta J)^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} [(2\beta\mu + \beta I\omega_m^2)^2 + (2\beta\mu + \beta I\omega_m^2)^2 - 4(\beta J)^2] \\
&\quad - \frac{1}{16\beta(\beta J)^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} [2(2\beta\mu + \beta I\omega_m^2)\sqrt{(2\beta\mu + \beta I\omega_m^2)^2 - 4(\beta J)^2}]. \tag{B.3}
\end{aligned}$$

Ao realizarmos o procedimento descrito acima (utilizando a equação (B.2)) devemos notar que todo o somatório da segunda linha de (B.3) vai induzir integrais no plano complexo que são nulas, posto que, podemos deformar o contorno Γ conforme figura (A.2 (I)). Logo, trabalhando o termo relevante temos

$$\tau_1 = -\frac{1}{16\pi i(\beta J)^2} \oint_{\Gamma} \frac{e^{\eta z}}{e^{\beta z} - 1} dz (2\beta\mu - \beta I z^2) \sqrt{(2\beta z - \beta I z^2)^2 - 4(\beta J)^2}, \tag{B.4}$$

onde Γ é o contorno que aparece na figura (A.2), já que os cortes possuem as mesmas localizações. Novamente, assim como fizemos no apêndice (A), a integral (B.4) pode ser dividida em quatro integrais reais, a saber,

$$J_1 = -\frac{1}{16\pi J^2} \int_{-\frac{L_+}{\sqrt{I}}}^{-\frac{L_-}{\sqrt{I}}} \frac{1}{e^{\beta x} - 1} (2\mu - Ix^2) \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} dx; \tag{B.5}$$

$$J_2 = \frac{1}{16\pi J^2} \int_{-\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{-\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{1}{e^{\beta x} - 1} (2\mu - Ix^2) \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} dx; \tag{B.6}$$

$$J_3 = \frac{1}{16\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{1}{e^{\beta x} - 1} (2\mu - Ix^2) \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} dx; \tag{B.7}$$

$$J_4 = -\frac{1}{16\pi J^2} \int_{\frac{L_+}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_-}{\sqrt{I}}} \frac{1}{e^{\beta x} - 1} (2\mu - Ix^2) \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} dx. \tag{B.8}$$

Para colocarmos todas integrais sob mesmo extremo de integração, façamos a mudança de variável $x \rightarrow -x$ nas integrais J_1 e J_2 e invertamos a ordem dos extremos das integrais J_1 e

J_4 . Obtemos, deste modo,

$$\tilde{J}_1 = -\frac{1}{16\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{1}{e^{-\beta x} - 1} (2\mu - Ix^2) \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} dx; \quad (\text{B.9})$$

$$\tilde{J}_2 = -\frac{1}{16\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{1}{e^{-\beta x} - 1} (2\mu - Ix^2) \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} dx; \quad (\text{B.10})$$

$$\tilde{J}_3 = \frac{1}{16\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{1}{e^{\beta x} - 1} (2\mu - Ix^2) \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} dx; \quad (\text{B.11})$$

$$\tilde{J}_4 = \frac{1}{16\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{1}{e^{\beta x} - 1} (2\mu - Ix^2) \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} dx. \quad (\text{B.12})$$

Logo, somando as integrais \tilde{J}_1 , \tilde{J}_2 , \tilde{J}_3 e \tilde{J}_4 chegamos, finalmente, em

$$\tau_1 = \frac{1}{8\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} (2\mu - Ix^2) \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} \coth\left(\frac{\beta x}{2}\right) dx. \quad (\text{B.13})$$

Passamos a trabalhar o segundo termo de (B.1) ($\sum_m \log(\dots)$) que, utilizando (3.49) em (B.2), nos dá

$$\begin{aligned} \tau_2 &= \frac{1}{2\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \log \left[\frac{2\beta\mu + \beta I\omega_m^2 - \sqrt{(2\beta\mu + \beta I\omega_m^2)^2 - 4(\beta J)^2}}{2(\beta J)^2} \right] \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{e^{\eta z}}{e^{\beta z} - 1} \log \left[\frac{2\beta\mu - \beta I z^2 - \sqrt{(2\beta\mu - \beta I z^2)^2 - 4(\beta J)^2}}{2(\beta J)^2} \right] dz, \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

onde, novamente, Γ é o contorno apresentado na figura (A.2 (II)). Além disso, podemos dividir a integral (B.14) nas quatro integrais reais

$$Y_1 = \frac{1}{4\pi i} \int_{-\frac{L_+}{\sqrt{I}}}^{-\frac{L_-}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \log \left[\beta \left(\frac{2\mu - Ix^2 - i\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}}{2(\beta J)^2} \right) \right]; \quad (\text{B.15})$$

$$Y_2 = \frac{1}{4\pi i} \int_{-\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \log \left[\beta \left(\frac{2\mu - Ix^2 + i\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}}{2(\beta J)^2} \right) \right]; \quad (\text{B.16})$$

$$Y_3 = \frac{1}{4\pi i} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \log \left[\beta \left(\frac{2\mu - Ix^2 + i\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}}{2(\beta J)^2} \right) \right]; \quad (\text{B.17})$$

$$Y_4 = \frac{1}{4\pi i} \int_{\frac{L_+}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_-}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \log \left[\beta \left(\frac{2\mu - Ix^2 - i\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}}{2(\beta J)^2} \right) \right]. \quad (\text{B.18})$$

Para que possamos trabalhar com o mesmo extremo de integração nas integrais acima façamos a mudança de variável $x \rightarrow -x$ nas integrais Y_1 e Y_2 e invertemos os extremos de Y_1 e Y_4 , donde

$$\tilde{Y}_1 = \frac{1}{4\pi i} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{-\beta x} - 1} \log \left[\beta \left(\frac{2\mu - Ix^2 - i\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}}{2(\beta J)^2} \right) \right]; \quad (\text{B.19})$$

$$\tilde{Y}_2 = -\frac{1}{4\pi i} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{-\beta x} - 1} \log \left[\beta \left(\frac{2\mu - Ix^2 + i\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}}{2(\beta J)^2} \right) \right]; \quad (\text{B.20})$$

$$\tilde{Y}_3 = \frac{1}{4\pi i} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \log \left[\beta \left(\frac{2\mu - Ix^2 + i\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}}{2(\beta J)^2} \right) \right]; \quad (\text{B.21})$$

$$\tilde{Y}_4 = -\frac{1}{4\pi i} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \log \left[\beta \left(\frac{2\mu - Ix^2 - i\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}}{2(\beta J)^2} \right) \right]. \quad (\text{B.22})$$

Somando-se as integrais \tilde{Y}_1 , \tilde{Y}_2 , \tilde{Y}_3 e \tilde{Y}_4 chegamos em

$$\begin{aligned} \tau_2 &= \frac{1}{4\pi i} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} dx \log \left[2\mu - Ix^2 + i\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} \right] \coth \left(\frac{\beta x}{2} \right) - \\ &- \frac{1}{4\pi i} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} dx \log \left[2\mu - Ix^2 - i\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} \right] \coth \left(\frac{\beta x}{2} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

Ambas integrais em (B.23) são análogas, fazendo-se necessário apresentar os cálculos para apenas uma destas (façamos com a primeira). Com efeito, devemos realizar uma integração por partes na primeira integral de (B.23), ou seja, utilizar a relação

$$\int_a^b u dv = uv|_a^b - \int_a^b v du, \quad (\text{B.24})$$

com

$$u = \log \left[2\mu - Ix^2 + i\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} \right] : . \quad (\text{B.25})$$

$$du = \frac{2Ix}{\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}} dx : . \quad (\text{B.26})$$

$$dv = \coth \left(\frac{\beta x}{2} \right) dx : . \quad (\text{B.27})$$

$$v = \frac{2}{\beta} \log \left[\sinh \left(\frac{\beta x}{2} \right) \right]. \quad (\text{B.28})$$

Portanto, com esses resultados de volta na primeira e segunda integrais de (B.23) temos, respectivamente,

$$\begin{aligned} Int_1 &= \frac{1}{4\pi i} \left(\frac{2}{\beta} \log \left[\sinh \left(\frac{\beta x}{2} \right) \right] \log \left[2\mu - Ix^2 + i\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} \right] \right) \Big|_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \\ &- \frac{1}{4\pi i} \left(\frac{2}{\beta} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} dx \log \left[\sinh \left(\frac{\beta x}{2} \right) \right] \frac{2Ix}{\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

Analogamente a (B.29)

$$\begin{aligned} Int_2 &= \frac{1}{4\pi i} \left(\frac{2}{\beta} \log \left[\sinh \left(\frac{\beta x}{2} \right) \right] \log \left[2\mu - Ix^2 - i\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} \right] \right) \Big|_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \\ &+ \frac{1}{4\pi i} \left(\frac{2}{\beta} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} dx \log \left[\sinh \left(\frac{\beta x}{2} \right) \right] \frac{2Ix}{\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

Logo, voltando a τ_2 com (B.29) e (B.30) concluímos que

$$\tau_2 = -\frac{2I}{\pi\beta} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} dx \log \left[\sinh \left(\frac{\beta x}{2} \right) \right] \frac{x}{\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}}. \quad (\text{B.31})$$

Assim, com τ_1 e τ_2 na energia livre (B.1) chegamos em

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{F}}{N} &= \frac{1}{8\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} (2\mu - Ix^2) \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} \coth \left(\frac{\beta x}{2} \right) dx \\ &+ \frac{2I}{\pi\beta} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} dx \log \left[\sinh \left(\frac{\beta x}{2} \right) \right] \frac{x}{\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}} - \mu - \frac{1}{\beta} \log \left(\frac{1}{\sqrt{IJ}} \right), \end{aligned} \quad (\text{B.32})$$

onde já temos introduzido a constante de normalização $\mathcal{N} = 1/\sqrt{JI}$.

Para finalizarmos, devemos notar que na primeira integral em (B.32) podemos escrever

$$d \left[\log \left[\sinh \left(\frac{\beta x}{2} \right) \right] \right] = \frac{\beta}{2} \coth \left(\frac{\beta x}{2} \right) dx : .$$

donde

$$\coth \left(\frac{\beta x}{2} \right) dx = \frac{2}{\beta} d \left[\log \left[\sinh \left(\frac{\beta x}{2} \right) \right] \right], \quad (\text{B.33})$$

Assim, com esta substituição na primeira integral de (B.32), e fazendo-se uma integração por partes com

$$u = (2\mu - Ix^2) \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}; \quad (\text{B.34})$$

$$du = \left(\frac{4Ix((2\mu - Ix^2)^2 - 2J^2)}{\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}} \right) dx; \quad (\text{B.35})$$

$$dv = d \left[\log \left[\sinh \left(\frac{\beta x}{2} \right) \right] \right]; \quad (\text{B.36})$$

$$v = \log \left[\sinh \left(\frac{\beta x}{2} \right) \right]. \quad (\text{B.37})$$

podemos escrevê-la como

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{I}{\pi\beta J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} x dx \log \left[\sinh \left(\frac{\beta x}{2} \right) \right] \sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} \\ &\quad - \frac{2I}{\pi\beta} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} dx \log \left[\sinh \left(\frac{\beta x}{2} \right) \right] \frac{x}{\sqrt{4J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}}. \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

Logo, a energia livre do sistema assume, finalmente, a forma (com a mudança de variável de integração $x\sqrt{I} \rightarrow y$)

$$\frac{\beta\mathcal{F}}{N} = \begin{cases} \frac{1}{\pi J^2} \int_{L_-}^{L_+} dy y \log \left[\sinh \left(\frac{\beta y}{2\sqrt{I}} \right) \right] \sqrt{4J^2 - (2\mu - y^2)^2} - \beta\mu - \frac{1}{2} \log \left(\frac{1}{IJ} \right); & \text{se } T > T_c; \\ \frac{1}{\pi J^2} \int_0^{2\sqrt{J}} dy y \log \left[\sinh \left(\frac{\beta y}{2\sqrt{I}} \right) \right] \sqrt{4J^2 - (2J - y^2)^2} - \beta J - \frac{1}{2} \log \left(\frac{1}{IJ} \right), & \text{se } T \leq T_c, \end{cases} \quad (\text{B.39})$$

Apêndice C

Cálculo do Grande Potencial Termodinâmico na Aproximação Estática

Neste apêndice vamos mostrar a sequências de cálculos que nos conduzem a expressão (4.4) do grande potencial termodinâmico, obtida via aproximação estática. Tal quantidade está apresentada no capítulo (3). Para tal, partimos do funcional $G[\mathbf{q}(\tau, \tau'), \boldsymbol{\lambda}(\tau, \tau')]$ (3.21),

$$\begin{aligned} G[\mathbf{q}(\tau, \tau'), \boldsymbol{\lambda}(\tau, \tau')] &= -\frac{J^2}{4} \sum_{\alpha, \nu} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' q_{\alpha, \nu}^p(\tau, \tau') \\ &+ \frac{1}{2\beta^2} \sum_{\alpha, \nu} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' \lambda_{\alpha, \nu}(\tau, \tau') q_{\alpha, \nu}(\tau, \tau') \\ &- \log \left[\oint \mathcal{D}[S^\alpha(\tau)] e^{-\int_0^\beta d\tau \sum_\alpha \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dS^\alpha(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \mu S^\alpha(\tau)^2 \right]} \right. \\ &\times \left. e^{\frac{1}{2\beta^2} \sum_{\alpha, \nu} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' \lambda_{\alpha, \nu}(\tau, \tau') S^\alpha(\tau) S^\nu(\tau')} \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

Conforme propostopor Nishimori e Sherrington [5], assumimos que os campos $q_{\alpha, \nu}(\tau, \tau')$ e $\lambda_{\alpha, \nu}(\tau, \tau')$ sejam independentes do tempo imaginário τ (somente os campos não os spins) e também supomos, de ante mão, simetria entre as réplicas [3], ou seja,

$$\begin{cases} \lambda_{\alpha, \nu}(\tau, \tau') = \lambda, & \lambda_{\alpha, \alpha}(\tau, \tau') = \lambda_0; \\ q_{\alpha, \nu}(\tau, \tau') = q, & q_{\alpha, \alpha}(\tau, \tau') = q_0. \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

Sob estas hipóteses, trataremos separadamente cada um dos termos (C.1). Com efeito, os dois primeiros são imediatos

$$-\frac{J^2}{4} \sum_{\alpha,\nu} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' q_{\alpha,\nu}(\tau, \tau')^p = -\frac{(\beta J)^2}{4} [n(n-1)q^p + nq_o^p], \quad (\text{C.3})$$

e

$$\frac{1}{2\beta^2} \sum_{\alpha,\nu} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' \lambda_{\alpha,\nu}(\tau, \tau') q_{\alpha,\nu}(\tau, \tau') = \frac{1}{2} n(n-1) \lambda q + \frac{1}{2} n \lambda_o q_o. \quad (\text{C.4})$$

No que segue, escrevemos as transformadas de Fourier para as quantidades que envolvem as variáveis de spin $S(\tau)$, definidas para $S^\alpha(\tau)$

$$S^\alpha(\tau) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_m \tau} S^\alpha(\omega_m), \quad (\text{C.5})$$

onde $\omega_m = \frac{2\pi m}{\beta}$ são as *frequências de Matsubara para Bósons* [12]. Já os coeficientes $S^\alpha(\omega_m)$ são dados por

$$S^\alpha(\omega_l) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_l \tau} S^\alpha(\tau). \quad (\text{C.6})$$

Logo, os termos dentro do log [...] de (C.1)

$$-\frac{I}{2} \int_0^\beta d\tau \sum_\alpha \left(\frac{dS^\alpha(\tau)}{d\tau} \right)^2 = -\frac{(\beta I)}{2} \sum_\alpha \sum_m \omega_m^2 |S^\alpha(\omega_m)|^2, \quad (\text{C.7})$$

e

$$-\mu \int_0^\beta d\tau \sum_\alpha S^\alpha(\tau)^2 = -\beta \mu \sum_\alpha \sum_m |S^\alpha(\omega_m)|^2. \quad (\text{C.8})$$

Por fim, denotando por A o expoente da ultima exponencial em (C.1) temos

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2\beta^2} \sum_{\alpha,\nu} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' \lambda_{\alpha,\nu}(\tau, \tau') S^\alpha(\tau) S^\nu(\tau') \\ &= \frac{1}{2\beta^2} \sum_{\alpha \neq \nu} \lambda \int_0^\beta d\tau S^\alpha(\tau) \int_0^\beta d\tau' S^\nu(\tau') + \frac{1}{2\beta^2} \sum_\alpha \lambda_o \int_0^\beta d\tau S^\alpha(\tau) \int_0^\beta d\tau' S^\alpha(\tau') \\ &= \frac{1}{2\beta^2} \left[\lambda \sum_{\alpha \neq \nu} \int_0^\beta d\tau S^\alpha(\tau) \int_0^\beta d\tau' S^\nu(\tau') + \lambda_o \sum_\alpha \left(\int_0^\beta d\tau S^\alpha(\tau) \right)^2 \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\beta^2} \left[\lambda \left(\sum_{\alpha,\nu} \int_0^\beta d\tau S^\alpha(\tau) \int_0^\beta d\tau' S^\nu(\tau') - \sum_\alpha \int_0^\beta d\tau S^\alpha(\tau) \int_0^\beta d\tau' S^\alpha(\tau') \right) \right] \\
&+ \frac{1}{2\beta^2} \left[\lambda_o \sum_\alpha \left(\int_0^\beta d\tau S^\alpha(\tau) \right)^2 \right] \\
&= \frac{1}{2\beta^2} \left[\lambda \left(\sum_\alpha \int_0^\beta d\tau S^\alpha(\tau) \right)^2 - \lambda \sum_\alpha \left(\int_0^\beta d\tau S^\alpha(\tau) \right)^2 + \lambda_o \sum_\alpha \left(\int_0^\beta d\tau S^\alpha(\tau) \right)^2 \right] \\
&= \frac{1}{2\beta^2} \left[\lambda \left(\sum_\alpha \int_0^\beta d\tau S^\alpha(\tau) \right)^2 + (\lambda_o - \lambda) \sum_\alpha \left(\int_0^\beta d\tau S^\alpha(\tau) \right)^2 \right]. \tag{C.9}
\end{aligned}$$

Mas, pela transformada de Fourier (C.5) e (C.6) temos:

$$\int_0^\beta d\tau S^\alpha(\tau) = \sum_m S^\alpha(\omega_m) \int_0^\beta d\tau e^{-i\omega_m \tau} = \sum_m \beta \delta(\omega_m) S^\alpha(\omega_m) = \beta S^\alpha(0), \tag{C.10}$$

que é uma quantidade real. Deste modo, (a exponencial de) (C.9) assume a forma:

$$e^A = \exp \left(\frac{\lambda}{2} \left(\sum_\alpha S^\alpha(0) \right)^2 + \frac{(\lambda_o - \lambda)}{2} \sum_\alpha S^\alpha(0)^2 \right). \tag{C.11}$$

Usando a transformação de Hubbard-Stratonovich no primeiro termo de (C.11),

$$e^{\xi a^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dz e^{-\frac{1}{2}z^2 + \sqrt{2\xi}az}, \tag{C.12}$$

com a identificação $\sqrt{2\xi}a = \sqrt{\lambda} \sum_\alpha S^\alpha(0)$ chegamos em:

$$e^A = \int Dz e^{\sqrt{\lambda} \sum_\alpha S^\alpha(0)z + \frac{(\lambda_o - \lambda)}{2} \sum_\alpha S^\alpha(0)^2}, \tag{C.13}$$

onde $Dz = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}z^2} dz$.

Logo, o funcional (C.1) assume a forma (separando a frequência $\omega_m = 0$),

$$\begin{aligned}
G[\mathbf{q}, \lambda] &= -\frac{(\beta J)^2}{4} [n(n-1)q^p + nq_0^p] + \frac{1}{2}n(n-1)\lambda q + \frac{1}{2}n\lambda_0 q_0 \\
&- \log \left[\int Dz \int \left[\prod_\alpha dS^\alpha(0) \right] e^{(-\mu\beta + \frac{(\lambda_o - \lambda)}{2}) \sum_\alpha S^\alpha(0)^2 + \sqrt{\lambda}z \sum_\alpha S^\alpha(0)} \right. \\
&\times \left. \int \left[\prod_{m>0} \prod_\alpha dS^\alpha(\omega_m) dS^{*\alpha}(\omega_m) \right] e^{-\sum_{\alpha, m>0} [I\omega_m^2 \beta + 2\beta\mu] |S^\alpha(\omega_m)|^2} \right]. \tag{C.14}
\end{aligned}$$

Vamos trabalhar o termo dentro do log, o qual denotaremos por I_1 , evidenciando as partes real e imaginária de $S^\alpha(\omega_m) = u_\alpha(\omega_m) + iv_\alpha(\omega_m)$, daí:

$$\begin{aligned}
I_1 &= \int Dz \prod_\alpha \int dS^\alpha(0) e^{-(\mu\beta - (\lambda_o - \lambda)/2)S^\alpha(0)^2 + \sqrt{\lambda} z S^\alpha(0)} \\
&\times \int \prod_{m>0} \prod_\alpha du_\alpha(\omega_m) dv_\alpha(\omega_m) e^{-[I\omega_m^2\beta + 2\beta\mu](u_\alpha(\omega_m)^2 + v_\alpha(\omega_m)^2)} \\
&= \int Dz \prod_\alpha \left(\frac{2\pi}{2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda)} \right)^{1/2} e^{\frac{\lambda z^2}{2(2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda))}} \prod_{m>0} \prod_\alpha \int du_\alpha(\omega_m) e^{-[I\omega_m^2\beta + 2\beta\mu]u_\alpha(\omega_m)^2} \\
&\times \int dv_\alpha(\omega_m) e^{-[I\omega_m^2\beta + 2\beta\mu]v_\alpha(\omega_m)^2} \\
&= \left(\frac{2\pi}{2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda)} \right)^{n/2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dz e^{-\frac{1}{2}z^2 + \frac{n\lambda z^2}{2(2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda))}} \prod_{m>0} \prod_\alpha \left(\frac{\pi}{I\omega_m^2\beta + 2\beta\mu} \right) \\
&= \left(\frac{2\pi}{2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda)} \right)^{n/2} \sqrt{\frac{2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda)}{2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda) - n\lambda}} \prod_{m>0} \left(\frac{\pi}{I\omega_m^2\beta + 2\beta\mu} \right)^n \\
&= \left(\frac{2\pi}{2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda)} \right)^{n/2} \sqrt{\frac{2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda)}{2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda) - n\lambda}} \prod_{m>0} \pi^n e^{-\log(I\omega_m^2\beta + 2\beta\mu)}. \tag{C.15}
\end{aligned}$$

Logo, voltando com (C.15) em (C.14) podemos escrever (condensando as constantes em uma única C):

$$\begin{aligned}
G[\mathbf{q}, \lambda] &= -\frac{(\beta J)^2}{4} [n(n-1)q^p + nq_0^p] + \frac{1}{2}n(n-1)\lambda q + \frac{1}{2}n\lambda_0 q_0 + \frac{n}{2} \log(2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda)) \\
&- \frac{1}{2} \log \left(\frac{2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda)}{2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda) - n\lambda} \right) + n \sum_{m>0} \log(I\omega_m^2\beta + 2\beta\mu) - n \log(C). \tag{C.16}
\end{aligned}$$

Agora, o grande potencial termodinâmico Ω_{AE} é dado por

$$\begin{aligned}
\frac{\beta\Omega_{AE}}{N} &= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} G[\mathbf{q}, \lambda] = -\frac{(\beta J)^2}{4} [q_0^p - q^p] - \frac{\lambda q}{2} + \frac{\lambda_0 q_0}{2} + \frac{1}{2} \log(2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda)) \\
&- \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda}{2\beta\mu - (\lambda_o - \lambda)} \right) + \sum_{m>0} \log(I\omega_m^2\beta + 2\beta\mu) - \log(C). \tag{C.17}
\end{aligned}$$

Mas, utilizando uma identidade encontrada em [11] podemos escrever o último somatório

sobre as frequências em (C.17) como

$$\begin{aligned} \sum_{m>0} \log(I\omega_m^2\beta + 2\beta\mu) &= \frac{1}{2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \log(I\omega_m^2\beta + 2\beta\mu) - \frac{1}{2} \log(2\beta\mu) = \\ &= \log \left[2 \sinh \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{\frac{2\mu}{I}} \right) \right] - \frac{1}{2} \log(2\beta\mu), \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

Daí, com (C.18) em (C.17) chegamos na seguinte expressão para o grande potencial termodinâmico (via aproximação estática (AE))

$$\begin{aligned} \frac{\beta\Omega_{AE}}{N} &= -\frac{1}{2}(1 + \log(2\pi)) - \frac{(\beta J)^2}{4} [q_0^p - q^p] - \frac{\lambda q}{2} + \frac{\lambda_0 q_0}{2} + \frac{1}{2} \log(2\beta\mu - (\lambda_0 - \lambda)) \\ &- \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda}{2\beta\mu - (\lambda_0 - \lambda)} \right) + \log \left[2 \sinh \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{\frac{2\mu}{I}} \right) \right] - \frac{1}{2} \log(2\beta\mu), \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

onde já retornamos com o valor correto da constante C .

Apêndice D

Cálculo do Termo $\text{Tr}[(\mathbf{q}^{-1}\boldsymbol{\epsilon})^2]$ da Seção (5.4)

Vamos trabalhar, em detalhe, o termo $\text{Tr}[(\mathbf{q}^{-1}\boldsymbol{\epsilon})^2]$ que aparece na seção (4) onde fizemos uma análise da estabilidade do modelo. Para tal, vamos utilizar a propriedade do traço do produto matricial, a saber, dadas duas matriz A e B de ordem n , então $\text{tr}(AB) = \sum_{ij} A_{ij}B_{ji}$. Com efeito,

$$\begin{aligned}
\text{Tr}[(\mathbf{q}^{-1}\boldsymbol{\epsilon})^2] &= \text{Tr}[\mathbf{q}^{-1}\boldsymbol{\epsilon}\mathbf{q}^{-1}\boldsymbol{\epsilon}] = \sum_{\alpha,\nu} \sum_{\gamma,\delta} (\mathbf{q}^{-1})_{\alpha,\nu} \epsilon^{\nu,\gamma} (\mathbf{q}^{-1})_{\gamma,\delta} \epsilon^{\delta,\alpha} \\
&+ \sum_{\alpha,\nu} (\mathbf{q}^{-1})_{\alpha,\nu} \left[q_d^{-1} \sum_{\gamma} \epsilon^{\nu,\gamma} \epsilon^{\gamma,\alpha} + q_f^{-1} \sum_{\gamma \neq \delta} \epsilon^{\nu,\gamma} \epsilon^{\delta,\alpha} \right] = (q_d^{-1})^2 \sum_{\alpha} \sum_{\gamma} \epsilon^{\alpha,\gamma} \epsilon^{\gamma,\alpha} \\
&+ q_f^{-1} q_d^{-1} \sum_{\gamma} \sum_{\alpha \neq \nu} \epsilon^{\nu,\gamma} \epsilon^{\gamma,\alpha} + q_f^{-1} q_d^{-1} \sum_{\alpha} \sum_{\gamma \neq \delta} \epsilon^{\alpha,\gamma} \epsilon^{\delta,\alpha} + (q_f^{-1})^2 \sum_{\alpha \neq \nu} \sum_{\gamma \neq \delta} \epsilon^{\nu,\gamma} \epsilon^{\delta,\alpha} \\
&= (q_d^{-1})^2 \sum_{\alpha,\gamma} (\epsilon^{\alpha,\gamma})^2 + q_f^{-1} q_d^{-1} \sum_{\gamma} \left[\sum_{\alpha,\nu} \epsilon^{\nu,\gamma} \epsilon^{\gamma,\alpha} - \sum_{\gamma} \epsilon^{\alpha,\gamma} \epsilon^{\gamma,\alpha} \right] \\
&+ q_f^{-1} q_d^{-1} \sum_{\alpha} \left[\sum_{\gamma,\delta} \epsilon^{\alpha,\gamma} \epsilon^{\delta,\alpha} - \sum_{\gamma} \epsilon^{\alpha,\gamma} \epsilon^{\gamma,\alpha} \right] + (q_f^{-1})^2 \sum_{\alpha \neq \nu} \left[\sum_{\gamma,\delta} \epsilon^{\nu,\gamma} \epsilon^{\delta,\alpha} - \sum_{\gamma} \epsilon^{\nu,\gamma} \epsilon^{\gamma,\alpha} \right] \\
&= (q_d^{-1})^2 \sum_{\alpha,\gamma} (\epsilon^{\alpha,\gamma})^2 + q_f^{-1} q_d^{-1} \sum_{\alpha,\gamma,\nu} \epsilon^{\nu,\gamma} \epsilon^{\gamma,\alpha} - q_f^{-1} q_d^{-1} \sum_{\alpha,\gamma} (\epsilon^{\alpha,\gamma})^2 + q_f^{-1} q_d^{-1} \sum_{\alpha,\gamma,\delta} \epsilon^{\alpha,\gamma} \epsilon^{\delta,\alpha} \\
&- q_f^{-1} q_d^{-1} \sum_{\alpha,\gamma} (\epsilon^{\alpha,\gamma})^2 + (q_f^{-1})^2 \sum_{\alpha,\nu} \sum_{\gamma,\delta} \epsilon^{\nu,\gamma} \epsilon^{\delta,\alpha} - (q_f^{-1})^2 \sum_{\alpha,\gamma,\delta} \epsilon^{\alpha,\gamma} \epsilon^{\delta,\alpha} - (q_f^{-1})^2 \sum_{\alpha,\nu,\gamma} \epsilon^{\nu,\gamma} \epsilon^{\gamma,\alpha} \\
&+ (q_f^{-1})^2 \sum_{\alpha,\gamma} (\epsilon^{\alpha,\gamma})^2 = [(q_d^{-1})^2 - 2q_f^{-1}q_d^{-1} + (q_f^{-1})^2] \sum_{\alpha,\gamma} (\epsilon^{\alpha,\gamma})^2 + (q_f^{-1})^2 \left(\sum_{\alpha,\gamma} \epsilon^{\alpha,\gamma} \right)^2 \\
&+ [2q_f^{-1}q_d^{-1} - 2(q_f^{-1})^2] \sum_{\alpha,\gamma,\delta} \epsilon^{\alpha,\gamma} \epsilon^{\gamma,\delta}.
\end{aligned}$$

Donde,

$$\text{Tr}[(\mathbf{q}^{-1}\boldsymbol{\epsilon})^2] = (q_d^{-1} - q_f^{-1})^2 \sum_{\alpha,\nu} (\epsilon^{\alpha,\nu})^2 + 2q_f^{-1}(q_d^{-1} - q_f^{-1}) \sum_{\alpha,\gamma,\delta} \epsilon^{\alpha,\gamma}\epsilon^{\gamma,\delta} + (q_f^{-1})^2 \left(\sum_{\alpha,\gamma} \epsilon^{\alpha,\gamma} \right)^2, \quad (\text{D.1})$$

onde q_d^{-1} e q_f^{-1} denotam os elementos da diagonal e fora da diagonal, respectivamente, da matriz inversa \mathbf{q}^{-1} (equações (3.45) e (3.46)), ou seja

$$q_d^{-1} = \frac{q_0 - 2q}{(q_0 - q)^2}. \quad (\text{D.2})$$

e

$$q_f^{-1} = \frac{-q}{(q_0 - q)^2}. \quad (\text{D.3})$$

Referências Bibliográficas

- [1] K. Binder and A. P. Young. Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions. *Rev. Mod. Phys.*, 58(4):801–, October 1986.
- [2] S F Edwards and P W Anderson. Theory of spin glasses. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 5:965, 1975.
- [3] Scott Kirkpatrick and David Sherrington. Infinite-ranged models of spin-glasses. *Phys. Rev. B*, 17(11):4384–, June 1978.
- [4] A. Crisanti and H.J. Sommers. The spherical p-spin interaction spin glass model: the statics. *Z. phys. B condensed matter*, 87:341–354, 1992.
- [5] T. Obuchi, H. Nishimori, and D Sherrington. Phase diagram of the p-spin-interacting spin glass with ferromagnetic bias and transverse field in the infinite-p limit. *Journal of the Physical Society of Japan*, 76:054002–1, 2007.
- [6] Pedro Castro Menezes and Alba Theumann. Quantum spherical spin glass: Supersymmetry and annealing. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 75(2):024433, 2007.
- [7] T. H. Berlin and M. Kac. The spherical model of a ferromagnet. *Phys. Rev.*, 86(6):821–, June 1952.
- [8] A Theumann. Superalgebra and the spherical model of a spin glass. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 20(1):25, 1987.
- [9] David Sherrington and Scott Kirkpatrick. Solvable model of a spin-glass. *Phys. Rev. Lett.*, 35(26):1792–, December 1975.

- [10] Prabodh Shukla and Surjit Singh. Classical and quantum spherical models of spin-glasses: A complete treatment of statistics and dynamics. *Phys. Rev. B*, 23(9):4661–, May 1981.
- [11] R. P. Feynman and A. R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill, 1965.
- [12] J. W. Negele and H. Orland. *Quantum many-particle systems*. Addison Wesley, 1988.
- [13] J. de Almeida and D. Thouless. Stability of the sherrington kirkpatrick solution of a spin glass model. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 11(5):983, 1978.
- [14] G. Parisi. Infinite number of order parameters for spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 43(23):1754–, December 1979.
- [15] J. Ye, S. Sachdev, and N. Read. Solvable spin glass of quantum rotors. *Phys. Rev. Lett.*, 70(25):4011–, June 1993.
- [16] Silvio Salinas. *Introdução à Física Estatística*. EdUSP, 1997.
- [17] C. De Dominicis. *Random Fields and Spin Glasses*. Cambridge University Press, 2006.
- [18] Do-Hyun Kim and Jong-Jean Kim. Infinite-range ising spin glass with a transverse field under the static approximation. *Phys. Rev. B*, 66(5):054432–, August 2002.
- [19] T. K. Kopec and R. Pirc. Quantum spherical description of an ising spin glass in a transverse field. *Phys. Rev. B*, 55(9):5623–, March 1997.
- [20] J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless, and Raymund C. Jones. Spherical model of a spin-glass. *Phys. Rev. Lett.*, 36(20):1217–, May 1976.
- [21] Th. M. Nieuwenhuizen. Exactly solvable model of a quantum spin glass. *Phys. Rev. Lett.*, 74(21):4289–, May 1995.
- [22] Th. M. Nieuwenhuizen. Exactly solvable quantum magnets and spin glasses. *Physica B: Condensed Matter*, 206-207:122–124, February 1995.
- [23] Thomas Vojta. Quantum version of a spherical model: Crossover from quantum to classical critical behavior. *Phys. Rev. B*, 53(2):710–, January 1996.

- [24] Yuhai Tu and Peter B. Weichman. Quantum spherical models for dirty phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, 73(1):6–9, July 1994.
- [25] E. Boyce, W. Diprima, and C. Richard. *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno*. LTC, 1996.
- [26] T. Castellani and A. Cavagna. Spin-glass theory for pedestrians. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 5:12, May 2005.
- [27] T. Aspelmeier and M. A. Moore. Generalized bose-einstein phase transition in large-m component spin glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 92(7):077201–, February 2004.
- [28] Alba Theumann and Vilarbo da Silva Jr. Condensation in the quantum spherical spin-glass. *Physics Letters A*, 375:1493–1495, 2011.
- [29] A. Bray and A. Moore. Replica theory of quantum spin glasses. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 13:L655, 1980.
- [30] D. J. Gross and M. Mezard. The simplest spin glass. *Nuclear Physics*, page 431, 1984.
- [31] B. Derrida. Random-energy model: An exactly solvable model of disordered systems. *Phys. Rev. B*, 24(5):2613, sep 1981.
- [32] Elon Lages Lima. *Meu Professor de Matemática e Outras Histórias*. SBM, 1991.
- [33] Leticia F. Cugliandolo, D. R. Grempel, and Constantino A. da Silva Santos. Imaginary-time replica formalism study of a quantum spherical p-spin-glass model. *Phys. Rev. B*, 64(1):014403–, June 2001.
- [34] J. R. L. de Almeida. Magnetic properties of the antiferromagnetic random energy model. *phys. stat. sol. (b)*, 209(1):153–159, 1998.