

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

**VIDRO DE SPINS COM CAMPO TRANSVERSO E
COM QUEBRA DE SIMETRIA DE RÉPLICAS***

Eduardo M. M. Santos

Tese realizada sob orientação da Profa. Alba Theumann e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS, em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Ciências.

* Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico CNPq.

AGRADECIMENTOS

Agradeço, principalmente o meu pai (in memoriam) e a mãe Miriam que sempre acreditaram e incentivaram-me para superar meus limites.

Agradeço especialmente, a professora Alba Theumann pelo ensinamento e orientação durante quatro anos.

Aos grandes amigos Fonseca e Cláudia por ter me ajudado na redação da tese.

Ao pessoal da sala m-201, pelas conversas e dicas.

Aos professores Rubens Erichsen Júnior, Marco Aurélio Idiart e Walter K. Theumann pela grande ajuda e pelas dicas.

Aos funcionários do IF.

Ao Dr. Paulo Afonso Rebelo pela dedicação ao meu tratamento de saúde.

Resumo

Estudamos vidros de spin de Ising de alcance infinito com campo transverso. A função de partição foi calculada no formalismo da integral funcional com operadores de spins na representação fermiônica e dentro da aproximação estática e na primeira etapa de quebra de simetria de réplicas da teoria de Parisi onde o conjunto de n réplicas é dividido em K blocos de m elementos. Obtivemos uma expressão para energia livre, entropia e energia interna para dois modelos: o modelo de quatro estados onde o operador S_i^z tem dois autovalores não físicos que são suprimidos por um vínculo no modelo de dois estados. A temperatura crítica em função do campo transverso, isto é $T_c(\Gamma)$, para ambos os modelos, diminui quando Γ cresce até atingir um valor crítico Γ_c . Fizemos também estudo numérico para os parâmetros de ordem, energia livre, entropia, energia interna e diagrama de fase com o parâmetro m fixo. Em ambos os modelos, a fase de vidros de spins é instável. Nosso trabalho é diferente da teoria de Parisi, onde m é dependente da temperatura. Na segunda parte da tese, analisamos vidros de spin com campo transverso na teoria de C. De Dominicis et. al. para o modelo de dois estados e o modelo de quatro estados. Calculamos energia livre, a temperatura crítica $T_c(\Gamma)$, determinamos o campo crítico e obtemos o diagrama de fase numericamente para ambos os modelos.

Abstract

We studied Ising spin glass with infinity range in a transverse field. The partition function was calculated in functional integral formalism with spin operators in the fermionic representation with the static approximation in one step replicas-symmetric breaking of the Parisi theory, where the set of the n replicas is divided in K blocks of m elements. We get an expression for the free energy, entropy and internal energy for two models: the four states model, where the S_i^z operator has two unphysical eigenvalues that are vanishing by constraint in two states model. In both models decreases the critical temperatures $T_c(\Gamma)$ when Γ increases until it reaches a critical value Γ_c . We do also numerical studies for the order parameters, free energy, entropy, internal energy and phase diagram all with the parameter m fixed. In both models, the spin glass phase is instable. Our work is different than the Parisi theory, where m is temperature dependent. In the second part of the thesis, we analyse the spin glass of infinite range with transverse field in C. De Dominicis et. al. theory for the four states models and the two states models. We calculate the free energy, the critical temperature $T_c(\Gamma)$ and we get the phase diagram numerically for both models.

Sumário

1	Introdução	9
1.1	Definição	10
1.2	Histórico	10
1.2.1	Histórico de vidro de spins	10
1.2.2	Origem da teoria de vidro de spins em um campo transverso	11
1.2.3	Motivação	12
1.3	Introdução da teoria de vidro de spins	13
1.3.1	Fenomenologia do vidro de spins	13
1.3.2	Teoria de RKKY	14
1.3.3	Parâmetro de ordem	15
1.3.4	Método de Ponto de Sela	17
1.4	Modelo de Sherrington Kirkpatrick	18
1.5	Teoria de Parisi	25
1.5.1	Primeiro estágio de quebra de simetria de réplicas: . . .	25
1.6	Técnica de integral funcional	29
1.6.1	Variável de Grassmann	29
1.6.2	Estados coerentes de Férmions	31
1.6.3	Formulação da integral funcional	33
1.7	Vidro de spins em um campo transverso	36
1.7.1	Teoria de vidro de spins em um campo transverso . . .	36
1.7.2	Primeira etapa de quebra de simetria de réplicas no vidro de spins em um campo transverso.	38
1.7.3	Vidro de spins em um campo transverso com simetria de réplicas.	44
2	Vidro de spins em um campo transverso I: Teoria de Parisi.	53
2.1	Cálculo da energia livre para o modelo de dois estados (2S) e o modelo de quatro estados (4S).	53
2.2	Soluções das equações do ponto de sela da energia livre para ambos os modelos:	58

2.3	Entropia, energia interna.	59
2.4	Determinação da temperatura crítica T_c e o campo transverso crítico Γ_c	61
2.5	Linha de Almeida Thouless.	63
2.6	Resultados numéricos.	68
3	Vidro de spins em um campo transverso II: Teoria de C. De Dominicis e T.Garel.	77
3.1	Teoria	77
3.2	Cálculo da energia livre.	78
3.3	Equações do ponto de sela.	84
3.4	Cálculo da temperatura crítica e campo transverso crítico e diagrama de fase.	85
4	Comparação dos resultados e conclusão	91
4.1	Comparação dos resultados da primeira parte do trabalho: . .	91
4.1.1	Comparação dos resultados do nosso trabalho com os resultados de Goldschmidt et. al. [4].	91
4.1.2	Comparação do nosso trabalho com Alba Theumann et. al. [3].	92
4.1.3	Comparação do nosso λ_{AT} com Alba Theumann et. al. [3].	93
4.2	Comparação dos resultados da segunda parte do trabalho: . .	94
4.2.1	Comparação do nosso resultado da energia livre com o resultado da teoria de C. De Dominicis e T.Garel: . . .	94
4.3	Discussão e conclusão.	96
4.3.1	Discussão sobre a primeira parte do trabalho:	96
4.3.2	Discussão dos resultados da seção 2.6.	96
4.3.3	Discussão sobre a segunda parte do trabalho.	99
4.3.4	Considerações finais.	99
5	Apêndices	101
5.1	Apêndice A:	101
5.1.1	Parametrização de Parisi.	101
5.2	Apêndice B:	103
5.2.1	Transformada de Fourier:	103
5.3	Apêndice C	107
5.3.1	Cálculo da integral funcional.	107
5.4	Apêndice D	110
5.4.1	Cálculo detalhado na determinação da temperatura crítica.	110

5.5	Apêndice E	117
5.5.1	Cálculo detalhado na determinação da temperatura crítica para $\Gamma = 0$ para o modelo de dois estados (2S) e o modelo de quatro estados (4S).	117
5.5.2	Cálculo detalhado na determinação do campo crítico Γ_c e uma relação $T_c(\Gamma)$ perto do campo crítico.	120
5.6	Apêndice F	122
5.6.1	Cálculo da média da função de partição.	122
5.6.2	Cálculo detalhado da introdução das soluções do ponto de sela na média da função de partição.	125
5.7	Apêndice G	127
5.7.1	Cálculo das médias.	127

Capítulo 1

Introdução

Vidro de spins é um tópico da física da matéria condensada muito interessante que surgiu na primeira metade da década de 1970. 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 a um consenso das propriedades fundamentais deste sistema. Portanto, a teoria de vidro de spins é uma área muito ativa na física e sendo um campo aberto para novas idéias e conceitos, novos experimentos ainda devem ser feitos.

Neste capítulo introdutório recordaremos a história de vidro de spins com alguns trabalhos importantes. Depois, vamos expor a teoria de vidro de spins e revisar o modelo de Sherrington Kirkpatrick [1], a teoria de Parisi [2] e o vidro de spins em um campo transverso.

A seguir vamos fazer uma recapitulação das principais teorias de vidro de spins. Na seção 1.1, vamos explicar o que é vidro de spins; na seção 1.2 apresentaremos a história do vidro de spins e a nossa motivação para a tese; a introdução da teoria de vidro de spins a fim de explicar a fase de vidro de spins, será abordada na seção 1.3; na seção 1.4, revisaremos o modelo de Sherrington Kirkpatrick [1] apresentado em importante artigo que é a base de toda a teoria de vidro de spins; outra teoria muito importante é a teoria de Parisi, que será apresentada na seção 1.5; na seção 1.6, vamos explicar como a função de partição definida como traço do operador $e^{-\beta\hat{H}}$ se converte em uma função de partição expressa em uma integral funcional com variáveis de Grassmann; na seção 1.7 vamos apresentar a aplicação experimental e a teoria de vidro de spins em um campo transverso. Na parte teórica revisaremos o artigo de Alba Theumann et al [3] e o artigo de Y. Goldschmidt et al. [4]. Esses artigos são a base do desenvolvimento da tese, como veremos na seção 1.7. No segundo capítulo, dedicado ao desenvolvimento da tese,

serão feitos cálculos analíticos para obter a energia livre e outras quantidades termodinâmicas. No terceiro capítulo apresentaremos o desenvolvimento da teoria de C. De Dominicis et. al. [5]. O quinto capítulo é dedicado à comparação dos resultados e à conclusão.

1.1 Definição

Afinal, o que é vidro de spins? A expressão “vidro de spins” vem do inglês “spins glass” e o termo “vidro” indica um sólido que não apresenta regularidade cristalina. Vidro de spins não é vidro, mas sim são redes de spins irregulares. Mais formalmente, vidro de spins é uma desordem congelada em baixas temperaturas. Para produzir este estado vidro de spins são necessários dois ingredientes: devem existir competições entre interações de spins diferentes, no sentido de não existir configuração de spins favorável para todas as interações (isto é chamado de “frustração”), e essas interações devem ser randômicas.

1.2 Histórico

1.2.1 Histórico de vidro de spins

V. Cannella e J.A. Mydosh, em 1972 [6], fizeram um estudo experimental aprofundado com ligas de AuFe com diferentes concentrações de impurezas magnéticas de Fe e provaram a existência de vidro de spins. As medidas experimentais de suscetibilidade magnéticas com baixos campos magnéticos apresentaram um resultado típico como um cúspide bem definido indicando-o. Mais tarde, em 1975, surgiu o primeiro modelo teórico de P. W. Anderson e S. F. Edwards [7], também chamado de teoria de E.A., que explica com sucesso a teoria de vidro de spins. Nesta teoria, as energias de acoplamento J_{ij} são variáveis randômicas e o alcance de interação pode ser variado. O artifício de réplica foi usado para auxiliar a análise física de toda a desordem temperada. A teoria E.A. foi a “pedra inicial” da teoria de vidro de spins que até hoje é uma área ativa na física teórica. No mesmo ano, D. Sherrington e S.Kirkpatrick [1] elaboraram outra teoria que chamamos teoria do S.K. Esta teoria descreve vidro de spins com interação de longo alcance com variância $\langle J_{ij}^2 \rangle = \frac{J^2}{N}$ que independe de i e j . D. Sherrington et. al. se basearam no modelo de Ising com spins clássicos, empregando o artifício de réplicas e a teoria de simetria de réplicas para calcular a energia livre e outras quantidades termodinâmicas. A teoria de S.K concorda razoavelmente com os resultados experimentais. Porém, ela falha na temperatura $T = 0$, como, por

exemplo, no resultado da entropia negativa com $S \simeq -0.16$. Embora estas falhas persistam, esta teoria ainda é muito usada como referência pelos físicos teóricos para estudar vidro de spins e outras áreas, por exemplo, em redes neurais. Em 1978, J.R.L. Almeida e D.J Thouless [8] demonstraram que a solução de simetria de réplicas era instável abaixo da temperatura crítica. Por este motivo, foram introduzidos vários modelos de quebra de simetria de réplicas (Bray e Moore, Blandin, De Dominicis) [9, 10, 5, 2, 12], em busca de uma solução estável e entropia positiva. A primeira proposta de quebra de simetria de réplicas foi de A. Blandin [10] que obteve um resultado melhor para a entropia: $S = -0.08$. A. J. Bray e M. A. Moore [9] propuseram outro modelo de quebra de simetria de réplicas mas com resultados muito diferentes dos resultados obtidos por A. Blandin et al [10],[11]. Finalmente G. Parisi [2], [12] introduziu um modelo de quebra de simetria de réplicas que é a generalização da proposta de A. Blandin e esse é um modelo mais aceito na atualidade da física teórica. Por exemplo, na primeira etapa da quebra de simetria de réplicas na referência [2] obteve-se um aumento significativo da entropia para $S \sim -0.01$. E por outro lado C. De Dominicis e T. Garel publicaram um artigo [5] que também generaliza a proposta de A. Blandin, mas esta teoria é mais simples que a teoria de Parisi, com o resultado da entropia $S=0$ quando $T=0$. Em 1980 A. J. Bray e M.A. Moore [13] estudaram vidro de spins quânticos análogos ao modelo S.K. com Hamiltoniano de Heisenberg. Usando a técnica de integral funcional, obtiveram a média de energia livre no limite de alta temperatura e provaram que a flutuação quântica diminui a temperatura crítica mas não destrói a fase de vidro de spins. Mais tarde, em (1984), A. Theumann e M.V. Gusmão [14, 36] estudaram vidro de spins no modelo de Ising com operadores de spins quânticos. Eles também usaram a técnica de integral funcional com os operadores de spins que são representados pela combinação bilinear de férmions e dentro da transformada de Fourier e na aproximação estática obtiveram resultados semelhantes ao modelo S.K; este trabalho foi estendido ao modelo de Heisenberg [32].

1.2.2 Origem da teoria de vidro de spins em um campo transverso

Na década de 80, surgiram as primeiras teorias de vidro de spins com campo transverso. H. Yshii e T. Yamamoto (1985) [18] foram os primeiros a elaborar uma teoria de vidro de spins com campo transverso, usando o Hamiltoniano da teoria T.A.P. (T.A.P. é uma abreviação da teoria feita por D.J. Thouless P.W. Anderson e Palmer [19]) e o campo transverso como perturbação e provaram que a presença do campo transverso diminui a temperatura crítica.

Uma aproximação diferente foi feita por Thirumalai et al (1989) [20] que usaram o Hamiltoniano de Ising com campo transversal, a fórmula generalizada de Trotter-Suzuki [21], o método de réplicas e aproximação estática para calcular a energia livre em um sistema randômico congelado. Eles provaram que o campo crítico destrói completamente a ordem de vidro de spins e demonstraram que a solução de simetria de réplicas é estável em uma pequena região na fase de vidro de spins no diagrama da temperatura-campo. Porém Buttner e Usadel [22] demonstraram que a fase de vidro de spins era instável na solução de simetria de réplica mesmo sem aproximação estática. Por essa razão, Y. Y. Goldschmidt et al (1990) [4] introduziram a primeira etapa de quebra de simetria de réplicas de Parisi (1-QSR) no sistema de Ising com campo transversal e obtiveram a energia livre maior que na teoria de simetria de réplicas. Alba Theumann et al (2002) [3] fizeram um estudo mais completo com simetria de réplicas da teoria de vidro de spins no campo transversal estendendo-a a dois modelos: modelo de dois estados (2S) e de quatro estados (4S) [23]. Eles usaram a técnica de integral funcional para operadores de spins quânticos não diagonais na representação fermiônica e na aproximação estática para calcular a energia livre. Os resultados obtidos no modelo de 2S são iguais aos resultados de Thirumalai et al [20] e na ausência do campo transversal os resultados são iguais ao modelo S.K[1]. Os resultados obtidos no modelo de 4S e sem o campo transversal são iguais aos obtidos por Alba Theumann et. al. [14].

1.2.3 Motivação

Então, nos últimos 30 anos, numerosos artigos publicados sobre vidro de spins têm focalizado na solução do grande problema que ainda persiste: a entropia negativa e a instabilidade na fase de vidro de spins. Felizmente, a solução de Parisi proporcionou grande melhora na solução deste tipo de problema, mas ainda não é definitiva, porque é muito difícil calcular as quantidades termodinâmicas tanto nas simulações numéricas ou analiticamente na temperatura $T = 0$. Nós nos concentraremos em um estudo aprofundado de dois artigos importantes: o artigo Y. Goldschmidt et al [4] e o de Alba Theumann et. al. [3]. A pergunta é, quais são as implicações nos resultados da energia livre e nos parâmetros de ordem se aplicarmos o primeiro estágio de quebra de simetria de réplicas no artigo de Alba Theumann et al? Para responder esta pergunta, desenvolveremos o trabalho estendendo o último artigo, aplicando o primeiro estágio de quebra de simetria de réplicas onde o conjunto de n elementos é dividido em K blocos de m elementos. m é também um parâmetro de otimização e será fixo porque é mais simples de resolver numericamente, diferente do que foi feito por G. Parisi onde a energia livre era otimizada pelo

parâmetro de otimização $m(T)$ dependente da temperatura. No decorrer do trabalho esperamos obter os resultados da energia livre, os parâmetros de ordem e outras quantidades termodinâmicas. Também faremos cálculos numéricos dos resultados analíticos. E também vamos comparar nossos resultados com os artigos anteriores e discutí-los. Na segunda parte do trabalho vamos experimentar outro modelo de quebra de simetria de réplicas proposto por C. De Dominicis et. al. [5]. A proposta de C. De Dominicis et. al. é muito interessante porque tem um resultado da entropia zero em $T = 0$ e é mais fácil de calcular do que a teoria de Parisi. Ficamos então motivados para pôr em prática a teoria de C. De Domincis no trabalho de Alba Theumann et al. [3] e ver quais são as implicações desta teoria. E finalmente comparar os resultados obtidos nas duas partes da tese.

1.3 Introdução da teoria de vidro de spins

1.3.1 Fenomenologia do vidro de spins

A idéia básica no vidro de spins [26] é que os momentos magnéticos atômicos são distribuídos aleatoriamente no sólido que congela abaixo de uma temperatura T_g , de modo que suas orientações são distribuídas ao acaso. Este caso está ilustrado na figura1 abaixo:

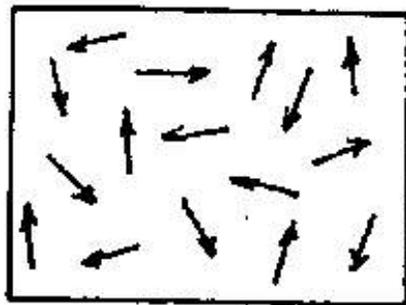


Figura 1: Os spins magnéticos estão em posições e orientações randômicas.

A frustração é consequência da competição de interações ferro e antiferromagnética e impede que as energias de todos os pares de spins do sistema sejam simultaneamente minimizadas. O estado fundamental de um sistema frustrado é maior que o estado não frustrado correspondente e é formado por um grande número de configurações não equivalentes ou quasi-degeneradas. Ao ser excitado, o sistema pode alterar a configuração global de 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 à metaestabilidade e aos efeitos irreversíveis característicos de vidro de spins. Um exemplo disso é o resultado da medida experimental da susceptibilidade magnética D.C. ilustrado na figura 2 abaixo:

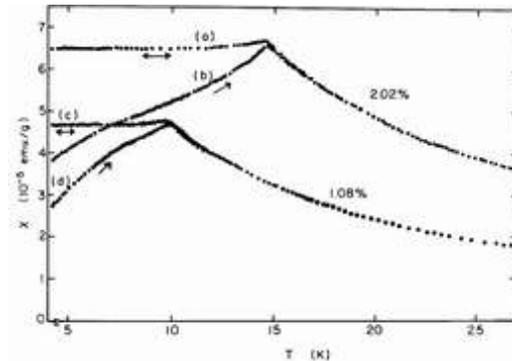


Figura 2: Medida de susceptibilidade com campo magnético aplicado constante para duas ligas de CuMn com concentrações 1,08% e 2,02% de Mn. Curvas (a) e (c) são obtidas pela medida de resfriamento com campo (FC), (b) e (d) são resultados de experimento de campo nulo (ZFC); de Nagato et. al. [24]

Susceptibilidade magnética D.C. mede a resposta da amostra (ou cristal) pelo campo magnético externo estático (o campo é mantido constante em função do tempo). Esta medida é feita aplicando-se um campo magnético estático no cristal que magnetiza-o possibilitando medir a susceptibilidade magnética. Então um cristal exhibe vidro de spins, e os efeitos de susceptibilidade são irreversíveis quando ele é resfriado com ou sem campo magnético externo. A susceptibilidade obtida pelo resfriamento do sistema com campo (FC: resfriamento com campo) resulta em um valor maior do que o obtido pelo primeiro resfriamento campo nulo (ZFC: resfriamento com campo zero), ver na figura acima.

1.3.2 Teoria de RKKY

Os sólidos não magnéticos (Cu, Au etc...) [27] com pequena quantidade de impurezas de metais magnéticos (Fe, Mn etc...) tem implicações importantes no acoplamento de troca entre o íon e o elétron de condução. O gás de elétron de condução é magnetizado pela presença do íon magnético com a dependência espacial conforme a figura 3:

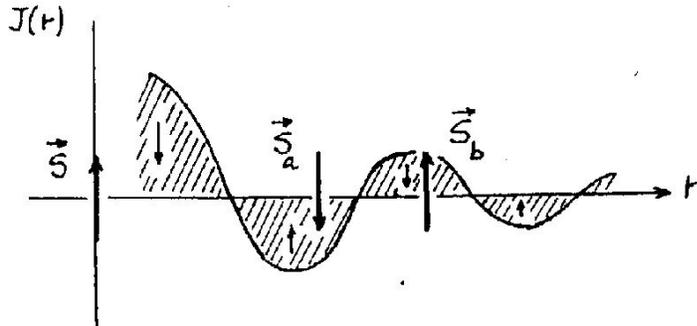


Figura 3: A distância entre íons magnéticos favorece o alinhamento antiparalelo de spins como S ou -S

Esta magnetização causa uma interação indireta entre dois íons magnéticos, porque um segundo íon percebe a magnetização induzida pelo primeiro íon. Esta interação é conhecida como interação de RKKY. É possível demonstrar que o gás de elétrons age como mediador da interação entre dois íons de spins localizados, de modo que se pode efetivamente descrever o comportamento do sistema magnético como um todo com um hamiltoniano de Heisenberg:

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \left(\vec{R}_{ij} \right) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.1)$$

onde os coeficientes de troca efetivos, resultantes da polarização do gás de elétrons, são funções oscilantes entre íons magnéticos:

$$J(r) \sim \frac{\cos(2k_F r)}{r^3} \quad (1.2)$$

onde k_F é o vetor de onda de Fermi. Conforme a figura 3, tal integral de troca pode favorecer o alinhamento paralelo ou antiparalelo de dois spins atômicos, dependendo da distância que os separa r . Então os íons magnéticos são distribuídos em posições randômicas R_i e J_{ij} é uma função de $(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$ que oscila em sinal com a separação r dando origem às interações competitivas como frustração que dão origem ao comportamento de vidro de spins.

1.3.3 Parâmetro de ordem

É importante ter uma noção básica do que é um parâmetro de ordem [28]. Um estado de quebra de simetria é caracterizado pelo valor não nulo deste parâmetro. Por exemplo, no ferromagneto, acima da temperatura crítica há simetria nos spins up e down na ausência do campo, abaixo da temperatura

crítica a simetria nos spin up e down é quebrada dando origem à magnetização:

$$\vec{m} = \frac{1}{N} \sum_i \langle \vec{S}_i \rangle$$

onde $\langle \dots \rangle$ é a média térmica.

O parâmetro de ordem de vidro de spins não é um parâmetro de ordem da magnetização. Na verdade, no vidro de spins, a magnetização espontânea local, isto é $m_i = \langle \vec{S}_i \rangle \neq 0$, é diferente que zero, mas a magnetização média global é nula

$$\vec{m} = \frac{1}{N} \sum_i \langle \vec{S}_i \rangle = 0.$$

Então o estado de vidro de spins apresenta "desordem congelada" porque os momentos magnéticos locais médios são congelados.

Claramente precisamos procurar momentos de ordem mais alta (momento de ordem um é $\langle \vec{S}_i \rangle$, momento de mais alta ordem é $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \cdot \vec{S}_k \dots \rangle$). Começamos a considerar uma possível espécie de segundo momento para obter uma maneira diferente de quebra de simetria.

Se recordarmos que a quebra de simetria é de natureza essencialmente dinâmica, o mais natural parâmetro de ordem para ser considerado foi introduzido originalmente por E.A. [7, 28]:

$$q_{EA} = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} [\langle S_i(t_0) S_i(t_0 + t) \rangle]_{av}$$

onde $[\dots]_{av}$ é a média de todas as variáveis aleatórias da teoria e $\langle \dots \rangle$ é a média térmica. Isto deverá ser claramente zero (no campo externo nulo) se o sistema é simétrico, e deverá ser não zero se isto está aprisionado em uma única fase no sistema infinito. Assim, o sistema infinito nunca pode escapar do vale, então q_{EA} mede o quadrado médio de um único vale da magnetização espontânea local. Isto é,

$$q_{EA} = \left[\sum_a P_a (m_i^a)^2 \right]_{av}$$

onde m_i^a é a magnetização espontânea local com estado a no sítio i e sua energia livre F_a e P_a é a função peso de Boltzmann que é

$$P_a = \frac{e^{-\beta F_a}}{\sum_a e^{-\beta F_a}},$$

onde β é o inverso da temperatura.

Assumindo uma média apropriada, nós podemos também escrever:

$$q_{EA} = \frac{1}{N} \sum_a P_a \sum_i (m_i^a)^2.$$

Nós introduzimos o parâmetro de ordem de mecânica estatística e denotamos isto simplesmente pelo q . Isto é dado por:

$$q = \left[\left\langle \overline{S_i^2} \right\rangle \right]_{av} = [m_i^2]_{av} = \left[\left(\sum_a P_a m_i^a \right)^2 \right]_{av} = \left[\sum_{ab} P_a P_b m_i^a m_i^b \right]_{av}$$

ou equivalente,

$$q = \frac{1}{N} \sum_i \left[\sum_{ab} P_a P_b m_i^a m_i^b \right]_{av}$$

Podemos ver imediatamente que q difere de q_{EA} e tem uma contribuição "intervale" (se temos fase múltipla).

1.3.4 Método de Ponto de Sela

O método de ponto de sela é largamente usado para estudar vidro de spins, ferromagnetismo, redes neurais e problemas de otimização. Aqui vamos explicá-lo de forma muito simplificada com o objetivo de ter uma idéia de como é empregado.

Queremos calcular a seguinte integral:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp(-Ng(s)),$$

onde I é um resultado da integração de uma variável. Suponha que a integral não pode ser calculada exatamente, mas quando $N \rightarrow \infty$ a integral pode ser calculada de forma aproximada, pelo método de ponto de sela. Este método consiste em maximizar I , para isso é necessário minimizar $g(s)$:

$$\left. \frac{dg(s)}{ds} \right|_{s=s_0} = 0.$$

A solução do ponto de sela $s = s_0$ extremiza a função g e I e obtêm um resultado aproximado para integral:

$$I = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp(-Ng(s)) \approx \exp(-Ng(s_0))$$

Mas a solução $s = s_0$ não diz nada a respeito de se este extremo tem g máximo ou mínimo. Para isto é necessário calcular a derivada segunda

$$h = \left. \frac{d^2 g(s)}{ds^2} \right|_{s=s_0},$$

se h é positiva então $g(s_0)$ é mínimo e se h é negativa então $g(s_0)$ é máximo. Para o cálculo satisfatório do ponto de sela é necessário $g(s_0)$ mínimo.

Na mecânica estatística, I corresponde à função de partição e a solução do ponto de sela s_0 corresponde ao parâmetro de ordem (por exemplo s_0 corresponde a magnetização \tilde{m} no ferromagnetismo). A energia livre f pode ser calculada através da função de partição. Portanto, se a derivada segunda de f é positiva o sistema é termodinamicamente estável ou, se é negativa, é termodinamicamente instável. É claro que este método de ponto de sela aplicável nos vidro de spins é bem mais complexo.

1.4 Modelo de Sherrington Kirkpatrick

Nesta teoria [1, 28], na fase chamada vidro de spins, em que os momentos magnéticos são congelados na orientação do equilíbrio e não têm média de ordem de longo alcance, uma maneira de definir este estabelecimento matematicamente diz que $\left\langle \left| \langle \vec{S}_i \rangle \right|^2 \right\rangle_d \neq 0$ mas $\left\langle \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \langle \vec{S}_j \rangle \right\rangle \rightarrow 0$ como $\vec{R}_i - \vec{R}_j \rightarrow \infty$, onde $\langle \rangle$ refere-se à média térmica e $\langle \rangle_d$ refere-se à média espacial.

D. Sherrington e S.Kirkpatrick introduziram um sistema com spins clássicos, onde o spin tem componentes $\vec{S}_i = (0, 0, S_i)$ com autovalores $S = \pm 1$, tornando este problema bastante simples porque os operadores de spins são diagonais e comutam. Como os operadores de spins tem um só componente, o Hamiltoniano de Heisenberg se reduz ao Hamiltoniano de Ising:

$$H = - \sum_{(i,j)} J_{ij} S_i S_j \quad (1.3)$$

Onde a soma estende a todos os pares de partículas de N sítios de rede sem dupla contagem. As constantes do acoplamento J_{ij} são distribuídas de acordo com a probabilidade Gaussiana centrada:

$$P(J_{ij}) = \sqrt{\frac{N}{2\pi J^2}} \exp\left(-\frac{J_{ij}^2 N}{2J^2}\right) \quad (1.4)$$

Através do Hamiltoniano (1.3) podemos escrever a função de partição:

$$Z = Tr \exp \left[\beta \sum_{(i,j)} J_{ij} S_i S_j \right] \quad (1.5)$$

Não podemos calcular Z por causa de uma grandeza física aleatória J_{ij} . Para isso devemos fazer uma média de todos os sistemas físicos aleatórios. Porém ainda não podemos calcular a média da função de partição, porque Z não é uma grandeza extensiva.

Felizmente, podemos calcular a média da energia livre usando a distribuição de probabilidade dada pela equação (1.4):

$$f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N} \langle \log(Z) \rangle_{J_{ij}} = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N} \int \prod_{(i,j)} dJ_{ij} P(J_{ij}) \ln(Z(J_{ij}))$$

onde $\langle \dots \rangle_{J_{ij}}$ é a média de todos os J_{ij} . Mas o cálculo da integral acima é muito difícil e este problema pode ser resolvido mais facilmente pelo método de réplicas. Este método consiste em n sistemas estritamente idênticos caracterizados pelo spin S_i^α . Assim, o problema é reduzido replicando o sistema n vezes, isto é $Z^1, Z^2 \dots Z^n$, onde n é inteiro, e depois é feita a continuação analítica para $n \rightarrow 0$ com a identidade:

$$\text{Log} Z = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n} \quad (1.6)$$

Conseqüentemente, a média da energia livre será:

$$\langle f \rangle = - \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} - 1}{\beta n N} \quad (1.7)$$

Sob este efeito, a média da função de partição é:

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} = \int \prod_{(i,j)} dJ_{ij} P(J_{ij}) (Z(J_{ij}))^n \quad (1.8)$$

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} = \int \prod_{(i,j)} dJ_{ij} P(J_{ij}) \prod_{\alpha=0}^n Tr \exp \left[\beta \sum_{(i,j)} J_{ij} S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} \right]$$

Calcula-se a integral, imediatamente temos:

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} = Tr \exp \left[\frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{(i,j)} \sum_{\alpha\beta} S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} S_{i,\beta} S_{j,\beta} \right]$$

mas

$$\begin{aligned}
\sum_{(i,j)} \sum_{\alpha\beta} S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} S_{i,\beta} S_{j,\beta} &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{\alpha,\beta} S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} S_{i,\beta} S_{j,\beta} - \frac{1}{2} \sum_{i=j} \sum_{\alpha,\beta} (S_{i,\alpha})^2 (S_{i,\beta})^2 \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{\alpha \neq \beta} S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} S_{i,\beta} S_{j,\beta} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{\alpha=\beta} S_{i,\alpha} S_{j,\alpha} S_{i,\beta} S_{j,\beta} - \\
&\quad \frac{1}{2} \sum_{i=j} \sum_{\alpha \neq \beta} (S_{i,\alpha})^2 (S_{i,\beta})^2 - \frac{1}{2} \sum_{i=j} \sum_{\alpha=\beta} (S_{i,\alpha})^4 - \\
&= \sum_{(\alpha,\beta)} \left[\sum_i S_{i,\alpha} S_{i,\beta} \right]^2 + \frac{1}{2} (nN^2 - n^2N)
\end{aligned}$$

onde $\sum_{(i,j)}$ indica a soma de pares de sítios i e j , o $\sum_{i,j}$ é a soma de todos os sítios i e j , e as somas de tipo $\sum_{i,j}$, $\sum_{(i,j)}$ e $\sum_{i>j}$ podem ser relacionadas:

$$\sum_{(i,j)} \dots = \sum_{i>j} \dots = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \dots$$

Então, no limite termodinâmico, $N \rightarrow \infty$, o termo n^2N é desprezado porque é muito menor que nN^2 e então a média da função de partição $\langle Z^n \rangle_{J_{ij}}$ pode também ser escrita assim:

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} = \exp \left[\frac{\beta^2 \tilde{J}^2 nN}{4} \right] Tr \exp \left\{ \frac{\beta^2 \tilde{J}^2}{2N} \sum_{(\alpha\beta)} \left[\sum_i S_{i,\alpha} S_{i,\beta} \right]^2 \right\}$$

e $J = \frac{\tilde{J}}{\sqrt{N}}$. É impossível calcular o traço da média da função de partição $\langle Z^n \rangle_{J_{ij}}$ na forma acima, mas, felizmente, é possível simplificá-lo com o processo de linearização também conhecido como transformação Hubbard-Stratonovich. A linearização é feita com o uso da identidade Gaussiana:

$$Exp \left[\frac{\lambda}{N} a^2 \right] = \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp \left(-\frac{Ny^2}{2} + ya\sqrt{2\lambda} \right) \quad (1.9)$$

Com auxílio da identidade (1.9) podemos escrever $\langle Z^n \rangle$ na forma linear:

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} = \exp \left[\frac{\beta^2 \tilde{J}^2 nN}{4} \right] \left(\sqrt{\frac{N}{2\pi}} \right)^n \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{(\alpha,\beta)} dQ_{\alpha\beta} Exp \left[-\frac{N}{2} \sum_{(\alpha\beta)} Q_{\alpha\beta}^2 \right]$$

$$Tr \exp \left[\beta \tilde{J} \sum_{(\alpha\beta)} \sum_i S_{i,\alpha} S_{i,\beta} Q_{\alpha\beta} \right]$$

Agora podemos fatorar o traço de sítio i , mas o resultado do traço será o mesmo para todos os índices i , ou seja, o traço independe de i e portanto:

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} = \exp \left[\frac{\beta^2 \tilde{J}^2 n N}{4} \right] \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{(\alpha,\beta)} dQ_{\alpha\beta} \text{Exp} [-N g(Q_{\alpha\beta})] \quad (1.10)$$

onde

$$g(Q_{\alpha\beta}) = \frac{1}{2} \sum_{(\alpha,\beta)} Q_{\alpha\beta}^2 - \log Tr \exp \left[\beta \tilde{J} \sum_{(\alpha\beta)} S_{\alpha} S_{\beta} Q_{\alpha\beta} \right]$$

$\langle Z^n \rangle$ está escrito na forma de integral de campos $Q_{\alpha\beta}$, porém não podemos calcular exatamente, mas sim de forma aproximada, pelo método de ponto de sela. Neste método, a integral é calculada maximizando $\langle Z^n \rangle_{J_{ij}}$ com

$$\frac{\partial \langle Z^n \rangle_{J_{ij}}}{\partial Q_{\alpha\beta}} \Big|_{Q_{\alpha\beta} = \tilde{Q}_{\alpha\beta}} = 0 \quad (1.11)$$

A primeira solução é trivial se $\tilde{Q}_{\alpha\beta} = 0$, no entanto, não há como encontrar todas as soluções de $\tilde{Q}_{\alpha\beta}$ não triviais para o máximo $\langle Z^n \rangle_{J_{ij}}$, porque existem $\frac{1}{2}n(n-1)$ equações para $\tilde{Q}_{\alpha\beta}$. Felizmente, o ansatz de simetria de réplicas nos permite encontrar soluções para $\tilde{Q}_{\alpha\beta}$ que supõe que $\tilde{Q}_{\alpha\beta} = q$. Calculando através da equação (1.11), obtemos o seguinte resultado:

$$Q_{\alpha\beta} = \beta \tilde{J} q = \beta \tilde{J} \langle S_{\alpha} S_{\beta} \rangle \quad (1.12)$$

A solução do ponto de sela (1.12) é a solução de simetria de réplicas, onde temos um parâmetro de ordem para vidro de spins $q = \langle S_{\alpha} S_{\beta} \rangle$.

Introduz-se (1.12) em (1.10) e obtemos um resultado aproximado da integral para $\langle Z^n \rangle_{J_{ij}}$:

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} \simeq \exp \left[\frac{\beta^2 \tilde{J}^2 n N}{4} - \frac{N \beta^2 \tilde{J}^2}{2} \sum_{(\alpha\beta)} q^2 + N \log Tr \exp \left[\beta^2 \tilde{J}^2 q \sum_{(\alpha\beta)} S_{\alpha} S_{\beta} \right] \right].$$

Note-se que q independe dos índices α e β , a soma é calculada facilmente,

$$\sum_{(\alpha\beta)} q^2 = \frac{1}{2}n(n-1)q^2 \simeq -\frac{n}{2}q^2,$$

e a soma

$$\sum_{(\alpha\beta)} S_\alpha S_\beta = \frac{1}{2} \left(\sum_\alpha S_\alpha \right)^2 - \frac{1}{2} \sum_\alpha (S_\alpha)^2 = \frac{1}{2} \left(\sum_\alpha S_\alpha \right)^2 - \frac{1}{2}n$$

Portanto, $\langle Z^n \rangle_{J_{ij}}$ pode ser escrito assim:

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} \simeq \exp \left[\frac{\beta^2 \tilde{J}^2 n N}{4} (1-q)^2 + N \log \text{Tr} \exp \left[\frac{\beta^2 \tilde{J}^2 q}{2} \left(\sum_\alpha S_\alpha \right)^2 \right] \right].$$

É necessário linearizar novamente o termo $\left(\sum_\alpha S_\alpha \right)^2$, usando a identidade (1.9):

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} \simeq \exp \left[\frac{\beta^2 \tilde{J}^2 n N}{4} (1-q)^2 + N \log \int Dz \text{Tr} \exp \left[z \beta \tilde{J} \sqrt{q} \sum_\alpha S_\alpha \right] \right]$$

onde

$$\int Dz = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{2}}.$$

Agora é possível calcular com facilidade o traço de S^α , onde S^α assume os valores ± 1 :

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} \simeq \exp \left[\frac{\beta^2 \tilde{J}^2 n N}{4} (1-q)^2 + N \log \int Dz \left(2 \cosh \left[z \beta \tilde{J} \sqrt{q} \right] \right)^n \right],$$

usamos a identidade $x^n \simeq n \text{Log} x + 1$ e portanto, podemos escrever $\langle Z^n \rangle$ na forma mais simples:

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} \simeq \exp \left\{ -nN \left[-\frac{\beta^2 \tilde{J}^2}{4} (1-q)^2 - \int Dz \text{Log} 2 \cosh \left[z \beta \tilde{J} \sqrt{q} \right] \right] \right\}. \quad (1.13)$$

Introduzindo este resultado em (1.7) e calculando-o nos limites $n \rightarrow 0$ e $N \rightarrow \infty$ finalmente obtemos o resultado para a densidade média da energia livre:

$$f = -\frac{\beta^2 \tilde{J}^2}{4} (1 - q)^2 - \int Dz \text{Log} 2 \cosh \left[z\beta\tilde{J}\sqrt{q} \right] \quad (1.14)$$

A energia livre é extremizada, calculando-se a equação do ponto de sela

$$\frac{\partial f}{\partial q} = 0$$

e a solução é

$$q = \int Dz \tanh^2 \left[z\beta\tilde{J}\sqrt{q} \right].$$

É possível calcular q em função da temperatura numericamente:

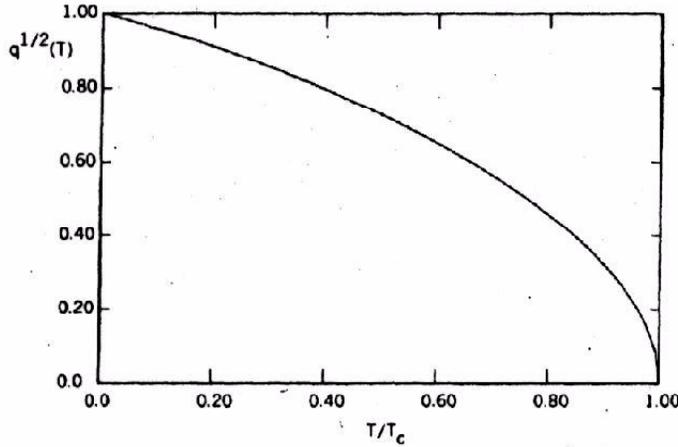


Figura 4: Parâmetro de ordem \sqrt{q} em função da temperatura T/T_c .

Através do resultado da energia livre da teoria de S.K. é possível obter outras quantidades termodinâmicas como energia interna, calor específico, etc. Além disso, podemos comparar alguns resultados obtidos pelo modelo S.K. com os resultados experimentais. Então vamos comparar, por exemplo, o resultado do diagrama de fase no modelo S.K com o resultado do diagrama de fase obtido experimentalmente:

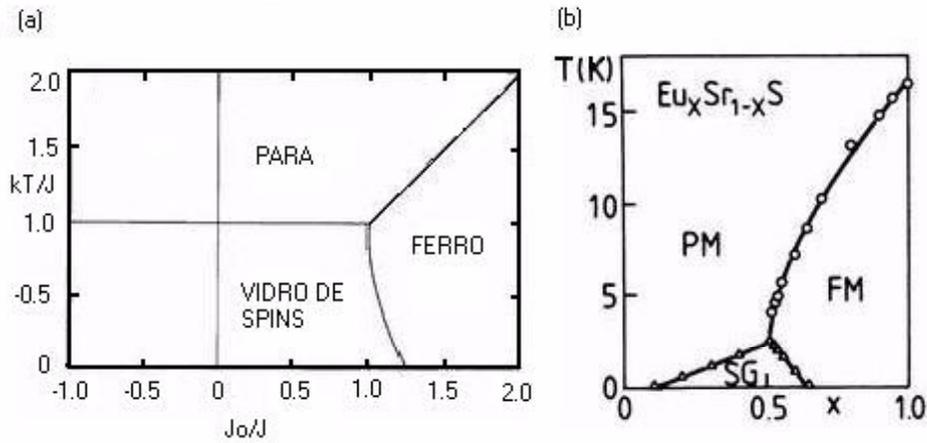


Figura 5: (a) Diagrama de fase obtida na teoria do campo médio no modelo S.K. (b) Diagrama de fase de $\text{Eu}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}$; de Malleta e Convert [25].

Outra comparação é a susceptibilidade magnética da teoria S.K. com o resultado da susceptibilidade obtida experimentalmente:

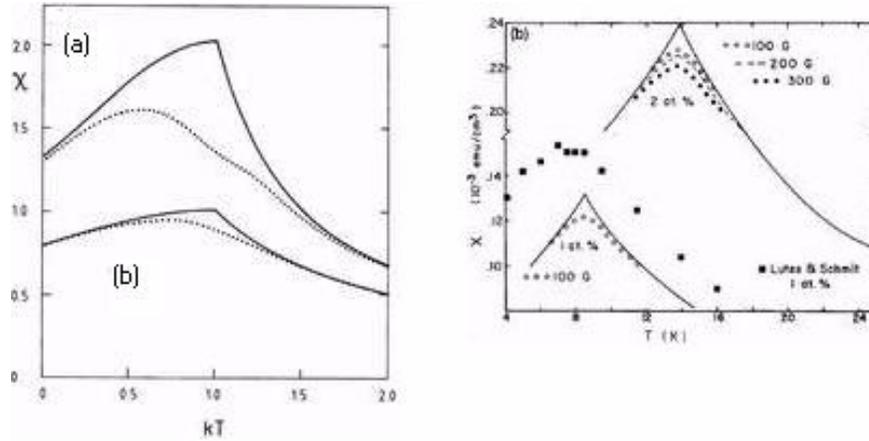


Figura 6: A figura que está a esquerda são resultados da susceptibilidade magnética prevista pela teoria de Sherrington-Kirkpatrick; D. Sherrington e S. Kirkpatrick [1]. Curvas sólidas são campo zero, linhas pontilhadas com campo $h = 0.1J$, As curvas em (a) são para $J_0/J = 0$ e as curvas em (b) são para $J_0/J = 0.5$. E à direita são os resultados experimentais com a liga AuFe ; Cannella e Mydosh [6]. Os resultado das medidas experimentais de susceptibilidade A.C. com diferentes concentrações de Fe.

Comparando as figuras 5 e 6 podemos ver que os resultados da teoria S.K. estão próximos dos resultados experimentais.

Porém a solução da (1.12) não garante $\langle Z^n \rangle$ máximo, porque também é possível ter $\langle Z^n \rangle$ mínimo, como vimos na seção 1.3.4 sobre o método de

ponto de sela. Então são necessários maiores informações como o cálculo da derivada segunda. A extensão deste cálculo foi feita pelo J. R. Almeida e D. J. Thouless [8]. Eles provaram que a energia livre na simetria de réplicas é instável dentro da fase de vidro de spins, visto que os autovalores de Almeida Thouless são negativos. Mais dramático ainda, a entropia da teoria do S.K. é negativa quando $T = 0$ e não é aceitável pela lei da física. Então devemos procurar outras soluções para $Q_{\alpha\beta}$, o que torna necessário a quebra simetria de réplicas. No entanto, é difícil “adivinhar” uma forma adequada de quebra simetria de réplicas, porque existem muitas soluções para $Q_{\alpha\beta}$. A solução desejada para descrever a fase vidro de spins deveria satisfazer o requerimento da entropia positiva e da energia livre estável mas ainda não foi possível achá-los. Felizmente, a teoria de Parisi conseguiu melhorar significativamente o resultado da entropia negativa. O sucesso desta teoria está no cálculo da primeira etapa da quebra de simetria de réplicas em que foi possível aumentar o resultado da entropia obtida na teoria do S.K. $S \sim -0.16$ para $S \sim -0.01$. Isto será visto na próxima seção.

1.5 Teoria de Parisi

1.5.1 Primeiro estágio de quebra de simetria de réplicas:

O primeiro estágio de quebra de simetria de réplicas [2, 12, 28, 30, 31] é dividir n réplicas para n/m grupos de m réplicas, n deve ser múltiplo de m , isto é n/m deve ser inteiro. Ou seja, aos elementos a e b que estão mesmo grupo, atribuímos $Q_{\alpha\beta} = \beta J(q + \delta)$ e aos elementos de grupos diferentes, atribuímos $Q_{\alpha\beta} = \beta Jq$:

$$\begin{aligned} I\left(\frac{\alpha}{m}\right) &= I\left(\frac{\beta}{m}\right) & Q_{\alpha\beta} &= \beta J(q + \delta) \\ I\left(\frac{\alpha}{m}\right) &\neq I\left(\frac{\beta}{m}\right) & Q_{\alpha\beta} &= \beta Jq \end{aligned} \quad (1.15)$$

onde β é o inverso da temperatura e $I(x)$ é o menor inteiro ou igual a x .

Isto pode ser visto de maneira mais fácil, por exemplo,

$$\mathbf{Q}_{6 \times 6} = \beta J \begin{bmatrix} 0 & q + \delta & q + \delta & q & q & q \\ q + \delta & 0 & q + \delta & q & q & q \\ q + \delta & q + \delta & 0 & q & q & q \\ q & q & q & 0 & q + \delta & q + \delta \\ q & q & q & q + \delta & 0 & q + \delta \\ q & q & q & q + \delta & q + \delta & 0 \end{bmatrix}.$$

Com a nova receita de quebra de simetria de réplicas, podemos calcular a nova solução do ponto de sela. Recordando que a equação (1.10) está escrita na forma de integral, é conveniente escrever $\sum_{(\alpha,\beta)} \rightarrow \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta}$:

$$\langle Z^n \rangle = \exp \left[\frac{\beta^2 \tilde{J} n N}{4} \right] \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{(\alpha,\beta)} dQ_{\alpha\beta} \text{Exp} [-N g(Q_{\alpha\beta})] \quad (1.16)$$

com

$$g(Q_{\alpha\beta}) = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta}^2 - \log \text{Tr} \exp \left[\frac{\beta \tilde{J}}{2} \sum_{\alpha\beta} S_{\alpha} S_{\beta} Q_{\alpha\beta} \right]$$

Agora precisamos aplicar a teoria de Parisi na equação acima, mas este cálculo é tedioso, portanto deixamos maiores detalhes no apêndice A. Comparando as equações feitas no apêndice (5.1) e nesta seção (1.15):

$$\begin{aligned} Q_0 &= 0 \\ Q_1 &= \beta \tilde{J} (q + \delta) \\ Q_2 &= \beta q \end{aligned} \quad (1.17)$$

Empregamos os resultados da equação (1.17) nas equações (5.2) e (5.3) para escrever uma expressão para $g(Q_{\alpha\beta})$ da equação (1.16):

$$g(Q_{\alpha\beta}) = g(q, \delta) = \frac{n \beta^2 \tilde{J}^2}{4} ((m-1)(q+\delta)^2 - m q^2) -$$

$$\log \text{tr} \exp \left[\frac{\beta^2 \tilde{J}^2}{2} \left\{ \delta \sum_{K=1}^{n/m} \left[\sum_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} S_{\alpha} \right]^2 + q \left[\sum_K^{n/m} \sum_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} S_{\alpha} S_{\beta} \right]^2 - b \sum_{\alpha} [S_{\alpha}]^2 \right\} \right]$$

onde

$$b = (q + \delta).$$

Como estamos tratando de spins clássicos, S_α assumem valores ± 1 e portanto $\sum_\alpha [S_\alpha]^2 = n$. Além disso, podemos linearizar os termos

$$\frac{\beta^2 \tilde{J}^2 \delta}{2} \left[\sum_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} S_\alpha \right]^2 \text{ e } \frac{\beta^2 \tilde{J}^2 q}{2} \left[\sum_K^{n/m} \sum_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} S_\alpha S_\beta \right]^2 \text{ com variáveis } y_K \text{ e } z$$

respectivamente, lembrando que $\sum_{K=1}^{n/m} \sum_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} = \sum_{K=1}^{n/m} \sum_{\alpha=1}^m$, a expressão $g(q, \delta)$

torna-se mais simples e linear:

$$g(q, \delta) = \frac{n\beta^2 \tilde{J}^2}{4} [(m-1)(q+\delta)^2 - mq^2 + 2(q+\delta)] - \log \int \prod_K^{n/m} Dy_K \int Dz Tr \exp \left[\beta \tilde{J} \left\{ \sqrt{\delta} \sum_{K=1}^{n/m} \sum_{\alpha=1}^m y_K S_\alpha + z \sqrt{q} \sum_K^{n/m} \sum_{\alpha=1}^m S_\alpha \right\} \right],$$

Agora podemos fatorar os elementos de índices K e α ,

$$g(q, \delta) = \frac{n\beta^2 \tilde{J}^2}{4} [(m-1)(q+\delta)^2 - mq^2 + 2(q+\delta)] - \log \int Dz \int \prod_{K=1}^{n/m} Dy_K \prod_{\alpha=1}^m Tr \exp \left[\beta \tilde{J} \left\{ \left[\sqrt{\delta} y_K + z \sqrt{q} \right] S_\alpha \right\} \right]$$

e finalmente podemos calcular o traço:

$$g(q, \delta) = \frac{n\beta^2 \tilde{J}^2}{4} [(m-1)(q+\delta)^2 - mq^2 + 2(q+\delta)] - \log \int Dz \prod_{K=1}^{n/m} \int Dy_K \left(2 \cosh \left[\beta \tilde{J} \left[\sqrt{\delta} y_K + z \sqrt{q} \right] \right] \right)^m.$$

Mas a integral independe de K , portanto:

$$g(q, \delta) = \frac{n\beta^2 \tilde{J}^2}{4} [(m-1)(q+\delta)^2 - mq^2 + 2(q+\delta)] - \log \int Dz \left(2^m \int Dy \cosh^m \left[\beta \tilde{J} \left[y \sqrt{\delta} + z \sqrt{q} \right] \right] \right)^{n/m}$$

agora usa-se a identidade $x^{n/m} = n/m \text{Log}x + 1$ para n/m pequeno:

$$g(q, \delta) = \frac{n\beta^2 \tilde{J}^2}{4} [(m-1)(q+\delta)^2 - mq^2 + 2(q+\delta)] \\ - \log \int Dz \left\{ 1 + \frac{n}{m} \log \left(2^m \int Dy \cosh^m \left[\beta \tilde{J} \left[y\sqrt{\delta} + z\sqrt{q} \right] \right] \right) \right\}.$$

Assim torna-se possível expandir a expressão logarítmica $\log(1 + \frac{n}{m}x) \simeq \frac{n}{m}x$:

$$g(q, \delta) = \frac{n\beta^2 \tilde{J}^2}{4} [(m-1)(q+\delta)^2 - mq^2 + 2(q+\delta)] \\ - \frac{n}{m} \int Dz \log \left(2^m \int Dy \cosh^m \left[\beta \tilde{J} \left[y\sqrt{\delta} + z\sqrt{q} \right] \right] \right) \quad (1.18)$$

Através do resultado (1.18) é possível escrever um resultado aproximado da integral (1.16):

$$\langle Z^n \rangle \quad (1.19) \\ \simeq e^{-\frac{nN\beta^2 \tilde{J}^2}{4} [(1-q-\delta)^2 - m(2q\delta + \delta^2)] + \frac{nN}{m} \int Dz \log \left(2^m \int Dy \cosh^m \left[\beta \tilde{J} \left[y\sqrt{\delta} + z\sqrt{q} \right] \right] \right)}$$

Introduz-se este resultado na equação (1.7) e obtemos a energia livre de Parisi:

$$\beta f = \frac{\beta^2 \tilde{J}^2}{4} [1 - (m-1)(q+\delta)^2 + mq^2 - 2(q+\delta)] \quad (1.20) \\ - \frac{1}{m} \int Dz \log \left(2^m \int Dy \cosh^m \left[\beta \tilde{J} \left[y\sqrt{\delta} + z\sqrt{q} \right] \right] \right)$$

No resultado da energia livre acima no caso $m = 0$ ou $m = 1$ recuperamos os resultados obtido na teoria S.K. A extremização da energia livre (1.21) é maximizada numericamente, com:

$$\frac{\partial f}{\partial q} = \frac{\partial f}{\partial \delta} = \frac{\partial f}{\partial m} = 0 \quad (1.21)$$

Através da equação (1.21) foi determinada a temperatura crítica $T_c = 1$ para $J = 1$. Perto da temperatura crítica obtemos:

$$q \simeq \frac{1}{3}\tau + O(\tau^2), \\ \delta = \frac{2}{3}\tau + O(\tau^2), \\ m = \tau + O(\tau^2).$$

Comparando o resultado da entropia de Parisi $S(T = 0) \simeq -0.01$ com a entropia obtida na teoria de S.K. $S(T = 0) \simeq -0.16$, concluímos que a entropia de Parisi é bem maior que a entropia obtida pela teoria de S.K só no cálculo da primeira etapa de quebra de simetria de réplicas! É possível ainda calcular quebra de simetria de réplicas com mais etapas e obter resultados ainda melhores.

Note-se que no cálculo inicial quando a simetria de réplicas é quebrada nós temos $n > m > 0$, mas depois de tomar o limite $n \rightarrow 0$ obtemos $0 < m < 1$.

1.6 Técnica de integral funcional

A integral funcional [15] é muito útil para calcular a função de partição com operadores que não comutam e operadores de muitas partículas. Nesta seção, vamos explicar como a função de partição definida como o traço do operador $e^{-\beta\hat{H}}$ se converte em uma função de partição expressa em termos de números de Grassmann ou números complexos. Nós limitaremos o estudo para estados coerentes de Férmion porque na tese será desenvolvido o vidro de spins na representação fermiônica. Para isso, antes de tudo, devemos conhecer a álgebra de Grassmann e depois vamos conhecer os estados coerentes de Férmion.

1.6.1 Variável de Grassmann

A álgebra de Grassmann é definida pelo conjunto de geradores que denotamos $\{\psi_\alpha\}$, $\alpha = 1, \dots, n$. Esses geradores anticomutam:

$$\psi_\alpha\psi_\beta + \psi_\beta\psi_\alpha = 0 \quad (1.22)$$

e em particular,

$$\psi_\alpha^2 = 0 \quad (1.23)$$

A base da álgebra de Grassmann é feita de todos os produtos distintos de geradores. Então, um número na álgebra de Grassmann é uma combinação linear com coeficientes complexos dos números $\{1, \psi_{\alpha_1}, \psi_{\alpha_1}\psi_{\alpha_2}, \dots, \psi_{\alpha_1}\psi_{\alpha_2}\dots\psi_{\alpha_n}\}$ onde, pela convenção os índices α_i estão ordenados $\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_n$. A dimensão da álgebra de Grassmann com n geradores é 2^n porque os elementos de base distintos são formados pelas duas possibilidades de incluir um gerador zero ou uma vez para cada um dos n geradores. Assim, uma representação de matriz do número de Grassmann deve requer a dimensão de matriz $2^n \times 2^n$.

Podemos definir uma operação de conjugação na seguinte maneira: numa álgebra de Grassmann de $n = 2p$ geradores selecionamos um conjunto p de geradores ψ_α , e para cada gerador ψ_α associamos um gerador ao qual denotamos ψ_α^* .

As propriedades que definem a conjugação na álgebra de Grassmann são as seguintes:

$$(\psi_\alpha)^* = \psi_\alpha^*, \quad (1.24)$$

$$(\psi_\alpha^*)^* = \psi_\alpha, \quad (1.25)$$

$$(\lambda\psi_\alpha)^* = \lambda^*\psi_\alpha^*, \quad (1.26)$$

onde λ é um número complexo e o conjugado de produto de geradores:

$$(\psi_{\alpha,1}\cdots\psi_{\alpha,n})^* = \psi_{\alpha,n}^*\psi_{\alpha,n-1}^*\cdots\psi_{\alpha,1}^*. \quad (1.27)$$

Para simplificar a notação, nós consideramos agora a álgebra de Grassmann com dois geradores. Denotamos os geradores ψ e ψ^* então a álgebra é gerada por quatro números de Grassmann $(1, \psi, \psi^*, \psi^*\psi)$.

A definição da integral definida não é análoga à soma familiar motivada na integral de Riemann para variáveis ordinárias. Portanto, definimos a integração de todas as variáveis de Grassmann como um mapeamento linear, no qual a propriedade fundamental é que integrais ordinárias de todas as funções anulam-se ao infinito e a integral de uma forma diferencial exata é zero. Este requerimento implica que a integral é zero, desde que $\mathbf{1}$ seja derivada de ψ . Somente a integral de ψ não é nula, desde que ψ não seja derivada. Assim a integral definida é como segue:

$$\begin{aligned} \int d\psi \mathbf{1} &= 0 \\ \int d\psi \psi &= \mathbf{1} \end{aligned} \quad (1.28)$$

Além disso, a integração de Grassmann é idêntica à diferenciação de Grassmann. Também o gerador ψ_α^* tem sido definido arbitrariamente para ser variável conjugada mas é de outro modo equivalente ao gerador ψ_α , então é natural definir a integração para as variáveis conjugadas na mesma maneira:

$$\int d\psi^* \mathbf{1} = 0 \quad (1.29)$$

$$\int d\psi^* \psi^* = \mathbf{1}$$

Note-se, entretanto, que em contraste com uma integral de Riemann na qual dx é uma variável infinitesimal, $d\psi^*$ não é um número de Grassmann.

1.6.2 Estados coerentes de Férmions

Nós definimos uma álgebra de Grassmann \mathfrak{G} pela associação do gerador ψ_α com cada operador de aniquilação $\hat{\psi}_\alpha$, e um gerador ψ_α^* com cada operador de criação $\hat{\psi}_\alpha^\dagger$. Então construímos o espaço generalizado de Fock como o conjunto de combinações lineares de estado do espaço de Fock \mathfrak{F} com coeficientes na álgebra de Grassmann \mathfrak{G} . Um vetor $|\psi\rangle$ no espaço generalizado de Fock pode ser expandido como:

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha} \chi_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle \quad (1.30)$$

onde χ_{α} são números de Grassmann e o $|\psi_{\alpha}\rangle$ vetor no espaço de Fock.

Para tratar expressões contendo combinações de variáveis de Grassmann e operadores de criação e aniquilação, é necessário argumentar a definição da variável de Grassmann para especificar as relações de comutações entre ψ 's e $\hat{\psi}$'s e suas adjuntas de expressões misturadas. Para isso é conveniente requerer que:

$$\{\tilde{\psi}, \hat{\psi}\} = 0 \quad (1.31)$$

e

$$(\tilde{\psi}\hat{\psi})^\dagger = \hat{\psi}^\dagger\tilde{\psi}^\dagger \quad (1.32)$$

onde $\tilde{\psi}$ denota alguma variável de Grassmann $\{\psi_\alpha, \psi_\alpha^*\}$ e $\hat{\psi}$ denota algum operador em $\{\hat{\psi}_\alpha, \hat{\psi}_\alpha^\dagger\}$. O colchete $\{\}$ da equação (1.31) indica a relação de anticomutação.

Agora nós definimos um estado coerente de férmion $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = e^{-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha} \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}} |0\rangle = \prod_{\alpha} e^{-\psi_{\alpha} \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}} |0\rangle = \prod_{\alpha} (1 - \psi_{\alpha} \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}) |0\rangle \quad (1.33)$$

note-se que na parte exponencial só vale a primeira potência porque nas potências superiores são zeros, isto é $(\psi_{\alpha} \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger})^2 = (\psi_{\alpha} \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger})^3 = \dots = (\psi_{\alpha} \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger})^a =$

0, isto pode ser também conferido na (1.23). Note-se que a combinação $\tilde{\psi}_\alpha \tilde{\psi}_\alpha^\top$ comuta com $\tilde{\psi}_\beta \tilde{\psi}_\beta^\top$ assim como (1.32) reproduz cada termo não nulo da exponencial na (1.33). A adjunta do estado coerente é definida:

$$\langle \psi | = \langle 0 | e^{-\sum_\alpha \hat{\psi}_\alpha \psi_\alpha^*} = \langle 0 | e^{\sum_\alpha \psi_\alpha^* \hat{\psi}_\alpha}. \quad (1.34)$$

Agora vamos ver a ação do operador de aniquilação ψ_α e construção $\hat{\psi}_\alpha^\top$ nos estados coerentes definidos pela (1.33) e (1.34):

$$\hat{\psi}_\alpha \left(1 - \psi_\alpha \hat{\psi}_\alpha^\top\right) |0\rangle = +\psi_\alpha |0\rangle = \psi_\alpha \left(1 - \psi_\alpha \hat{\psi}_\alpha^\top\right) |0\rangle \quad (1.35)$$

$$\hat{\psi}_\alpha |\psi\rangle = \psi_\alpha |\psi\rangle \quad \text{e} \quad \langle \psi | \hat{\psi}_\alpha^\top = \langle \psi | \psi_\alpha^*$$

$$\hat{\psi}_\alpha^\top |\psi\rangle = -\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} |\psi\rangle \quad \text{e} \quad \langle \psi | \hat{\psi}_\alpha = \langle \psi | \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha^*}. \quad (1.36)$$

Definimos também a relação de clausura para férmion:

$$\int \prod_\alpha d\psi_\alpha^* d\psi_\alpha e^{-\sum_\alpha \psi_\alpha^* \psi_\alpha} |\psi\rangle \langle \psi| = \mathbf{1} \quad (1.37)$$

Assim, se nós definirmos um conjunto completo de estados $\{|n\rangle\}$ no espaço de Fock, o traço de um operador \hat{A} deve ser escrito:

$$\begin{aligned} Tr \hat{A} &= \sum_n \langle n | \hat{A} | n \rangle \\ &= \int \prod_\alpha d\psi_\alpha^* d\psi_\alpha e^{-\sum_\alpha \psi_\alpha^* \psi_\alpha} \sum_n \langle n | (|\psi\rangle \langle \psi|) \hat{A} | n \rangle \end{aligned}$$

mas $\langle n | \psi\rangle \langle \psi | n \rangle = \langle -\psi | n \rangle \langle n | \psi\rangle$ porque são número de Grassmann então

$$\begin{aligned} Tr &= \int \prod_\alpha d\psi_\alpha^* d\psi_\alpha e^{-\sum_\alpha \psi_\alpha^* \psi_\alpha} \langle -\psi | \hat{A} \sum_n |n\rangle \langle n | \psi\rangle \\ &= \int \prod_\alpha d\psi_\alpha^* d\psi_\alpha e^{-\sum_\alpha \psi_\alpha^* \psi_\alpha} \langle -\psi | \hat{A} | \psi\rangle \end{aligned} \quad (1.38)$$

onde $\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$.

1.6.3 Formulação da integral funcional

A integral funcional nos fornece uma poderosa ferramenta para estudar um sistema de muitas partículas.

Para um Hamiltoniano de muitas partículas expresso em segunda quantização, uma representação da integral funcional para o operador de evolução de muitos corpos deve ser obtida usando estados coerentes $|\psi\rangle$, a equação (1.33).

A função de partição Z do ensemble grande canônico para um sistema de muitas partículas deve ser expresso como o traço do operador de evolução do tempo imaginário e com base unitária (1.37) para o traço do estado coerente de Férmion e escolhemos a unidade com $\hbar=1$. Seguindo as definições do traço do operador \hat{A} para Férmions conforme a equação (1.38), o traço do operador $e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}$ é:

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}$$

$$Z = \sum_n \langle n | e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} | n \rangle$$

onde introduzimos a base unitária definida em (1.37):

$$Z = \int \prod_{\alpha} D(\psi_{\alpha}^*, \psi_{\alpha}) e^{-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}} \langle \psi | e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} \sum_n |n\rangle \langle n| |\psi\rangle$$

onde

$$D(\psi_{\alpha}^*, \psi_{\alpha}) = d\psi_{\alpha}^* d\psi_{\alpha}.$$

Observando a equação acima podemos ver que $\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$, portanto,

$$Z = \int \prod_{\alpha} D(\psi_{\alpha}^*, \psi_{\alpha}) e^{-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}} \langle -\psi | e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} | \psi \rangle \quad (1.39)$$

O traço está imposto na condição de contorno antiperiódico:

$$\psi_{\alpha,0} = \psi_{\alpha} \quad (1.40)$$

$$\psi_{\alpha,M}^* = -\psi_{\alpha}^* \quad (1.41)$$

A equivalência no interior e exterior das integrais do estado coerente é enfatizada pela remarcação $\psi_{\alpha} = -\psi_{\alpha,M}$. O intervalo do tempo imaginário $\beta = \tau_f - \tau_i$ é subdividido em M intervalos:

$$\frac{\tau_f - \tau_i}{M} = \varepsilon \quad (1.42)$$

Por economia de notação, chamaremos o operador $\widehat{\Omega} = \widehat{H} - \mu\widehat{N}$, agora introduzimos (1.42) em (1.39):

$$\begin{aligned} Z &= \int \prod_{\alpha} D(\psi_{\alpha}^*, \psi_{\alpha}) e^{-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}} \langle -\psi | e^{-M\varepsilon\widehat{\Omega}} | \psi \rangle \\ Z &= \int \prod_{\alpha} D(\psi_{\alpha}^*, \psi_{\alpha}) e^{-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}} \langle -\psi | \left(e^{-\varepsilon\widehat{\Omega}} \right)^M | \psi \rangle \end{aligned} \quad (1.43)$$

A relação de clausura (1.37) é inserida para separar cada etapa de evolução do tempo imaginário. Com isso é conveniente estabelecer um índice k , $\{k = 1 \dots M, 1 < k < M\}$, que especifica a ordem do tempo imaginário os operadores então:

$$Z = \int \prod_{\alpha} \prod_k^M D(\psi_{\alpha,k}^*, \psi_{\alpha,k}) e^{-\sum_{\alpha} \sum_k^M \psi_{\alpha,k}^* \psi_{\alpha,k}} \langle \psi_{\alpha,k} | e^{-\varepsilon\widehat{\Omega}} | \psi_{\alpha,k-1} \rangle \quad (1.44)$$

No elemento da matriz $\langle \psi_{\alpha,k} | e^{-\varepsilon\widehat{\Omega}} | \psi_{\alpha,k-1} \rangle$ o operador $\widehat{\Omega}$ está representado em termos de operadores de estados coerentes, $\widehat{\Omega} = \widehat{\Omega}(\widehat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}, \widehat{\psi}_{\alpha})$. Para calcular o elemento de matriz, no entanto, não podemos calcular da maneira usual porque os operadores de estados coerentes não comutam. Para isto devemos escrever o operador na "forma ordenada normal" que significa que a ordem do operador de criação $\widehat{\psi}^{\dagger}$ deve estar à esquerda e a ordem do operador de aniquilação $\widehat{\psi}$ deve estar à direita. Então o elemento da matriz pode ser facilmente calculado:

$$\begin{aligned} I &= \langle \psi_{\alpha,k} | e^{-\varepsilon\widehat{\Omega}(\widehat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}, \widehat{\psi}_{\alpha})} | \psi_{\alpha,k-1} \rangle = \langle \psi_{\alpha,k} | : e^{-\varepsilon\widehat{\Omega}(\widehat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}, \widehat{\psi}_{\alpha})} : + O(\varepsilon^2) | \psi_{\alpha,k-1} \rangle \\ I &= \langle \psi_{\alpha,k} | : e^{-\varepsilon(\widehat{H}(\widehat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}, \widehat{\psi}_{\alpha}) - \mu\widehat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}\widehat{\psi}_{\alpha})} : + \widehat{O}(\varepsilon^2) | \psi_{\alpha,k-1} \rangle \\ I &= e^{-\varepsilon\sum_{\alpha} H(\psi_{\alpha,k}^*, \psi_{\alpha,k-1}) - \mu\varepsilon\sum_{\alpha} \psi_{\alpha,k}^* \psi_{\alpha,k-1} + \sum_{\alpha} \psi_{\alpha,k}^* \psi_{\alpha,k-1} +} + O(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (1.45)$$

O número $O(\varepsilon^2)$ é um número infinitesimal. Agora introduzimos este resultado (1.44):

$$Z = \int \prod_{\alpha} \prod_k^M D(\psi_{\alpha,k}^*, \psi_{\alpha,k}) e^{-\sum_{\alpha} \psi_{\alpha,k}^* \psi_{\alpha,k}} \times \prod_k^M \left[e^{-\varepsilon \sum_{\alpha} H(\psi_{\alpha,k}^*, \psi_{\alpha,k-1}) - \mu \varepsilon \sum_{\alpha} \psi_{\alpha,k}^* \psi_{\alpha,k-1} + \sum_{\alpha} \psi_{\alpha,k}^* \psi_{\alpha,k-1}} + O(\varepsilon^2) \right]$$

O termo $O(\varepsilon^2)$ que está dentro dos colchetes é desprezado. Então escrevemos:

$$Z = \int \prod_{\alpha} \prod_k^M D(\psi_{\alpha,k}^*, \psi_{\alpha,k}) e^{-\sum_{\alpha} \sum_k^M [\psi_{\alpha,k}^* \psi_{\alpha,k} - \psi_{\alpha,k}^* \psi_{\alpha,k-1} + \varepsilon H(\psi_{\alpha,k}^*, \psi_{\alpha,k-1}) - \mu \varepsilon \psi_{\alpha,k}^* \psi_{\alpha,k-1}]} \quad (1.46)$$

Na parte exponencial (1.46), o termo $k = 1$ deve ser separado da soma dos demais termos de k para que possamos usar a condição de contorno definida nas equações (1.40) e (1.41), $\psi_{\alpha,0} = -\psi_{\alpha,M} = \psi_{\alpha}$, então o termo exponencial da equação acima fica:

$$A = -\varepsilon \sum_{\alpha} \left\{ \psi_{\alpha,1}^* \left(\frac{\psi_{\alpha,1} - \psi_{\alpha,0}}{\varepsilon} - \mu \psi_{\alpha,0} \right) + H(\psi_{\alpha,1}^*, \psi_{\alpha,0}) \right\} + \varepsilon \sum_{k=2}^M \left\{ -\sum_{\alpha=2} \psi_{\alpha,k}^* \left(\frac{\psi_{\alpha,k} - \psi_{\alpha,k-1}}{\varepsilon} - \mu \psi_{\alpha,M} \right) - H(\psi_{\alpha,k}^*, \psi_{\alpha,k-1}) \right\}$$

$$A = -\varepsilon \sum_{\alpha} \left\{ \psi_{\alpha,1}^* \left(\frac{\psi_{\alpha,1} - \xi \psi_{\alpha,M}}{\varepsilon} - \xi \mu \psi_{\alpha,M} \right) + H(\psi_{\alpha,1}^*, -\psi_{\alpha,M}) \right\} + \varepsilon \sum_{k=2}^M \left\{ -\sum_{\alpha=2} \psi_{\alpha,k}^* \left(\frac{\psi_{\alpha,k} - \psi_{\alpha,k-1}}{\varepsilon} - \mu \psi_{\alpha,M} \right) - H(\psi_{\alpha,k}^*, \psi_{\alpha,k-1}) \right\}$$

Agora aplica-se o limite para $M \rightarrow \infty$, o somatório acima se converte em uma integral:

$$A = - \int_0^{\beta} d\tau \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) \psi_{\alpha}(\tau) + H[\psi_{\alpha}^*(\tau), \psi_{\alpha}(\tau)] \quad (1.47)$$

Finalmente se escreve a função de partição com notação da trajetória:

$$Z = \int_{\psi_{\alpha}(\beta) = -\psi_{\alpha}(0)} \mathfrak{D}(\psi_{\alpha,k}^*, \psi_{\alpha,k}) e^A \quad (1.48)$$

com

$$\mathfrak{D}(\psi_{\alpha,k}^*, \psi_{\alpha,k}) = \prod_{\alpha} D(\psi_{\alpha,k}^*, \psi_{\alpha,k})$$

A integração que está escrita acima de variáveis de Grassmann satisfazem as *condições de contorno antiperiódicas para férmions*. A equação (1.48) é a integral funcional para o tempo imaginário, ela é útil para calcular a função de partição com os operadores que não comutam. Por exemplo nos artigos de Bray e Moore [9] e A. Theumann [32], no vidro de spins no modelo S.K com o hamiltoniano de Heisenberg temos três operadores de spins \hat{S}^x , \hat{S}^y e \hat{S}^z que não comutam, então eles usaram integral funcional para calcular a média da energia livre. Outro exemplo: a integral funcional também é aplicada no problema de vidro de spins no campo transversal [3] onde foram usados os operadores de spins \hat{S}^x e \hat{S}^z que também não comutam. Ela também pode ser usada para resolver o problema da função de partição para os operadores que comutam [14] e o resultado é idêntico no caso, para cálculo direto do traço do operador $\hat{H} - \mu\hat{N}$. Nas próximas seções e nos próximos capítulos veremos este tipo de exemplos.

1.7 Vidro de spins em um campo transversal

1.7.1 Teoria de vidro de spins em um campo transversal

Num artigo interessante de Bray e Moore [9] sobre vidro de spins no modelo de Heisenberg prevê que as flutuações quânticas reduzem a temperatura crítica. Isso pode ser também aplicado no caso no vidro de spins em um campo transversal, porque as flutuações quânticas são direcionadas pelo campo transversal. O campo transversal aplicado num sistema de Ising 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 T_c . Este fenômeno é equivalente para o movimento de tunelamento entre vales. Isso tem aplicação experimental num sistema de Ising com campo transversal, por exemplo, a liga $LiHo_{0.167}Y_{0.833}F_4$ tem a fase de vidro de spins abaixo da temperatura T_g .

Esta liga $LiHo_xY_{1-x}F_4$ ver ref. [17, 16] é uma diluição de série isoestrutural onde os íons magnéticos Ho^{3+} e íons não magnéticos Y^{3+} são aleatoriamente ocupados em sítios de terra rara (R) sítios na face centrada na rede tetragonal de $LiRF_4$. Isto pode ser representado na figura abaixo:

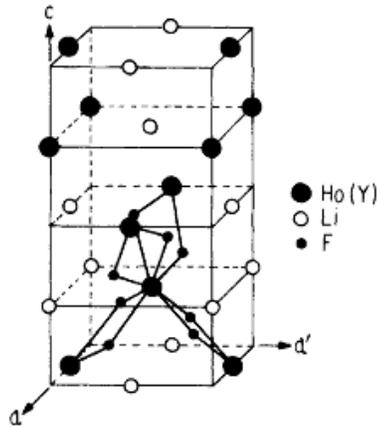


Figura 7: esta figura mostra a célula unitária de $LiHo_xY_{1-x}F_4$. Constante de rede são $a=a' = 5.175$ angstrom e $c=10.75$ angstrom. Os átomos de Ho e Y competem nos sítios de rede designados pelos grandes círculos sólidos. Átomos de flúor são apresentados somente em volta de sítios de $Ho(Y)$ na posição $(a/2, a/2, c/4)$.

A anisotropia do único íon magnético é do tipo de Ising com momentos derivados do estado fundamental duplo de Ho^{3+} e está situada paralela ao eixo c . A interação dominante entre os momentos é dipolar. O composto puro $x=1$ é um ferromagneto, a transição $T_c = 1.53$ K é essencialmente perfeita no campo médio (devido a interação dipolar de longo alcance). A diluição suficiente destrói a ordem de longo alcance, surge a desordem e a frustração (surgindo uma mistura de interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas em um sistema dipolar acoplado) em $x=0.167$, a amostra apresenta vidro de spins com temperatura de transição na ordem de $T_g = 0.1$ K.

Um campo magnético H_t é aplicado livremente perpendicular ao eixo magnético, que é paralelo ao eixo c neste material tetragonal, induz tunelamento quântico através da barreira que separa os dois estados fundamentais degenerados dos íons Ho^{3+} , e então resulta uma divisão do estado fundamental duplo. Esta divisão Γ é proporcional a H_t^2 na menor ordem, que joga a mesma regra do campo transversal (Γ) no modelo do hamiltoniano é:

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \Gamma \sum_i \sigma_i^x.$$

Um tunelamento quântico compete contra o congelamento de spin, então é esperado que a fase de vidro de spins seja suprimida em alguma temperatura se a intensidade de tunelamento é suficientemente alta. Foi observado experimentalmente que a fase é paramagnética em todas as temperaturas com campo acima de 12kOe, e abaixo do campo crítico existe uma linha

da dependência da temperatura crítica em função do campo transversal que separa a fase paramagnética e o vidro de spins.

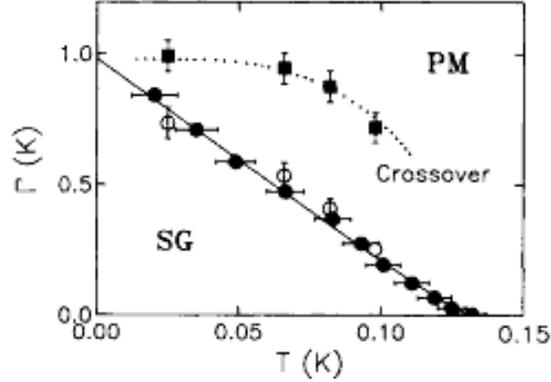


Figura 8: Diagrama de fase do acoplamento dipolar diluído de vidros de spin de Ising de $LiHo_{0.167}Y_{0.833}F_4$ em um plano $\Gamma - T$ onde o campo transversal é Γ e temperatura é T . PM indica a fase paramagnética. SG indica a fase vidros de spin. Os pontos circulares são resultados experimentais. E a linha pontilhada é o resultado da teoria do campo médio. B. Ellmann et. al. (1993) [17].

O resultado do diagrama de fase da teoria do campo médio, difere do diagrama de fase experimental, mas ambos estão de acordo no campo crítico Γ_c e na temperatura crítica $T_c(\Gamma = 0)$. É claro que necessitamos outras teorias mais realistas, mas é muito difícil de resolvê-los. Então, ainda recorremos a teoria do campo médio porque ela simplifica a solução do problema de vidro de spin com campo transversal.

1.7.2 Primeira etapa de quebra de simetria de réplicas no vidro de spins em um campo transversal.

Nesta subseção, vamos revisar o artigo de Y. Y. Golschmidt et al [4]. Eles usaram a fórmula de Trotter Suzuki para estudar o vidro de spins de Ising quântico em um campo transversal. É importante conhecer a fórmula de Trotter-Suzuki e ver como ela é empregada para calcular os operadores de spins não diagonais (não comutantes), porque isto é muito usado no estudo de vidro de spins em um campo transversal.

O hamiltoniano de Ising com campo transversal:

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \Gamma \sum_i \hat{S}_i^x \quad (1.49)$$

onde os spins tem eixo preferencial z e uma componente do campo transverso na direção x . Γ é a magnitude do campo transverso. Devemos lembrar que as constantes de acoplamento J_{ij} são variáveis randômicas e são distribuídas em uma função de probabilidade Gaussiana centrada. Omitimos o campo externo na direção longitudinal. A seguir, usamos o hamiltoniano (1.49) para calcular a função de partição:

$$Z = Tr \exp \left(\beta \sum_{i,j} J_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z + \beta \Gamma \sum_i \hat{S}_i^x \right)$$

A função de partição Z pode ser calculada, através da soma de autoestados \hat{S}^z :

$$Z = Tr e^{-\beta \hat{H}} = \sum_{\mu} \langle \mu | e^{-\beta \hat{H}} | \mu \rangle \quad (1.50)$$

com

$$|\mu\rangle = \prod_{i=1}^N |\mu_i\rangle \quad (1.51)$$

onde $|\mu_i\rangle$ podem ser vistos como possíveis autovetores:

$$|\mu_i\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.52)$$

Como os operadores \hat{S}^x e \hat{S}^z não comutam, é conveniente escrever a função de partição separadamente:

$$Z = Tr \exp \left(\hat{A}_1 + \hat{A}_2 \right)$$

onde

$$\hat{A}_1 = \beta \sum_{i,j} J_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z$$

$$\hat{A}_2 = \beta \Gamma \sum_i \hat{S}_i^x$$

A seguir, empregamos a fórmula de Trotter:

$$Z = Tr \exp \left[\hat{A}_1 + \hat{A}_2 \right] = \lim_{p \rightarrow \infty} Tr \left(e^{\frac{\hat{A}_1}{p}} e^{\frac{\hat{A}_2}{p}} \right)^p$$

$$Z = \lim_{p \rightarrow \infty} \sum_{\rho} \langle \mu | \left(e^{\frac{\hat{A}_1}{p}} e^{\frac{\hat{A}_2}{p}} \right)^p | \mu \rangle = \sum_{\rho} \langle \mu | \left(e^{\frac{\hat{A}_1}{p}} e^{\frac{\hat{A}_2}{p}} \right) \left(e^{\frac{\hat{A}_1}{p}} e^{\frac{\hat{A}_2}{p}} \right) \dots \left(e^{\frac{\hat{A}_1}{p}} e^{\frac{\hat{A}_2}{p}} \right) | \mu \rangle$$

Para calcular o elemento da matriz $\langle \mu | \left(e^{\frac{\hat{A}_1}{p}} e^{\frac{\hat{A}_2}{p}} \right)^p | \mu \rangle$, é conveniente introduzir os operadores unitários $\sum_{\mu_t} |\mu_t\rangle \langle \mu_t| = \mathbf{1}$, onde o subíndice $t = 1..p$ que indica a direção de Trotter e também é apropriado substituir os brackets $\langle \mu |$ por $\langle \mu_o |$ e $| \mu \rangle$ por $| \mu_o \rangle$:

$$Z = \lim_{p \rightarrow \infty} \sum_{\{\mu\}} \langle \mu_o | \left(e^{\frac{\hat{A}_1}{p}} e^{\frac{\hat{A}_2}{p}} \right) | \mu_1 \rangle \langle \mu_1 | \left(e^{\frac{\hat{A}_1}{p}} e^{\frac{\hat{A}_2}{p}} \right) | \mu_2 \rangle \times \\ \langle \mu_2 | \left(e^{\frac{\hat{A}_1}{p}} e^{\frac{\hat{A}_2}{p}} \right) \dots | \mu_p \rangle \langle \mu_p | \left(e^{\frac{\hat{A}_1}{p}} e^{\frac{\hat{A}_2}{p}} \right) | \mu_o \rangle$$

Introduz-se também o operador unitário $\sum_{\{\nu_t^\alpha\}} |\nu_t^\alpha\rangle \langle \nu_t^\alpha|$ entre $\exp \hat{A}_1/p$ e $\exp \hat{A}_2/p$ para separar a ação dos operadores \hat{A}_1 e \hat{A}_2 e depois faz-se a replicação $Z^n = \prod_{\alpha}^n Z_{\alpha}$:

$$Z^n = \lim_{p \rightarrow \infty} \prod_{\alpha}^n \prod_t^p \sum_{\{\mu_t^\alpha\}} \sum_{\{\nu_t^\alpha\}} \langle \mu_t^\alpha | e^{\frac{\hat{A}_1}{p}} | \nu_t^\alpha \rangle \langle \nu_t^\alpha | e^{\frac{\hat{A}_2}{p}} | \mu_t^\alpha \rangle \quad (1.53)$$

Agora é possível calcular o elemento da matriz:

$$\langle \mu_t^\alpha | e^{\frac{\hat{A}_1}{p}} | \nu_t^\alpha \rangle = \exp\left(\frac{\beta}{p} \sum_{i < j} \mu_{it}^\alpha \mu_{jt}^\alpha\right) \delta(\mu_t^\alpha, \nu_t^\alpha) \quad (1.54)$$

e

$$\langle \nu_t^\alpha | e^{\frac{\hat{A}_2}{p}} | \mu_t^\alpha \rangle = \prod_{i=1}^N \langle \nu_{t,i}^\alpha | e^{\frac{\hat{A}_{2i}}{p}} | \mu_{t,i}^\alpha \rangle = \prod_{i=1}^N \left[\frac{1}{2} \sinh\left(\frac{2\beta\Gamma}{p}\right) \left[\coth\left(\frac{\beta\Gamma}{p}\right) \right]^{\mu_{t,i}^\alpha \mu_{t+1,i}^\alpha} \right]^{\frac{1}{2}} \\ = \left[\frac{1}{2} \sinh\left(\frac{2\beta\Gamma}{p}\right) \right]^{\frac{N}{2}} \prod_{i=1}^N \left[\coth\left(\frac{\beta\Gamma}{p}\right) \right]^{\frac{\mu_{t,i}^\alpha \mu_{t+1,i}^\alpha}{2}} \\ = \exp\left\{ \frac{N}{2} \ln \left[\frac{1}{2} \sinh\left(\frac{2\beta\Gamma}{p}\right) \right] + \frac{1}{2} \sum_i \mu_{t,i}^\alpha \mu_{t+1,i}^\alpha \ln \coth\left(\frac{\beta\Gamma}{p}\right) \right\}$$

$$= \exp \frac{1}{2} \left\{ \sum_i^N \ln \left[\frac{1}{2} \sinh \left(\frac{2\beta\Gamma}{p} \right) \right] + \mu_{t,i}^\alpha \mu_{t+1,i}^\alpha \ln \coth \left(\frac{\beta\Gamma}{p} \right) \right\} \quad (1.55)$$

Prova:

$$\begin{aligned} \langle \sigma | e^{\gamma \hat{\sigma}^x} | \sigma' \rangle &= \langle \sigma | \mathbf{I} \cosh \gamma + \hat{\boldsymbol{\sigma}}^x \sinh \gamma | \sigma' \rangle \\ \langle \sigma | e^{\gamma \hat{\sigma}^x} | \sigma' \rangle &= \delta(\sigma, \sigma') \cosh \gamma + \langle \sigma | \hat{\boldsymbol{\sigma}}^x | \sigma' \rangle \sinh \gamma \end{aligned}$$

vendo a equação acima, σ assume os valores $+1, -1$ e no caso $\sigma = \sigma'$ temos $\langle \sigma | e^{\gamma \hat{\sigma}^x} | \sigma' \rangle = \cosh \gamma$, e $\sigma \neq \sigma'$ temos $\langle \sigma | e^{\gamma \hat{\sigma}^x} | \sigma' \rangle = \sinh \gamma$ podemos generalizar escrevendo isto como:

$$\langle \sigma | e^{\gamma \hat{\sigma}^x} | \sigma' \rangle = \left(\frac{e^\gamma + e^{-\gamma}}{2} \frac{e^\gamma - e^{-\gamma}}{2} \left(\frac{e^\gamma + e^{-\gamma}}{e^\gamma - e^{-\gamma}} \right)^{\sigma\sigma'} \right)^{1/2}$$

no caso $\sigma = \sigma'$ temos:

$$\langle \sigma | e^{\gamma \hat{\sigma}^x} | \sigma' \rangle = \left(\frac{e^\gamma + e^{-\gamma}}{2} \frac{e^\gamma - e^{-\gamma}}{2} \left(\frac{e^\gamma + e^{-\gamma}}{e^\gamma - e^{-\gamma}} \right)^1 \right)^{1/2} = \frac{e^\gamma + e^{-\gamma}}{2} = \cosh \gamma,$$

se $\sigma \neq \sigma'$

$$\langle \sigma | e^{\gamma \hat{\sigma}^x} | \sigma' \rangle = \left(\frac{e^\gamma + e^{-\gamma}}{2} \frac{e^\gamma - e^{-\gamma}}{2} \left(\frac{e^\gamma + e^{-\gamma}}{e^\gamma - e^{-\gamma}} \right)^{-1} \right)^{1/2} = \sinh \gamma.$$

Então podemos escrever na forma geral para σ e σ' :

$$\langle \sigma | e^{\gamma \hat{\sigma}^x} | \sigma' \rangle = \left(\frac{1}{2} \sinh 2\gamma \right)^{1/2} e^{\sigma\sigma' \log \coth \gamma}$$

Assim fica demonstrada a equação (1.55).

Agora se introduz (1.55) e (1.54) em (1.53):

$$Z^n = \lim_{p \rightarrow \infty} \text{tr}_{\{\mu_t^\alpha\}} \exp \left\{ \sum_{t,\alpha} \left[\frac{\beta}{p} \sum_{i < j} J_{ij} \mu_{i,t}^\alpha \mu_{j,t}^\alpha + \sum_i \omega (C + \mu_{i,t}^\alpha \mu_{i,t+1}^\alpha) \right] \right\} \quad (1.56)$$

onde

$$C = \frac{1}{2\omega} \ln \frac{1}{2} \sinh \left(\frac{2\beta\Gamma}{p} \right)$$

$$\omega = \frac{1}{2} \ln \coth \left(\frac{\beta \Gamma}{p} \right)$$

Agora calcula-se a média da função de partição onde $\langle Z^n \rangle = \int dJ_{ij} P(J_{ij}) Z^n$ e lineariza introduzindo-se os campos para as réplica $\alpha = \beta$ com $R_\alpha^{t,t'}$ e para $\alpha \neq \beta$, $Q_{\alpha,\beta}^{t,t'}$:

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle &= \lim_{p \rightarrow \infty} \int \prod_{\alpha,\beta} \prod_{t,t'} dQ_{\alpha,\beta}^{t,t'} \int \prod_{\alpha} \prod_{t,t'} dR_\alpha^{t,t'} \\ &\exp \left[-\frac{N\beta^2 J^2}{4p^2} \sum_{t,t'} \left(\sum_{\alpha\beta} \left(Q_{\alpha,\beta}^{t,t'} \right)^2 + \sum_{\alpha} \left(R_\alpha^{t,t'} \right)^2 \right) + N \ln \text{tr} \exp H_{eff} \right] \end{aligned} \quad (1.57)$$

$$H_{eff} = \frac{\beta^2 J^2}{2p^2} \sum_{t,t'} \sum_{\alpha\beta} \mu_t^\alpha \mu_{t'}^\beta Q_{\alpha,\beta}^{t,t'} + \frac{\beta^2 J^2}{2p^2} \sum_{t,t'} \sum_{\alpha} \mu_t^\alpha \mu_{t'}^\alpha R_\alpha^{t,t'} + \sum_{\alpha,t} \omega (C + \mu_t^\alpha \mu_{t+1}^\alpha) \quad (1.58)$$

A integral (1.57) é calculada na forma aproximada pelo método de ponto de sela onde as soluções de ponto de sela são $Q_{\alpha,\beta}^{t,t'} = \tilde{Q}_{\alpha,\beta}^{t,t'}$ e $R_\alpha^{t,t'} = \tilde{R}_\alpha^{t,t'}$. Em seguida, usamos (1.7) para escrever a densidade média da energia livre:

$$\begin{aligned} f &= \lim_{p \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \\ &\text{Máx} \left[\frac{\beta^2 J^2}{4p^2 n} \sum_{t,t'} \left(\sum_{\alpha\beta} \left(\tilde{Q}_{\alpha,\beta}^{t,t'} \right)^2 + \sum_{\alpha} \left(\tilde{R}_\alpha^{t,t'} \right)^2 \right) - \frac{1}{n} \ln \text{tr} \exp H_{eff} \left(\tilde{Q}_{\alpha,\beta}^{t,t'}, \tilde{R}_\alpha^{t,t'} \right) \right] \end{aligned} \quad (1.59)$$

Q 's e R ' satisfazem as seguintes soluções do ponto de sela:

$$\tilde{Q}_{\alpha,\beta} = \frac{\text{Tr} \mu_t^\alpha \mu_{t'}^\beta e \exp H_{eff}}{\text{tr} \exp H_{eff}} \quad \text{para } \alpha \neq \beta \quad (1.60)$$

$$\tilde{R}_\alpha^{t,t'} = \frac{\text{Tr} \mu_t^\alpha \mu_{t'}^\alpha \exp H_{eff}}{\text{Tr} \exp H_{eff}} \quad \text{para } t \neq t' \quad (1.61)$$

Onde $\tilde{Q}_{\alpha,\beta}^{t,t'}$ é translacionalmente invariante na direção de Trotter de $|t - t'|$ e é independente $|t - t'|$. Podemos escrever $\tilde{Q}_{\alpha,\beta}^{t,t'}$ na forma estática, simplesmente $\tilde{Q}_{\alpha,\beta}$. Assumimos que $R_\alpha^{t,t'}$ não é estático e na solução de simetria de réplicas (RS) é instável dentro da fase de vidro de spin. Portanto, a solução

da primeira etapa de quebra de simetria de réplicas deve ser considerada para descrever a fase de vidro de spin corretamente. Para isso vamos usar a seguinte parametrização:

$$\begin{aligned} Q_{\alpha\beta} &= q + \delta \quad \text{se} \quad I\left(\frac{\alpha}{m}\right) = I\left(\frac{\beta}{m}\right) \\ Q_{\alpha\beta} &= q \quad \text{se} \quad I\left(\frac{\alpha}{m}\right) \neq I\left(\frac{\beta}{m}\right) \end{aligned} \quad (1.62)$$

introduz-se a parametrização (1.62) na energia livre (1.59) (ver o procedimento no apêndice A) e depois de muita álgebra, obtemos a seguinte expressão para a densidade média da energia livre:

$$\begin{aligned} \beta f &= \frac{\beta^2 J^2}{4} \left[-m(2q\delta + \delta^2) - q^2 + \frac{1}{p^2} \sum_{t,t'} R_{|t-t'|}^2 + \frac{1}{p} \right] - \\ &\quad \frac{1}{m} \int Dz \ln \int Dy (\text{tr exp } H(q, \delta)) \end{aligned} \quad (1.63)$$

onde

$$\begin{aligned} H(q, \delta) &= \frac{\beta^2 J^2}{2p^2} \sum_{t,t'} (R^{tt'} - q - \delta) \mu_t \mu_{t'} + B \sum_{t=1}^p \mu_t \mu_{t+1} + \\ &\quad \frac{\beta J}{p} (z\sqrt{q} + y\sqrt{\delta}) \sum_{t=1}^p \mu_t + pC \end{aligned} \quad (1.64)$$

e o contorno periódico é obedecido. q , δ e $R_{|t-t'|}^2$ satisfaz as seguintes equações do ponto de sela:

$$q = \int Dz \left[\frac{\int Dy \langle \mu^t \rangle_H (\text{Tr exp } H(q, \delta))^m}{\int Dy (\text{Tr exp } H(q, \delta))^m} \right]^2 \quad (1.65)$$

$$q + \delta = \int Dz \left[\frac{\int Dy \langle \mu^t \rangle_H^2 (\text{Tr exp } H(q, \delta))^m}{\int Dy (\text{Tr exp } H(q, \delta))^m} \right] \quad (1.66)$$

$$R_{|t-t'|} = \int Dz \left[\frac{\int Dy \langle \mu^t \mu^{t'} \rangle_H (\text{Tr exp } H(q, \delta))^m}{\int Dy (\text{Tr exp } H(q, \delta))^m} \right] \quad (1.67)$$

onde $\langle \dots \rangle_H$ significa $\text{Tr}(\dots e^H) / \text{Tr} e^H$, mas se pudermos assumir $R^{tt'}$ estático, no limite $p \rightarrow \infty$, βf pode ser então calculado:

$$\beta f = \frac{\beta^2 J^2}{4} [m(2q\delta - \delta^2) - q^2 + R^2] - \frac{1}{m} \int Dz \ln \int Dy \left(\int Dw 2 \cosh \beta \sqrt{\Gamma^2 + \Delta^2} \right)^m \quad (1.68)$$

onde

$$\Delta = w\sqrt{R - q - \delta} + z\sqrt{q} + y\sqrt{\delta} \quad (1.69)$$

A energia livre (1.68) na ausência do campo transversal é igual à energia livre obtida pelo G. Parisi (1.20) Mais tarde vamos ver que esses resultados (1.92) (1.68) serão úteis para comparação dos resultados obtidos na tese.

1.7.3 Vidro de spins em um campo transversal com simetria de réplicas.

Uso da fórmula de Trotter Suzuki em um campo transversal e com simetria de réplicas:

Thirumalai, D. et. al. [20] estudaram vidro de spins Ising em um campo transversal com a fórmula de Trotter-Suzuki que mapeia os spins quânticos em d-dimensões para d+1-dimensões para spins clássicos e obtiveram a energia livre:

$$-\beta f = -\frac{1}{4}\beta^2 J^2 (\chi^2 + 2\chi q) + \int Dz_1 \ln \int Dz_3 2 \cosh \sqrt{\Delta} \quad (1.70)$$

onde

$$\Delta = \beta J (h^2 + \Gamma^2)$$

$$h = z_1\sqrt{q} + z_3\sqrt{\chi}$$

Uso da técnica de integral funcional em um campo transversal com simetria de réplicas:

Mais tarde, Alba Theumann et. al. [3] estudaram vidro de spins Ising em um campo transversal usando um método alternativo: a técnica de integrais funcionais. Eles analisaram o modelo de Ising de alcance infinito de vidro de spin, pelo uso de variáveis de Grassmann na teoria de campos onde os operadores de spins são representados pela combinação bilinear de férmions com os dois modelos: quatro estados (4S) e dois estados (2S) para calcular a energia livre e outras quantidades termodinâmicas.

Então vamos definir o hamiltoniano para vidro de spins em um campo transverso:

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \widehat{S}_i^z \widehat{S}_j^z - 2\Gamma \sum_i \widehat{S}_i^x \quad (1.71)$$

Nos vidro de spins, o acoplamento J_{ij} é randômico e está distribuído na forma de distribuição Gaussiana:

$$P(J_{ij}) = \sqrt{\frac{N}{16\pi J^2}} \exp\left(-\frac{J_{ij}N}{16J^2}\right) \quad (1.72)$$

Os operadores de spins são representados pelos campos auxiliares de férmions:

$$\widehat{S}_i^z = \frac{1}{2} (\widehat{n}_{i\uparrow} - \widehat{n}_{i\downarrow}) \quad (1.73)$$

$$\widehat{S}_i^x = \frac{1}{2} (\widehat{a}_{i\uparrow}^\dagger \widehat{a}_{i\downarrow} + \widehat{a}_{i\downarrow}^\dagger \widehat{a}_{i\uparrow}) \quad (1.74)$$

onde o $\widehat{a}_{i,\sigma}^\dagger$ ($\widehat{a}_{i,\sigma}$) são operadores de criação (destruição) com regras de anticomutação de férmions e $\sigma = \uparrow$ e \downarrow que indica projeção de spins. O operador de contagem $n_{i\sigma}$ possui autovalores 0 e 1, então \widehat{S}_i^z (1.73) tem autovalores $\pm \frac{1}{2}$ correspondendo $\widehat{n}_{i\downarrow} = 1 - \widehat{n}_{i\uparrow}$ e dois autovalores nulos quando $\widehat{n}_{i\uparrow} = \widehat{n}_{i\downarrow}$.

A seguir vamos estudar modelos de quatro estados 4S e modelo de 2S, para isso vamos dar uma idéia de como são esses modelos.

Modelo de quatro estados (4S)

No modelo de quatro estados consiste fixa-se o potencial químico $\mu = 0$ para se ter o número de ocupação média de um férmion por sítio, dando origem a quatro estados possíveis com a sigla (4S):

N	N_+	N_-
2	1	1
1	1	0
1	0	1
0	0	0

onde N é o número total de elétrons por sítio, N_+ é o número de elétrons com spin \uparrow e N_- é o número de elétrons com spin \downarrow . A função de partição definida para este modelo é:

$$Z_{4S} = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} \quad (1.75)$$

onde Tr compreende o traço de uma matriz.

Modelo de dois estados (2S)

Neste modelo, nenhum dos estado ocupados $N = 2$, nem os completamente vazios $N = 0$, deverão contribuir para contagem correta na função de partição. Assim restam apenas dois estados possíveis:

N	N_+	N_-
1	1	0
1	0	1

Para que isso seja possível, é usada uma função Delta Kronecker que serve para restringir os estados indesejados, onde os operadores devem satisfazer a restrição $\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow} = 1$. A função de partição na forma restrita [23] é:

$$Z_{2S} = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} \prod_j^N \delta(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow} - 1) \quad (1.76)$$

Onde a restrição está representada por uma função Delta expressa em forma de integral:

$$\delta(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow} - 1) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_j e^{ix_j(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow} - 1)} \quad (1.77)$$

Aplicação da integral funcional nos vidro de spins em um campo transverso para o modelo 2S e o modelo 4S com simetria de réplicas:

Porém, os operadores \hat{S}^x e \hat{S}^z não comutam e não podem ser calculados como spins clássicos. Usaremos então uma das alternativas da fórmula de Trotter Suzuki que é a técnica de integral funcional descrita na seção 1.6.3.

A função de partição na integral funcional (1.48) pode ser escrita na forma única para os modelo 2S e 4S:

$$Z_{2lS} = \int D[\psi^* \psi] \prod_j \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_j e^{-\xi_j} e^{A_{2lS}} \quad (1.78)$$

onde, da equação (1.47)

$$A_{2lS} = \int_0^\beta \left\{ \sum_{j,s} \left[\psi_{j,\sigma}^* (\tau) \frac{d}{d\tau} \psi_{j,s} (\tau) + \xi_j \psi_{j,s}^* (\tau) \psi_{j,s} (\tau) \right] - H [\psi^* (\tau) \psi (\tau)] \right\} \quad (1.79)$$

onde substituímos α por j e

$$H [\psi^* (\tau) \psi (\tau)] = - \sum_{i,j} J_{ij} S_i^z (\tau) S_j^z (\tau) - 2\Gamma \sum_i S_i^x (\tau)$$

onde

$$S_i^z (\tau) = \sum_{s=+,-} \sigma \psi_{j,s}^* (\tau) \psi_{j,s} (\tau)$$

$$S_i^x (\tau) = \sum_{s,s'=+,-} \psi_{i,s}^* (\tau) \psi_{i,s'} (\tau)$$

$$l = 1 \quad \text{modelo de dois estados}$$

$$l = 2 \quad \text{modelo de quatro estados}$$

Adotamos a convenção $\xi_j = 0$ para modelo 4S e $\xi_j = ix_j$ para modelo 2S e a notação "s" serve para especificar o spin up \uparrow como "+" ou spin down \downarrow como "-". Fazendo uma representação de Fourier (ver no apêndice B), nós introduzimos os spinors:

$$\underline{\psi} (\omega) = \begin{pmatrix} \psi_{i+} (\omega) \\ \psi_{i-} (\omega) \end{pmatrix} \quad (1.80)$$

e as matrizes de Pauli,

$$\underline{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \underline{\sigma}_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \underline{\sigma}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (1.81)$$

Para escrever a parte da ação de vidro de spins,

$$A_{SG} = \beta \sum_{\Omega} \sum_{i,j} J_{ij} S_i^z (\Omega) S_j^z (\Omega), \quad (1.82)$$

onde

$$S_i^z (\Omega) = \frac{1}{2} \sum_{\omega} \underline{\psi}^\dagger (\omega + \Omega) \underline{\sigma}_z \underline{\psi} (\omega) \quad (1.83)$$

com frequências de Matsubara $\omega = (2n + 1)\pi$ e $\Omega = 2m\pi$. Na aproximação estática, nós retemos somente o termo $\Omega = 0$ na soma de frequência Ω .

Na parte da ação transversa é dado por:

$$A_\Gamma = \sum_j \underline{\psi}_j^\dagger(\omega) \underline{\gamma}^{-1}(\omega) \underline{\psi}_j(\omega) \quad (1.84)$$

onde o inverso do propagador é:

$$\underline{\gamma}_j^{-1}(\omega) = i\omega + \mu_j + \Gamma \underline{\sigma}_x. \quad (1.85)$$

A ação total pode ser resconstruída como

$$A_{2lS} = A_\Gamma + A_{SG}^{st} \quad (1.86)$$

onde A_{SG}^{st} é o componente estático da (1.82). Agora introduz-se o resultado (1.86) na (1.78) e (1.79). No entanto, não podemos calcular (1.78) na maneira usual por que J_{ij} é uma grandeza aleatória, portanto devemos replicar este sistema n vezes:

$$Z^n(J_{ij}) = \prod_{\alpha=0}^n Z_\alpha$$

em seguida calcular a média de todos J_{ij} :

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} = \int \prod_{i,j} dJ_{ij} P(J_{ij}) Z^n(J_{ij})$$

portanto,

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_{J_{ij}} &= \prod_{j=1}^N \prod_{\alpha=0}^n \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{j\alpha} e^{-\xi_{j\alpha}} \times \\ &\int D[\psi_\alpha^\dagger \psi_\alpha] \exp \left[\sum_\alpha \sum_\omega \underline{\psi}_j^\dagger(\omega) \underline{\gamma}_{j,\alpha}^{-1}(\omega) \underline{\psi}_j(\omega) + \frac{16\beta^2 J^2}{N} \sum_{\alpha\beta} \sum_i S_{i\alpha}^z S_{j\alpha}^z S_{i\beta}^z S_{j\beta}^z \right] \end{aligned}$$

A expressão acima pode ser escrita na forma mais simples e linear:

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} = \int_{-\infty}^{\infty} dQ_{\alpha\beta} e^{-\frac{N\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta}^2} \prod_{j=1}^N \left\{ \prod_{\alpha=0}^n \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{j\alpha} e^{-\xi_{j\alpha}} \Lambda_j(Q_{\alpha\beta}) \right\} \quad (1.87)$$

com

$$\Lambda_j(Q_{\alpha\beta}) = \int D[\psi_\alpha^\dagger \psi_\alpha] \exp \left[\sum_\alpha \sum_\omega \underline{\psi}_{j,\alpha}^\dagger(\omega) \underline{\gamma}_{j,\alpha}^{-1}(\omega) \underline{\psi}_{j,\alpha}(\omega) + 4\beta^2 J^2 \sum_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta} S_{j,\alpha}^z S_{j,\beta}^z \right] \quad (1.88)$$

Nós indicamos por $S_{j\alpha}^z$ componente estático S_j^z ($\Omega = 0$) da equação (1.83). Nós assumimos a solução de simetria de réplica das equações do ponto de sela:

$$Q_{\alpha\neq\beta} = q \quad Q_{\alpha=\alpha} = q + \bar{\chi} \quad (1.89)$$

onde q é o parâmetro de ordem de vidro de spins e $\bar{\chi}$ é relatado para a susceptibilidade estática por $\bar{\chi} = \beta\chi$.

A soma de todos α na parte da ação do spin produz também um termo quadrático e precisamos linearizar novamente pela introdução de novo campo auxiliar, com o resultado:

$$\Lambda_j(q, \bar{\chi}) = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \prod_{\alpha=0}^n \int_{-\infty}^{\infty} D\xi_\alpha \int D[\psi_\alpha^\dagger \psi_\alpha] e^{\sum_\omega \underline{\psi}_\alpha^\dagger(\omega) \underline{\mathbf{G}}_{j\alpha}^{-1}(\omega) \underline{\psi}_\alpha(\omega)} \quad (1.90)$$

com

$$\underline{\mathbf{G}}_{j\alpha}^{-1}(\omega) = \underline{\gamma}_j^{-1}(\omega) + h_\alpha \underline{\sigma}^z$$

$$h_\alpha = \beta J \left(z_1 \sqrt{2q} + z_3 \sqrt{2\bar{\chi}} \right)$$

Agora queremos calcular a seguinte integral:

$$I = \int D[\psi_\alpha^\dagger \psi_\alpha] e^{\sum_\omega \underline{\psi}_\alpha^\dagger(\omega) \underline{\mathbf{G}}_j^{-1}(\omega) \underline{\psi}_\alpha(\omega)},$$

o cálculo dessa integral é tedioso e apresentaremos apenas o resultado da integral (5.31) obtida no apêndice C :

$$I = \prod_{\alpha=0}^n \left\{ 1 + e^{2\xi_{i\alpha}} + 2e^{\xi_{i\alpha}} \cosh \sqrt{\Delta_{i\alpha}} \right\}$$

Introduzimos a solução (5.31) em (1.90), obtemos o seguinte resultado:

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} = e^{-\frac{nN\beta^2 J^2}{2} [\bar{\chi}^2 + 2q\bar{\chi}]} \prod_{j=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} Dz_1 \prod_{\alpha=0}^n \int_{-\infty}^{\infty} Dz_{3\alpha} \int_0^{2\pi} \frac{dx_{j\alpha}}{2\pi} \left[e^{-\xi_{j\alpha}} + e^{\xi_{j\alpha}} + 2 \cosh \sqrt{\Delta_{j\alpha}} \right] \right] \quad (1.91)$$

onde

$$\Delta_\alpha = \beta^2 J^2 \left[z_1 \sqrt{2q} + z_{3\alpha} \sqrt{2\bar{\chi}} \right]^2 + \beta^2 \Gamma^2$$

Para modelo de quatro (4S) é não restrito e $\xi_{j\alpha} = 0$ então as integrais de todos os $x_{j\alpha}$ é igual a uma unidade na (1.91). Para o modelo restrito de dois estados (2S) nós temos $\xi_{j\alpha} = ix_j$ da (1.91). Nós obtemos para o modelo $2lS$ estados, $l=1$ e $l=2$:

$$\beta F_{2lS} = \frac{1}{2} (\beta J)^2 [\bar{\chi}^2 + 2q\bar{\chi}] - \int_{-\infty}^{\infty} Dz_1 \log [K_{2lS}(q, \bar{\chi}, z_1)] \quad (1.92)$$

onde $l = 1$ se refere ao modelo de dois estados, $l = 2$ se refere ao modelo de quatro estados.

$$K_{2lS}(q, \bar{\chi}, z_1) = (-1)^2 + 1 + 2 \int_{-\infty}^{\infty} Dz_3 \cosh \sqrt{\Delta} \quad (1.93)$$

Na energia livre (1.92), no modelo 2S ($l = 1$) é igual (1.70) e quando $\Gamma = 0$ as equações (1.92)-(1.95) reproduzem os resultados de Sherrington Kirkpatrick, enquanto no modelo 4S ($l = 2$) recuperam os resultados do trabalho de A. Theumann et al. [14].

As equações do ponto de sela para o parâmetro de ordem são:

$$\bar{\chi}_{2lS} = \int_{-\infty}^{\infty} Dz_1 \frac{1}{K_{2lS}} \int_{-\infty}^{\infty} Dz_3 \left\{ \frac{h^2}{\Delta} \cosh \sqrt{\Delta} + \frac{\beta^2 J^2}{\Delta^{1.5}} \sinh \sqrt{\Delta} \right\} - q_{2lS} \quad (1.94)$$

$$q_{2lS} = \int_{-\infty}^{\infty} Dz_1 \left\{ \frac{1}{K_{2lS}} \int_{-\infty}^{\infty} Dz_3 \sinh \sqrt{\Delta} \frac{h}{\sqrt{\Delta}} \right\}^2 \quad (1.95)$$

onde Δ :

$$\sqrt{\Delta} = \left(\beta J z_1 \sqrt{2q} + \beta J z_3 \sqrt{2\bar{\chi}} \right)^2 + \beta^2 \Gamma^2 \quad (1.96)$$

$$h = \beta J z_1 \sqrt{2q} + \beta J z_3 \sqrt{2\bar{\chi}} \quad (1.97)$$

Obtemos também o autovalor de Almeida-Thouless e a entropia para ambos os modelos:

$$\lambda_{2lS}^{AT} = 1 - 2 (\beta^2 J^2) \int_{-\infty}^{\infty} Dz_1 \frac{1}{K_{2lS}^4} \times \left\{ K_{2lS} \int_{-\infty}^{\infty} Dz_3 \left[\cosh \sqrt{\Delta} \frac{h^2}{\Delta} + \frac{\beta^2 \Gamma^2}{\Delta^{3/2}} \sinh \sqrt{\Delta} \right] - \left[\int_{-\infty}^{\infty} Dz_3 \sinh \sqrt{\Delta} \frac{h}{\sqrt{\Delta}} \right]^2 \right\}^2. \quad (1.98)$$

$$\frac{S}{k} = -\frac{3}{2}(\beta J)^2 [\bar{\chi}^2 + 2q\bar{\chi}] + \int_{-\infty}^{\infty} Dz_1 \log [2K_{2lS}(q, \bar{\chi}, z)] - (\beta\Gamma)^2 \int_{-\infty}^{\infty} Dz_3 \frac{\sinh \sqrt{\Delta}}{\sqrt{\Delta}} \quad (1.99)$$

Na proximidade da temperatura crítica, a energia livre é expandida em série de potências de q :

$$\beta F_{2lS} = \beta F_{2lS}^0 + B_{2lS}q^2 + C_{2lS}q^3 \quad (1.100)$$

onde os coeficientes são:

$$B_{2lS} = [D_{2lS} - 1][D_{2lS} - 2]$$

$$C_{2lS} = -\frac{4}{3}[D_{2lS} - 1] \{2(D_{2lS} - 1)^2 + 3(D_{2lS} - 2)\} \quad (1.101)$$

e

$$D_L = \frac{L + J_1}{L + J_2} \quad (1.102)$$

$$J_n = \int_{-\infty}^{\infty} Dz_3 z_3^{2n} \cosh \sqrt{2\bar{\chi}_0 \beta^2 J^2 + \beta^2 \Gamma^2} \quad (1.103)$$

onde $n = 0, 1$.

$$L = \frac{1}{2} \left((-1)^l + 1 \right)$$

Na equação (1.103) nós também precisamos:

$$\bar{\chi}(q=0) = \bar{\chi}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}\beta J} \sqrt{D_L - 1} \quad (1.104)$$

Como $C_{2lS} < 0$, a fase vidro de spins é caracterizada por $B_{2lS} > 0$ dando, um máximo em vez, um mínimo da energia livre. A temperatura crítica é obtida resolvendo simultaneamente:

$$D_L = \frac{L + J_1(\beta_c)}{L + J_0(\beta_c)} = 2$$

$$\bar{\chi}_c = \frac{1}{\beta_c J \sqrt{2}} \quad (1.105)$$

Apresentamos um resultado numérico para $T_c(\Gamma)$ e a entropia $S_0 = S(T_c, \Gamma)$:

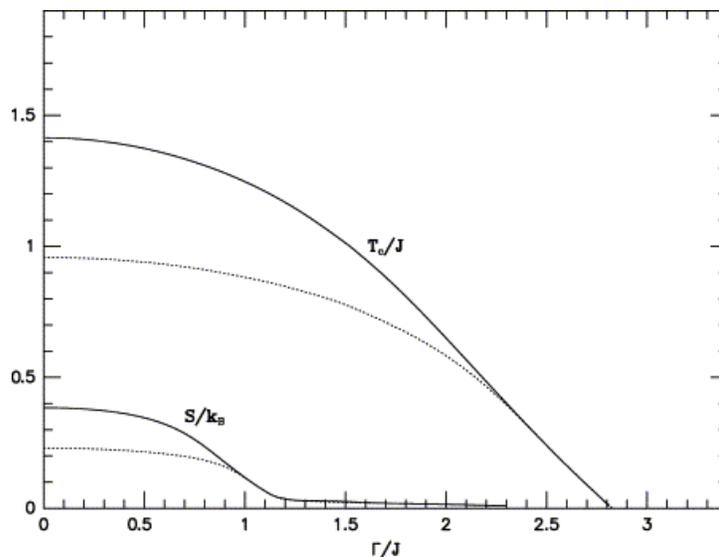


Figura 9: Temperatura crítica $T_c(\Gamma)$ e entropia na linha crítica $S_c(T_c, \Gamma)$, para modelo 4S é a linha pontilhada e modelo 2S é linha sólida. A linha crítica $T_c(\Gamma)$ separa a fase paramagnética e a fase de vidro de spins.

As equações (1.105) podem ser resolvidas analiticamente quando $\Gamma = 0$ e $T_c = 0$. Em $\Gamma = 0$ a temperatura crítica para modelo de dois estados (2S) é $T_c = \sqrt{2}J$ e no modelo de quatro estados é $T_c = J/1.04$. Em $T_c = 0$ determinamos o campo crítico $\Gamma_c = 2\sqrt{2}J$ e $T_c \approx \frac{2}{3}(\Gamma_c - \Gamma)$ para ambos os modelos.

Sobre a instabilidade de Almeida Thouless. A solução exata λ^{AT} da equação (1.98) em ambos os limites $\Gamma = 0$ e $\Gamma = \Gamma_c$, apresentam que $\lambda^{AT} = 0$ o ponto de transição para ambos modelos 2-S e 4-S, enquanto resultados numéricos confirmam que $\lambda^{AT} = 0$ na linha crítica $T_c(\Gamma)$ e $\lambda^{AT} < 0$ para $T < T_c(\Gamma)$, indicando a instabilidade da solução de simetria de réplicas na fase ordenada para ambos os modelos.

Capítulo 2

Vidro de spins em um campo transverso I: Teoria de Parisi.

2.1 Cálculo da energia livre para o modelo de dois estados (2S) e o modelo de quatro estados (4S).

Para calcular a energia livre, vamos começar com o hamiltoniano de Ising para o vidro de spin em campo transverso Γ da equação (1.71) e a função de partição de (1.87) e (1.88) mas agora aplicamos o primeiro estágio de quebra de simetria de réplicas:

$$\begin{aligned} Q_{\alpha\alpha} &= q + \bar{\chi} \\ Q_{\alpha\beta} &= q + \delta \quad \text{se} \quad I\left(\frac{\alpha}{m}\right) = I\left(\frac{\beta}{m}\right) \\ Q_{\alpha\beta} &= q \quad \text{se} \quad I\left(\frac{\alpha}{m}\right) \neq I\left(\frac{\beta}{m}\right) \end{aligned} \quad (2.1)$$

Onde $I(x)$ é o menor inteiro ou igual a x . Agora aplicamos os resultados (2.1) em (1.87) e (1.88) e com auxílio dos cálculos do apêndice A:

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} \simeq e^{-\frac{\beta^2 J^2 N n}{2} \left[(\bar{\chi} + q)^2 - (\delta + q)^2 + m(\delta^2 + 2\delta q) + \sum_i^N \ln \Lambda_i(q, \delta, \bar{\chi}) \right]} \quad (2.2)$$

com

$$\Lambda_i(q, \delta, \bar{\chi}) = \prod_{\alpha} \int D[\psi_{i,\alpha}^* \psi_{i,\alpha}] \int_0^{2\pi} \frac{dx_{i,\alpha}}{2\pi} e^{-\xi_{i\alpha} + A_{\Gamma} \times}$$

$$e^{\left\{ 4\beta^2 J^2 \left((\bar{\chi} - \delta) \sum_{\alpha} [S_{\alpha j}]^2 + \delta \sum_{K=1}^{n/m} \left(\sum_{\alpha=(K-1)m+1}^{km} S_{\alpha, i}^z \right)^2 + q \left[\sum_{K=1}^{n/m} \sum_{\alpha=(K-1)m+1}^{km} S_{\alpha, i}^z \right]^2 \right) \right\}}$$

Agora precisamos linearizar os termos $[S_{\alpha j}]^2$, $\left(\sum_{\alpha=(K-1)m+1}^{km} S_{\alpha, i}^z \right)^2$ e

$\left[\sum_{K=1}^{n/m} \sum_{\alpha=(K-1)m+1}^{km} S_{\alpha, i}^z \right]^2$ com auxílio da identidade na forma de integral Gaussiana (1.9) com variáveis de campos $z_{3,\alpha}$, $z_{2,K}$ e z_1 respectivamente:

$$\Lambda_i(q, \delta, \bar{\chi}) = \prod_{\alpha} \int D [\psi_{i,\alpha}^* \psi_{i,\alpha}] \int_0^{2\pi} \frac{dx_{i,\alpha}}{2\pi} e^{-\xi_{i\alpha} - A_{\Gamma}} \int Dz_1 \prod_{\alpha, K} \int Dz_{2,K} \int Dz_{3,\alpha} \times$$

$$\exp \left\{ 2\beta J \left[\sqrt{2(\bar{\chi} - \delta)} \sum_{\alpha} z_{3,\alpha} S_{\alpha, i}^z + \sum_{K=1}^{n/m} \sum_{\alpha=(K-1)m+1}^{km} \left(z_{2,K} \sqrt{2\delta} + z_1 \sqrt{2q} \right) S_{\alpha, i}^z \right] \right\}$$

onde

$$\int Dz = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{1}{2}z^2}$$

Abrindo o termo de A_{Γ}

$$A_{\Gamma} = \sum_{\alpha=0}^n \sum_{\omega} \underline{\psi}_{\alpha}^{\top}(\omega) \underline{\gamma}_{\alpha}^{-1}(\omega) \underline{\psi}_{\alpha}(\omega) = \sum_{i,s,\omega,\alpha} (i\beta\omega + \xi_{i\alpha}) \psi_{i,s,\alpha}^*(\omega) \psi_{i,s,\alpha}(\omega) + 2\beta\Gamma \sum_i S_{i,\alpha}^x \quad (2.3)$$

e lembrando que $\sum_{K=1}^{n/m} \sum_{\alpha=(K-1)m+1}^{km} (\dots) = \sum_{K=1}^{n/m} \sum_{\alpha=1}^m (\dots)$ e a soma $\sum_{\alpha} z_{3,\alpha} S_{\alpha, i}^z =$

$\sum_{K=1}^{n/m} \sum_{\alpha=1}^m z_{3,\alpha} S_{\alpha, i}^z$, podemos escrever:

$$\Lambda_i(q, \delta, \bar{\chi}) = \prod_{\alpha} \int Dz_1 \prod_K \int Dz_{2,K} \int Dz_{3,\alpha} \int D [\psi_{i,\alpha}^* \psi_{i,\alpha}] \int \frac{dx_{i,\alpha}}{2\pi} \times$$

$$e^{\left[\sum_{\alpha, j} \left(-ix_j + \sum_{\omega, \alpha, s} (i\beta\omega + \xi_{i,\alpha} + sh_{\alpha, k}) \psi_{i,s,\alpha}^*(\omega) \psi_{i,s,\alpha}(\omega) + 2\beta \sum_{s,s'} \psi_{i,s,\alpha}^*(\omega) \psi_{i,s',\alpha}(\omega) \right) \right]}$$

onde

$$h_{\alpha,k} = \beta J \left(z_{3,\alpha} \sqrt{2(\bar{\chi} - \delta)} + z_{2,K} \sqrt{2\delta} + z_1 \sqrt{2q} \right)$$

A equação acima também pode ser escrita assim:

$$\begin{aligned} \Lambda_i(q, \delta, \bar{\chi}) &= \prod_{\alpha=0}^n \int Dz_1 \prod_{K=1}^{n/m} \int Dz_{2,K} \int Dz_{3,\alpha} \int D [\psi_{i,\alpha,K}^* \psi_{i,\alpha,K}] \int_0^{2\pi} \frac{dx_{i,\alpha,K}}{2\pi} \\ &\exp \left\{ \sum_{k,i,\alpha,\omega} \underline{\psi}_{i,\alpha,K}^\top(\omega) \underline{\mathbf{G}}_{i,\alpha,K}^{-1}(\omega) \underline{\psi}_{i,\alpha,K}(\omega) \right\}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Onde $\underline{\mathbf{G}}_{i\alpha}^{-1}(\omega)$ é a inversa da função de Green:

$$\underline{\mathbf{G}}_{i,\alpha,K}^{-1}(\omega) = h_{i,\alpha,K} \underline{\boldsymbol{\sigma}}^z + \lambda_{i,\alpha,K}(\omega) \mathbf{I} + \beta \Gamma \underline{\boldsymbol{\sigma}}^x \quad (2.5)$$

com

$$\lambda_{i,\alpha,K}(\omega) = i\beta\omega + \xi_{i,\alpha,K} \quad (2.6)$$

e $\underline{\boldsymbol{\sigma}}^z$ e $\underline{\boldsymbol{\sigma}}^x$ são matrizes de Pauli e \mathbf{I} é a matriz identidade dadas pelas equações (5.15).

Agora precisamos calcular a seguinte integral funcional:

$$I = \int D [\psi_{i,\alpha,K}^*, \psi_{i,\alpha,K}] \exp \left\{ \sum_{K,i,\alpha,\omega} \underline{\psi}_{i,\alpha,K}^\top(\omega) \underline{\mathbf{G}}_{i\alpha,K}^{-1}(\omega) \underline{\psi}_{i,\alpha,K}(\omega) \right\}$$

o cálculo desta integral é um pouco tedioso, então deixamos os detalhes no apêndice C. Aqui vamos usar o resultado da integral funcional (5.31) obtida no apêndice C:

$$I = \prod_{\alpha=0}^n \left\{ 1 + e^{2\xi_{i\alpha,K}} + 2e^{\xi_{i\alpha,K}} \cosh \sqrt{\Delta_{i\alpha,K}} \right\} \quad (2.7)$$

De (2.7) em (2.4):

$$\begin{aligned} \Lambda_i(q, \delta, \bar{\chi}) &= \prod_{\alpha=0}^n \int Dz_1 \prod_{K=1}^{n/m} \int Dz_{2,K} \int Dz_{3,\alpha} \times \\ &\int_0^{2\pi} \frac{dx_{i,\alpha,K}}{2\pi} \left\{ 1 + e^{2\xi_{i\alpha,K}} + 2e^{\xi_{i\alpha,K}} \cosh \sqrt{\Delta_{i\alpha,K}} \right\} \end{aligned} \quad (2.8)$$

Para simplificá-lo, vamos calcular por partes, vamos calcular primeiro no modelo de quatro estados 4S, portanto $\xi_{i,\alpha,K} = 0$,

$$\Lambda_i(q, \delta, \bar{\chi}) = \int Dz_1 \prod_{\alpha=0}^n \prod_K^{n/m} \int Dz_{2,K} \int Dz_{3,\alpha} \int_0^{2\pi} \frac{dx_{i,\alpha,K}}{2\pi} \left\{ 2 + 2 \cosh \sqrt{\Delta_{i,\alpha,K}} \right\} \quad (2.9)$$

$$\Lambda_i(q, \delta, \bar{\chi}) = \int Dz_1 \prod_{\alpha}^n \prod_{K=1}^{n/m} \int Dz_{2,K} \int Dz_{3,\alpha} \left\{ 2 + 2 \cosh \sqrt{\Delta_{i,\alpha,K}} \right\}$$

A integral a respeito de $z_{3,\alpha}$ é a mesma para todas as réplicas e a integral $z_{2,K}$ é a mesma para todos os grupos K , portanto obtemos um resultado mais simplificado:

$$\Lambda_i = \int Dz_1 \left\{ \int Dz_2 \left[\int Dz_3 \left(2 + 2 \cosh \sqrt{\Delta(z_3, z_2, z_1)} \right) \right]^m \right\}^{n/m}$$

mas n/m é pequeno, então fazemos uma aproximação $x^{n/m} \simeq 1 + n/m \log x$,

$$\Lambda_i = \int Dz_1 \left\{ 1 + \frac{n}{m} \ln \int Dz_2 \left[\int Dz_3 \left(2 + 2 \cosh \sqrt{\Delta(z_3, z_2, z_1)} \right) \right]^m \right\} \quad (2.10)$$

introduzimos este resultado (2.10) em (2.2):

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} \simeq e^{-\frac{\beta^2 J^2 N n}{2} \left[(\bar{\chi}+q)^2 - (\delta+q)^2 + m(\delta^2+2\delta q) + \frac{1}{nN} \sum_i^N \ln \int Dz_1 \left\{ 1 + \frac{n}{m} \ln \int Dz_2 \left[\int Dz_3 \left(2 + 2 \cosh \sqrt{\Delta(z_3, z_2, z_1)} \right) \right]^m \right\} \right]} \quad (2.11)$$

nota-se que a soma de i é independente dentro da expressão logarítmica (2.11) e portanto,

$$\begin{aligned} & \langle Z^n \rangle_{J_{ij}} \\ & \simeq e^{-\frac{\beta^2 J^2 N n}{2} \left[(\bar{\chi}+q)^2 - (\delta+q)^2 + m(\delta^2+2\delta q) + \frac{1}{n} N \ln \left(\int Dz_1 \left\{ 1 + \frac{n}{m} \ln \int Dz_2 \left[\int Dz_3 \left(2 + 2 \cosh \sqrt{\Delta(z_3, z_2, z_1)} \right) \right]^m \right\} \right) \right]} \end{aligned}$$

Também fazemos uma nova aproximação $\ln(1 + \frac{n}{m} \ln(\dots)) \simeq \frac{n}{m} \ln(\dots)$:

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} \simeq e^{-\frac{\beta^2 J^2 N n}{2} \left[(\bar{\chi}+q)^2 - (\delta+q)^2 + m(\delta^2+2\delta q) + \frac{1}{m} \left(\int Dz_1 \ln \int Dz_2 \left[\int Dz_3 \left(2 + 2 \cosh \sqrt{\Delta(z_3, z_2, z_1)} \right) \right]^m \right) \right]} \end{aligned}$$

A expressão acima é introduzida em (1.7) e obtemos o seguinte resultado:

$$\beta f_{4S} = \frac{1}{2}\beta J^2 \{(\bar{\chi} + q)^2 - (\delta + q)^2 + m(\delta^2 + 2\delta q)\} - \frac{1}{m} \int Dz_1 \ln K_{4S} \quad (2.12)$$

onde

$$K_{4S} = \int Dz \Phi_{4S}^m$$

$$\Phi_{4S}^m = \int Dz_3 \left(2 + 2 \cosh \sqrt{\Delta(z_3, z_2, z_1)} \right)$$

A seguir, vamos calcular o caso no modelo de dois estados, fazendo $\xi_{i,\alpha,k} = ix_{i,\alpha,k}$ na equação (2.8) e obtemos o seguinte resultado:

$$\Lambda_i(q, \delta, \bar{\chi}) = \prod_{\alpha} \int Dz_1 \prod_K \int Dz_{2,K} \int Dz_{3,\alpha} \left\{ 2 \cosh \sqrt{\Delta_{i\alpha,k}} \right\} \quad (2.13)$$

Introduzindo (2.13) em (2.2):

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} \simeq e^{-\frac{\beta^2 J^2 N n}{2} [(\bar{\chi} + q)^2 - (\delta + q)^2 + m(\delta^2 + 2\delta q) + \frac{1}{m} (\int Dz_1 \ln \int Dz_2 [\int Dz_3 (2 \cosh \sqrt{\Delta(z_3, z_2, z_1)})]^m)]}$$

introduzindo este resultado em (1.7), obtemos uma expressão para a média da energia livre:

$$\beta f_{2S} = \frac{1}{2}\beta J^2 \{(\bar{\chi} + q)^2 - (\delta + q)^2 + m(\delta^2 + 2\delta q)\} - \frac{1}{m} \int Dz_1 \ln K_{2S} \quad (2.14)$$

onde

$$K_{2S} = \int Dz \Phi_{2S}^m$$

$$\Phi_{2S}^m = \int Dz_3 \left(2 \cosh \sqrt{\Delta(z_3, z_2, z_1)} \right)$$

Conferindo-se as equações Φ_{4S}^m , Φ_{2S}^m , f_{2S} e f_{4S} , podem-se deduzir que são muito semelhantes e então podemos escrever a energia livre na forma única:

$$\beta f_{2lS} = \frac{1}{2}\beta J^2 \{(\bar{\chi} + q)^2 - (\delta + q)^2 + m(\delta^2 + 2\delta q)\} - \frac{1}{m} \int Dz_1 \ln K_{2lS} \quad (2.15)$$

$$K_{2S} = \int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^m \quad (2.16)$$

$$\Phi_{0,2lS} = \int Dz_3 \left(1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Delta} \right) \quad (2.17)$$

$$\Delta = \sqrt{\gamma^2 + \beta^2 \Gamma^2} \quad (2.18)$$

$$\gamma = \beta J \left(z_3 \sqrt{2(\bar{\chi} - \delta)} + z_2 \sqrt{2\delta} + z_1 \sqrt{2q} \right) \quad (2.19)$$

onde usamos a convenção $l = 1$ é no modelo de dois estados e $l = 2$ é no modelo de quatro estados.

2.2 Soluções das equações do ponto de sela da energia livre para ambos os modelos:

A energia livre pode ser maximizada por meio das soluções das equações do ponto de sela. Essas soluções podem ser encontradas na extremização da energia livre:

$$\frac{\partial f}{\partial q} = \frac{\partial f}{\partial \bar{\chi}} = \frac{\partial f}{\partial \delta} = 0 \quad (2.20)$$

aqui vamos fixar m que é um parâmetro da quebra de simetria de réplicas que está compreendida no intervalo $0 < m < 1$. Agora empregamos o método ponto de sela (2.20) da energia livre (2.15) encontramos os seguintes resultados:

$$q_{2lS} = \int Dz_1 \frac{1}{K_{2lS}} \left(\int Dz_2 (\Phi_{0,2lS})^{m-1} \Phi_1 \right)^2 \quad (2.21)$$

$$\delta_{2lS} = \int Dz_1 \frac{1}{K_{2lS}} \int Dz_2 (\Phi_{0,2lS})^{m-2} \Phi_1^2 - q_{2lS} \quad (2.22)$$

$$\bar{\chi}_{2lS} = \int Dz_1 \frac{1}{K_{2lS}} \int Dz_2 (\Phi_{0,2lS})^{m-1} \Phi_2 - q_{2lS} \quad (2.23)$$

onde $\Phi_{0,2lS}$ é igual a (2.17) e Φ_1 e Φ_2 são:

$$\Phi_1 = 2 \int Dz_3 \sinh \sqrt{\Delta} \frac{\gamma}{\sqrt{\Delta}} \quad (2.24)$$

$$\Phi_2 = \int Dz_3 \left\{ 2 \cosh \sqrt{\Delta} \frac{\gamma^2}{\Delta} + 2 \sinh \sqrt{\Delta} \frac{\beta^2 \Gamma^2}{\Delta^{3/2}} \right\} \quad (2.25)$$

Para simplificar as notações, daqui em diante, vamos adotar as seguintes notações $q_{2LS} = q$, $\delta_{2LS} = \delta$ e $\bar{\chi}_{2LS} = \bar{\chi}$. As equações (2.21), (2.22), (2.23) possuem a dependência de $q, \delta, \bar{\chi}, \beta, \Gamma$ e m . Isto é:

$$\begin{aligned} q &= q(q, \delta, \bar{\chi}, \Gamma, m, \beta) \\ \delta &= \delta(q, \delta, \bar{\chi}, \Gamma, m, \beta) \\ \bar{\chi} &= \bar{\chi}(q, \delta, \bar{\chi}, \Gamma, m, \beta) \end{aligned}$$

Mas Γ, m, β são constantes e valores conhecidos, então as três equações reduzem-se na forma:

$$\begin{aligned} q &= q(q, \delta, \bar{\chi}) \\ \delta &= \delta(q, \delta, \bar{\chi}) \\ \bar{\chi} &= \bar{\chi}(q, \delta, \bar{\chi}) \end{aligned} \tag{2.26}$$

Assim temos três equações com três variáveis q, δ e $\bar{\chi}$, portanto podemos resolver as três equações e determinar q, δ e $\bar{\chi}$. No entanto não podemos determinar q, δ e $\bar{\chi}$ algebricamente, mas numericamente, tem vários métodos para resolver isso, por exemplo. Um método bastante simples e rudimentar é o método do ponto fixo ¹.

2.3 Entropia, energia interna.

A entropia é dada por [29]:

$$S = -\frac{\partial f}{\partial T} \tag{2.27}$$

¹O ponto fixo é um método numérico para encontrar uma solução para $x_{i+1} = f(x_i)$ com um valor inicial x_0 .

Por exemplo, no ferromagnetismo, a magnetização m é igual a:

$$m = \tanh \beta m$$

β é a constante igual ao inverso da temperatura, mas precisamos determinar m . Porém, não podemos determinar m pelo método algébrico. Então empregamos o método do ponto fixo. Neste método, reescrevemos a expressão acima como:

$$m_{i+1} = \tanh \beta m_i$$

com o valor inicial m_0 .

O processo é o seguinte: m_0 vai determinar o próximo valor m_1 , depois este é colocado de novo no $\tanh(\beta m_1)$ e temos o próximo valor m_2 e assim por diante. Até encontrar um valor final para m_n depois de n interações, tal que a diferença $|m_{i+1} - m_i| < \varepsilon$, onde ε é um número significativamente pequeno.

onde T é a temperatura. Mas dentro da expressão da energia livre temos β que é inverso da temperatura, isto é $\beta = 1/T$, então devemos transformá-la (2.27) em derivada de β :

$$\begin{aligned}\partial\beta &= -\frac{1}{T^2}\partial T = -\beta^2\partial T, \\ \frac{\partial\beta}{\partial T} &= -\beta^2.\end{aligned}\tag{2.28}$$

Agora na (2.27) precisamos “abrir” explicitando as derivadas de β e logo substituir (2.28):

$$S = -\frac{\partial f}{\partial T} = -\frac{\partial f}{\partial\beta}\frac{\partial\beta}{\partial T} = \beta^2\frac{\partial f}{\partial\beta}\tag{2.29}$$

Assim, podemos derivar (2.15) em relação a β :

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial\beta} &= J^2 \{(\bar{\chi} + q)^2 - (q + \delta)^2 + m(\delta^2 + 2q\delta)\} + \frac{1}{m\beta^2} \int Dz \ln K_{2lS} - \\ &\frac{1}{\beta} \int Dz_1 \frac{1}{K_{2lS}} \int Dz_2 (\Phi_{0,2lS})^{m-1} \int Dz_3 2 \sinh \sqrt{\Delta} \left(z_1 \sqrt{2q} + z_2 \sqrt{2\delta} + z_3 \sqrt{2(\bar{\chi} - \delta)} \right) \\ &\quad - \frac{1}{\beta} \int Dz_1 \frac{1}{K_{2lS}} \int Dz_2 (\Phi_{2lS})^{m-1} \int Dz_3 2 \sinh \sqrt{\Delta} \frac{\beta\Gamma^2}{\sqrt{\Delta}}.\end{aligned}$$

Fazendo integração por partes em z_1, z_2 e z_3 temos:

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial\beta} &= -J^2 \{(\bar{\chi} + q)^2 - (q + \delta)^2 + m(\delta^2 + 2q\delta)\} + \frac{1}{m\beta^2} \int Dz \ln K_{2lS} - \\ &2J^2 m \int Dz_1 \frac{1}{K_{2lS}} \left(\int Dz_2 (\Phi_{0,2lS})^{m-1} \Phi_1 \right)^2 q - \\ &2J^2 (q + \delta) \int Dz_1 \frac{1}{K_{2lS}} \left\{ (m-1) \int Dz_2 (\Phi_{0,2lS})^{m-2} R_1^2 + \int Dz_2 (\Phi_{0,2lS})^{m-1} R_2 \right\} \\ &2J^2 (\bar{\chi} - \delta) \int Dz_1 \frac{1}{K_{2lS}} \int Dz_2 (\Phi_{0,2lS})^{m-1} 2 \int Dz_3 \sinh \sqrt{\Delta} \frac{\beta\Gamma^2}{\sqrt{\Delta}}\end{aligned}\tag{2.30}$$

Agora identificamos as soluções do ponto de sela (2.21)-(2.23) e escrevemos (2.30) na forma mais compacta:

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial\beta} &= -\frac{3J^2}{2} \{(\bar{\chi} + q)^2 - (q + \delta)^2 + m(\delta^2 + 2q\delta)\} + \frac{1}{m\beta^2} \int Dz \ln K_{2lS} - \\ &\frac{1}{\beta} \int Dz_1 \frac{1}{K_{2lS}} \int Dz_2 (\Phi_{0,2lS})^{m-1} \int Dz_3 2 \sinh \sqrt{\Delta} \frac{\beta\Gamma^2}{\sqrt{\Delta}},\end{aligned}\tag{2.31}$$

finalmente introduzimos (2.31) em (2.29),

$$S = -\frac{3J^2\beta^2}{2} \{(\bar{\chi} + q)^2 - (q + \delta)^2 + m(\delta^2 + 2q\delta)\} + \frac{1}{m} \int Dz \ln K_{2lS} - \int Dz_1 \frac{1}{K_{2lS}} \int Dz_2 (\Phi_{0,2lS})^{m-1} \int Dz_3 2 \sinh \sqrt{\Delta} \frac{\beta^2 \Gamma^2}{\sqrt{\Delta}}. \quad (2.32)$$

Através da energia livre (2.15) e a entropia (2.32) podemos calcular a energia interna, usando a relação

$$U = F - TS \quad (2.33)$$

que dá:

$$U = -J^2\beta \{(\bar{\chi} + q)^2 - (q + \delta)^2 + m(\delta^2 + 2q\delta)\} - \int Dz_1 \frac{1}{K_{2lS}} \int Dz_2 (\Phi_{0,2lS})^{m-1} \int Dz_3 2 \sinh \sqrt{\Delta} \frac{\beta^2 \Gamma^2}{\sqrt{\Delta}}. \quad (2.34)$$

2.4 Determinação da temperatura crítica T_c e o campo transversal crítico Γ_c .

Agora vamos expandir a energia livre na proximidade da temperatura crítica. Nesta situação, os parâmetros de ordem q e δ são pequenos, então é possível expandir a energia livre em série de potência de q e δ . Porém, a dificuldade aqui é não se poder expandir f em termos de q e δ sem expandir $\bar{\chi}$. Porque $\bar{\chi}$ também depende de q e δ e deve ser expandido em série de potências de q e δ separadamente, ver o cálculo detalhado no apêndice D. O resultado da expansão de série de potências para $\bar{\chi}$ (5.56) é

$$\bar{\chi} = \bar{\chi}_0 - q + 4\zeta(m-1)\delta q + 2(m-1)\zeta\delta^2 - 2\zeta q^2$$

onde a ζ é dado pela equação (5.58),

$$\zeta = \frac{\beta^4 J^4 \left[\frac{\phi_4 \phi_2}{\phi_{0,2lS}^2} - \frac{\phi_2^3}{\phi_{0,2lS}^3} \right]}{1 - \beta^2 J^2 \left\{ \frac{\phi_4}{\phi_{0,2lS}} - \frac{\phi_2^2}{\phi_{0,2lS}^2} \right\}}.$$

onde $\phi_{0,2lS}$, ϕ_2 e ϕ_4 é dado pela equação (5.43), (5.45) e (5.46) respectivamente.

Para completar o cálculo, devemos introduzir (5.56) na energia livre e expandir novamente em série de potência de q e δ . Através do resultado no apêndice D, temos a seguinte equação para a energia livre (5.70):

$$f = f_0 - \frac{1}{2} D m q^2 + \frac{1}{2} (q + \delta)^2 (m - 1) D,$$

onde

$$D = \beta J^2 \left(1 - 2\beta^2 J^2 \frac{\phi_2^2}{\phi_{0,2IS}^2} \right)$$

e

$$f_0 = \frac{1}{2} \beta J^2 \bar{\chi}_0 - \frac{1}{\beta} \ln \phi_{0,2IS}.$$

A expansão acima é a energia livre de Landau. O objetivo deste cálculo foi obter os parâmetros de ordem que se anulam na transição de fase de forma explícita que portanto são dois parâmetros de ordem: q e δ . O sucesso da técnica da expansão da energia livre de Landau para mais que um parâmetro de ordem permitiu eliminar $\bar{\chi}$ que não é considerado pequeno e assim foi possível escrever a energia livre em termos de q e δ . A eliminação de $\bar{\chi}$ foi feita assim: expandimos $\bar{\chi}$ em termos de potência q e δ e depois introduzimos $\bar{\chi}$ na energia livre e expandindo novamente a própria função da energia livre. Esta energia livre de Landau permite calcular a temperatura crítica em função do campo transversal, isto é $T_c = T_c(\Gamma)$ e podemos também determinar o campo crítico Γ_c em $T = 0$. A temperatura crítica e o campo transversal crítico determinam a transição de fase entre a fase vidro de spins e a fase paramagnética. Então para determinar isso devemos calcular a derivada segunda de f . Porque na temperatura crítica $T_c(\Gamma)$, a derivada segunda é zero. Ou derivar f em primeira ordem em relação a q e δ igual a zero e encontrar uma solução que extremiza $f(q, \delta)$:

$$\frac{\partial f}{\partial q} = -Dq + D(m-1)\delta = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial \delta} = D(m-1)\delta + D(m-1)q = 0$$

Resolvendo-se as duas últimas equações obtemos as seguintes soluções:

$$1 = \beta_c^2 J^2 \left[\frac{\phi_2(\beta_c, \Gamma)}{\phi_{0,2IS}(\beta_c, \Gamma)} \right]^2, \quad (2.35)$$

$$\bar{\chi}_c = \frac{\phi_2(\beta_c, \Gamma)}{\phi_{0,2IS}(\beta_c, \Gamma)}. \quad (2.36)$$

Susbtituindo-se (2.36) em (2.35) encontramos:

$$\bar{\chi}_c = \frac{1}{\sqrt{2}\beta_c J} \quad (2.37)$$

A solução para $\beta_c = \beta_c(\Gamma)$ pode ser resolvida igualando (2.36) e (2.37):

$$\frac{1}{\sqrt{2}\beta_c J} = \frac{\phi_2(\beta_c, \Gamma)}{\phi_{0,2IS}(\beta_c, \Gamma)} \quad (2.38)$$

A equação (2.38) só pode ser resolvida numericamente, mas quando $\Gamma = 0$ e $T_c = 0$ a equação acima pode ser resolvida analiticamente. Os resultados analíticos são obtidos no apêndice E, as equações (5.80)(5.81) e (5.85) que determinam as temperaturas críticas e campo transverso crítico para modelo de dois estados (2S) e o modelo de quatro estados (4S) são sumarizadas numa tabela abaixo:

	2S	4S
T_c	$J\sqrt{2}$	$J/1.04$
Γ_c	$2\sqrt{2}J$	$2\sqrt{2}J$

e o resultado para T_c perto do campo crítico, a equação (5.90):

$$T_c \simeq \frac{2}{3}(\Gamma - \Gamma_c)$$

Esses resultados concordam com a referência [3].

2.5 Linha de Almeida Thouless.

Nesta seção, vamos calcular o autovalor de Almeida Thouless λ_{AT} , para verificar se é instável a solução de quebra de simetria de réplicas em baixas temperatura. Para isso seguiremos todo o método formulado pelo artigo original de Almeida e Thouless [8]. Então devemos partir da equação:

$$\langle Z_{4S,2S}^n \rangle_{J_{ij}} = \int \prod_{\alpha\beta} dQ_{\alpha\beta} e^{-\frac{1}{2}N\beta^2 J^2 \sum_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta}^2 + \sum_j^N \ln \Lambda_j(Q_{\alpha\beta})} \quad (2.39)$$

com

$$\Lambda_j(Q_{\alpha\beta}) = \prod_{\alpha}^n \int \mathfrak{D}[\psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}] \quad (2.40)$$

$$\prod_{j=1}^N \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{j,\alpha} e^{-\xi_{j,\alpha}} \exp \left[A_{\Gamma} + 4\beta^2 J^2 \sum_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta} S_j^{\alpha}(0) S_j^{\beta}(0) \right].$$

onde o conjunto das equações (2.39) e (2.40) é igual ao conjunto das equações (1.87) e (1.88) e A_{Γ} é igual a equação (1.84). Supomos que $\tilde{Q}_{\alpha\beta}$ seja solução que extremiza (2.39), então:

$$f = \lim_{n \rightarrow 0, N \rightarrow \infty} \text{Máx} \left\{ \frac{1}{2} N \beta^2 J^2 \left[\sum_{\alpha\beta} \tilde{Q}_{\alpha\beta}^2 \right] - \sum_j^N \ln \Lambda_j \left(\tilde{Q}_{\alpha\beta} \right) \right\} \quad (2.41)$$

com

$$\Lambda_j(Q_{\alpha\beta}) = \prod_{\alpha=0}^n \int \mathfrak{D}[\psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}] \prod_{j=1}^N \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{j,\alpha} \exp[-\xi_{j,\alpha} + A_{\Gamma}] \times \quad (2.42)$$

$$\exp \left[4\beta^2 J^2 \sum_{\alpha\beta} \tilde{Q}_{\alpha\beta} S_j^{\alpha}(0) S_j^{\beta}(0) \right]$$

Agora escrevemos uma perturbação para $\tilde{Q}_{\alpha\beta}$ na seguinte forma:

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_{\alpha\beta} &= y + \eta_{\alpha\beta}, \\ \tilde{Q}_{\alpha\alpha} &= x + \varepsilon_{\alpha} \end{aligned} \quad (2.43)$$

onde x e y está perto da solução de sela, então $\eta_{\alpha\beta}$ e ε_{α} são pequenas perturbações em torno da solução.

Com isso vamos então expandir f em série de potência até segunda ordem:

$$f =$$

$$f_0 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \frac{\partial^2 f}{\partial \tilde{Q}_{\alpha\beta} \partial \tilde{Q}_{\gamma\delta}} (\tilde{Q}_{\alpha\beta} - y) (\tilde{Q}_{\gamma\delta} - y)$$

$$+ \sum_{\alpha,\beta,\gamma} \frac{\partial^2 f}{\partial \tilde{Q}_{\alpha\beta} \partial \tilde{Q}_{\gamma\gamma}} (\tilde{Q}_{\alpha\beta} - y) (\tilde{Q}_{\gamma\gamma} - y)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\gamma} \frac{\partial^2 f}{\partial \tilde{Q}_{\alpha\alpha} \partial \tilde{Q}_{\gamma\gamma}} (\tilde{Q}_{\alpha\alpha} - x) (\tilde{Q}_{\gamma\gamma} - x)$$

usando a definição (2.43), a energia livre fica:

$$f = f_0 + \Delta$$

onde,

$$\Delta = \sum_{(\alpha,\beta)(\gamma,\delta)} \frac{\partial^2 f}{\partial \tilde{Q}_{\alpha\beta} \partial \tilde{Q}_{\gamma\delta}} \eta_{\alpha\beta} \eta_{\gamma\delta} + 2 \sum_{(\alpha,\beta),\gamma} \frac{\partial^2 f}{\partial \tilde{Q}_{\alpha\beta} \partial \tilde{Q}_{\gamma\gamma}} \eta_{\alpha\beta} \varepsilon_\gamma + \sum_{(\alpha\beta)} \frac{\partial^2 f}{\partial \tilde{Q}_{\alpha\alpha} \partial \tilde{Q}_{\beta\beta}} \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \quad (2.44)$$

Usando (2.41) para calcular os seguintes elementos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f}{\partial \tilde{Q}_{\alpha\beta} \partial \tilde{Q}_{\gamma\delta}} &= 2\beta^2 J^2 \delta_{(\alpha\beta)} \delta_{(\gamma\delta)} + \frac{64}{N} \beta^4 J^4 \sum_j \langle S_j^\alpha(0) S_j^\beta(0) \rangle \langle S_j^\gamma(0) S_j^\delta(0) \rangle \\ &\quad - \frac{64}{N} \beta^4 J^4 \sum_j \langle S_j^\alpha(0) S_j^\beta(0) S_j^\gamma(0) S_j^\delta(0) \rangle \end{aligned} \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f}{\partial \tilde{Q}_{\alpha\beta} \partial \tilde{Q}_{\gamma\gamma}} &= \frac{32}{N} \beta^4 J^4 \sum_j \langle S_j^\alpha(0) S_j^\beta(0) \rangle \langle [S_j^\gamma(0)]^2 \rangle \\ &\quad - \frac{32}{N} \beta^4 J^4 \sum_j \langle S_j^\alpha(0) S_j^\beta(0) S_j^\gamma(0) S_j^\delta(0) \rangle \end{aligned} \quad (2.46)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f}{\partial \tilde{Q}_{\alpha\alpha} \partial \tilde{Q}_{\beta\beta}} &= \beta^2 J^2 \delta_{\alpha\beta} + \frac{16}{N} \beta^4 J^4 \sum_j \langle [S_j^\alpha(0)]^2 \rangle \langle [S_j^\beta(0)]^2 \rangle \\ &\quad - \frac{16}{N} \beta^4 J^4 \sum_j \langle [S_j^\alpha(0)]^2 [S_j^\beta(0)]^2 \rangle \end{aligned} \quad (2.47)$$

Introduzindo as equações (2.47)-(2.45) em (2.44), teremos:

$$\Delta = 2\beta^2 J^2 \left\{ \sum_{\alpha,\beta} G_{\alpha\beta} \varepsilon_\alpha + \sum_{\alpha,(\gamma\delta)} G_{\alpha(\gamma\delta)} \varepsilon_\alpha \eta_{\gamma\delta} + \sum_{(\alpha,\beta)(\gamma\delta)} G_{(\alpha,\beta)(\gamma\delta)} \eta_{\alpha\beta} \eta_{\gamma\delta} \right\}. \quad (2.48)$$

Onde os elementos para ε_α são:

$$G_{\alpha\alpha} = 1 + \frac{16\beta^2 J^2}{N} \sum_j \langle [S_{j,\alpha}^z(0)]^2 \rangle^2 - \langle [S_{j,\alpha}^z(0)]^4 \rangle \quad A,$$

$$G_{\alpha\beta} = \frac{16\beta^2 J^2}{N} \sum_j \langle [S_{j,\alpha}^z(0)]^2 \rangle \langle [S_{j,\beta}^z(0)]^2 \rangle - \langle [S_{j,\alpha}^z(0)]^2 [S_{j,\beta}^z(0)]^2 \rangle \quad B.$$

O elemento $\varepsilon_\alpha \eta_{\alpha\beta}$ é:

$$G_{\alpha(\gamma\delta)} = \frac{32}{N} \beta^2 J^2 \sum_j \langle S_{j,\gamma}^z(0) S_{j,\delta}^z(0) \rangle \langle [S_{j,\alpha}^z(0)]^2 \rangle - \langle [S_{j,\alpha}^z(0)]^2 S_{j,\alpha}^z(0) S_{j,\delta}^z(0) \rangle \quad C.$$

Os elementos $\eta_{\alpha\beta}$ são:

$$G_{(\alpha\beta)(\alpha\beta)} = 1 + \frac{32\beta^2 J^2}{N} \sum_j \langle S_{j,\alpha}^z(0) S_{j,\beta}^z(0) \rangle^2 - \langle [S_{j,\alpha}^z(0) S_{j,\beta}^z(0)]^2 \rangle \quad P,$$

$$G_{(\alpha\beta)(\alpha\delta)} = \frac{32}{N} \beta^2 J^2 \sum_j \langle S_{j,\alpha}^z(0) S_{j,\beta}^z(0) \rangle^2 - \langle [S_{j,\alpha}^z(0)]^2 S_{j,\beta}^z(0) S_{j,\delta}^z(0) \rangle \quad Q,$$

$$G_{\alpha(\gamma\delta)} = \frac{32}{N} \beta^2 J^2 \sum_j \langle S_{j,\alpha}^z(0) S_{j,\beta}^z(0) \rangle^2 - \langle S_{j,\alpha}^z(0) S_{j,\beta}^z(0) S_{j,\gamma}^z(0) S_{j,\delta}^z(0) \rangle \quad R.$$

O autovalor de Almeida Thouless é:

$$\lambda_{AT} = P - 2Q + R \quad (2.49)$$

introduzem-se os elementos P , Q e R no autovalor de Almeida-Thouless (2.49) e obtemos o seguinte resultado:

$$\lambda_{AT} = 1 - 2\beta^2 J^2 (M - 2N + O) \quad (2.50)$$

onde:

$$M = \frac{16}{N} \sum_j \langle [S_{j,\alpha}^z(0) S_{j,\beta}^z(0)]^2 \rangle, \quad (2.51)$$

$$N = \frac{16}{N} \sum_j \langle [S_{j,\alpha}^z(0)]^2 S_{j,\alpha}^z(0) S_{j,\delta}^z(0) \rangle,$$

$$O = \frac{16}{N} \sum_j \langle S_{j,\alpha}^z(0) S_{j,\beta}^z(0) S_{j,\gamma}^z(0) S_{j,\delta}^z(0) \rangle. \quad (2.52)$$

Então calculamos as médias de acordo com as equações acima:

$$\langle [S_{j,\alpha}^z(0) S_{j,\beta}^z(0)]^2 \rangle = \frac{1}{16} \int Dz_1 \left(\frac{\int Dz_2 R_{0,2lS}^{m-1} \Phi_2}{\int Dz_2 \Phi_0^m} \right)^2 \quad (2.53)$$

$$\langle [S_{j,\alpha}^z(0)]^2 S_{j,\gamma}^z(0) S_{j,\delta}^z(0) \rangle = \frac{1}{16} \int Dz_1 \frac{\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^{m-1} \Phi_2 \left(\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^{m-1} \Phi_1 \right)^2}{\left(\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^m \right)^3} \quad (2.54)$$

$$\langle S_{j,\alpha}^z(0) S_{j,\beta}^z(0) S_{j,\gamma}^z(0) S_{j,\delta}^z(0) \rangle = \frac{1}{4} \int Dz_1 \left(\frac{\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^{m-2} \Phi_1}{\Phi_{0,2lS}^m} \right)^4 \quad (2.55)$$

O cálculo das médias são tediosos e os detalhes estão no apêndice G. Agora introduzimos (2.53-2.55) em (2.51-2.52) e finalmente escrevemos o autovalor de Almeida Thouless (2.50):

$$\begin{aligned} \lambda_{AT} = & 1 - 2\beta^2 J^2 \left(\int Dz_1 \left(\frac{\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^{m-1} \Phi_2}{\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^m} \right)^2 - 2 \int Dz_1 \frac{\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^{m-1} \Phi_2 \left(\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^{m-1} \Phi_1 \right)^2}{\left(\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^m \right)^3} \right. \\ & \left. + \int Dz_1 \left(\frac{\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^{m-2} \Phi_1}{\Phi_{0,2lS}^m} \right)^4 \right) \end{aligned} \quad (2.56)$$

Agora vamos estudar a de linha instabilidade de Almeida Thouless na linha crítica que separa a fase vidro de spins para a fase paramagnética. Como q e δ são zeros e escrevemos (2.56):

$$\begin{aligned} \lambda_{AT} = & 1 - 2\beta^2 J^2 \left[\left(\frac{\phi_{0,2lS}^{m-1} \phi_2}{\phi_{0,2lS}^m} \right)^2 - 2 \frac{\phi_0^{m-1} \phi_2 \left(\phi_{0,2lS}^{m-1} \phi_1 \right)^2}{\left(\phi_{0,2lS}^m \right)^3} + \left(\frac{\phi_{0,2lS}^{m-2} \phi_1}{\phi_{0,2lS}^m} \right)^4 \right] \\ \lambda_{AT} = & 1 - 2\beta^2 J^2 \left[\left(\frac{\phi_2}{\phi_{0,2lS}} \right) - \left(\frac{\phi_1}{\phi_{0,2lS}} \right)^2 \right]^2 \end{aligned}$$

mas $\phi_1 = 0$ por causa da integração ímpar (ver na equação (5.44)) e a linha de instabilidade é quando temos $\lambda_{AT} = 0$, então:

$$1 = 2\beta^2 J^2 \left[\left(\frac{\phi_2}{\phi_{0,2lS}} \right) \right]^2$$

ou

$$T_c = J\sqrt{2} \left(\frac{\phi_2(T_c, \Gamma)}{\phi_{0,2lS}(T_c, \Gamma)} \right) \quad (2.57)$$

que é o resultado (2.35).

2.6 Resultados numéricos.

O primeiro resultado numérico é o diagrama de fase:

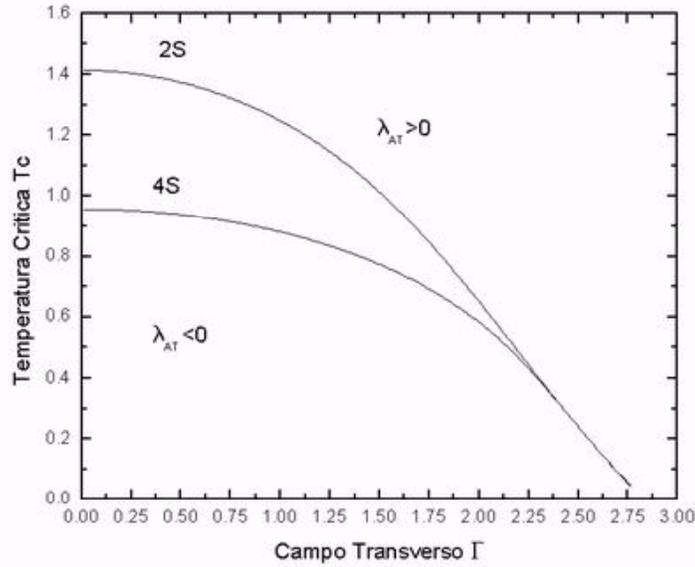


Figura 10. Diagrama de fase onde T_c em função do campo transversal Γ e fixamos $J=1$. Aqui comprova-se numericamente, para $\Gamma = 0$, temos $T_c = \sqrt{2}$ para modelo 2S e $T_c/1.04J$ modelo 4S. Para $T_c = 0$ temos um campo crítico $\Gamma_c \simeq 2.82$.

Observando o gráfico acima, no campo transversal zero, isto é $\Gamma = 0$, a temperatura crítica é $T_c = 1.42$ e $T_c = 1/1.04$ para o modelo de dois estados 2S e modelo de quatro estados 4S respectivamente. Esses resultados estão em concordância com as equações (5.80) para 2S e (5.81) para 4S quando fixamos $J = 1$. Além disso em $T_c=0$, determinamos o campo crítico numericamente que é $\Gamma_c \simeq 2.82$ também em concordância com a equação (5.85). No regime de baixas temperaturas, a transição de fase independe do modelo.

Além disso, conforme a figura acima, a linha de Almeida Thouless é instável dentro da fase de vidro de spins para os modelos de 2S e 4S e isso está

de acordo com [22] e [4] onde foi usado o método de Trotter Suzuki [21], mas em desacordo com o resultado recente do artigo [37].

A física da transição de fase de vidro de spins para fase paramagnética pode ser explicada na referência [35]. O crescimento da agitação térmica dos spins eventualmente causa uma perda de memória de longo tempo de uma orientação particular do spin. Próximo à transição sempre satisfaz $\hbar\omega \ll k_B T_c$. Portanto essa transição de fase é clássica. Então a condição para a transição fase clássica é quando a energia da flutuação quântica é muito menor que a energia da flutuação térmica $\hbar\omega \ll k_B T_c$. Dentro dessa transição, o acoplamento de spins para um banho de calor térmico causa perda total da coerência quântica, o sistema se comporta classicamente. No regime de $T_c = 0$ temos um ponto crítico quântico $\Gamma = \Gamma_c$ neste ponto destrói a fase de vidro de spins. A resposta de um ponto crítico para baixas temperaturas e $\Gamma - \Gamma_c$ deverá determinar a localização para crossover quântico-clássico. Por exemplo, o gráfico acima mostra um crossover em $T = 0$ e $\Gamma_c = 2.82J$.

O segundo resultado numérico é o comportamento dos parâmetros de ordem q e δ em função da temperatura, para o modelo 2S:

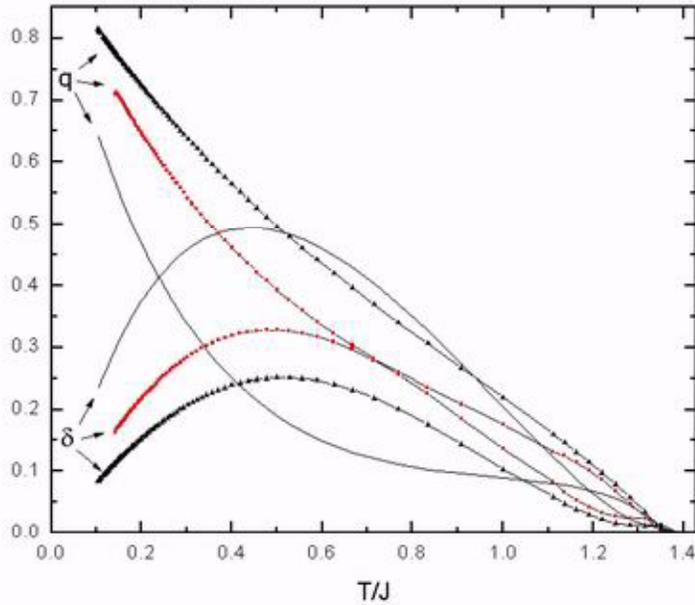


Figura 11. As curvas de parâmetro de ordem com QSR com campo transversal $\Gamma = 0.5J$, linha sólida $m=0.2$, linha pontilhada quadrada $m=0.4$, linha pontilhada triangular $m=0.6$.

O resultado numérico acima foi obtido através das equações (2.21-2.23), onde mantemos fixo o campo transversal Γ e o parâmetro de otimização m . Então as curvas acima estão com quebra de simetria de réplicas (QSR), onde os parâmetros de ordem q e δ estão em função da temperatura e com campo transversal com intensidade $\Gamma = 0.5J$. As curvas q e δ (omitimos $\bar{\chi}$) foram plotadas com três valores diferentes de m : a linha sólida é $m = 0.2$, linha pontilhada quadrada $m = 0.4$, linha pontilhada triangular $m = 0.6$. Através dos resultados numéricos da figura 11, $q, \delta, \bar{\chi}$, com o parâmetro de otimização m e campo transversal Γ é possível calcular as energias livre numericamente para cada valor de m :

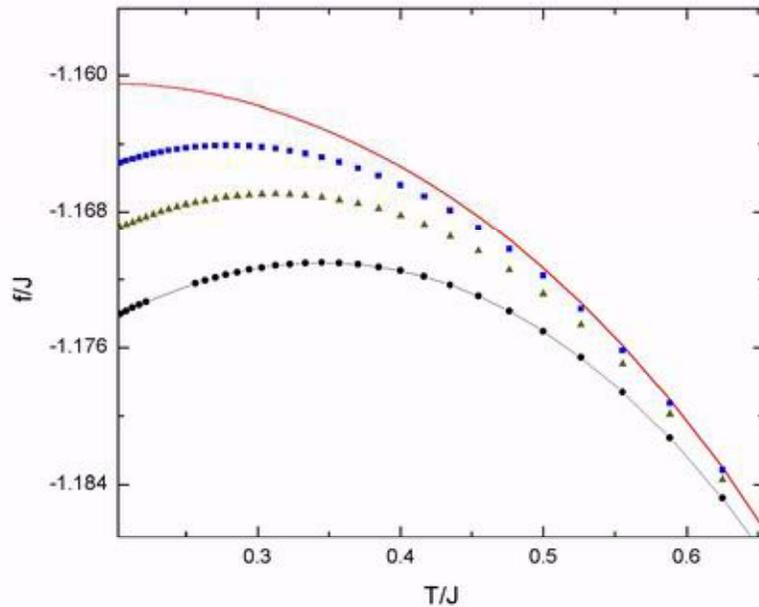


Figura 12. Energia livre com QSR com campo transversal $\Gamma = 0.5J$, linha sólida $m=0.2$, linha pontilhada quadrada $m=0.4$, linha pontilhada triangular $m=0.6$. Energia em SR: linha+símbolo circular $m=1$.

As energias livres com QSR têm vários valores de m , em particular, $m=1$ corresponde a simetria de réplica SR. Todas as curvas estão na presença do campo transversal com intensidade $\Gamma = 0.5J$. Na linha sólida é $m = 0.2$, linha pontilhada quadrada é $m = 0.4$, linha pontilhada triangular é $m = 0.6$ e linha+símbolo circular é $m = 1$. A energia livre com QSR é maior que com SR.

É interessante comparar os comportamento dos parâmetro de ordem para modelo de quatro estados (4S) e dois estados (2S). Então os parâmetros de ordem q e δ em função da temperatura são calculadas numericamente para os dois modelos 2S e 4S:

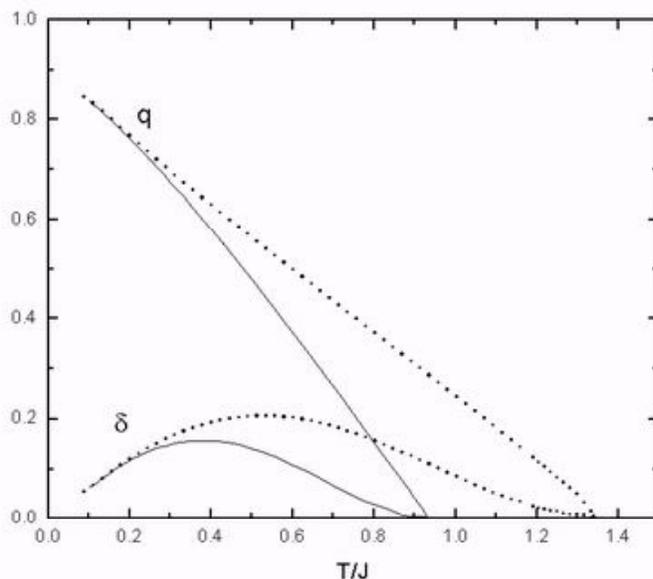


Figura 13. As curvas dos parâmetro de ordem, as linhas pontilhadas no modelo de 2S e as linhas sólidas no modelo 4S. Ambos estão no caso $m=0.8$ e $\Gamma = 0.5J$.

Analizando a comparação das curvas acima, as temperaturas críticas para ambos os modelos são determinadas numericamente, onde $T_c/J \simeq 1.38$ no modelo de dois estados e $T_c/J \simeq 0.92$ no modelo de quatro estados. Enquanto nos cálculos analíticos tem a previsão na ausência do campo transversal $T_c/J = \sqrt{2}$ e $T_c/J = 1/1.04$ para modelo de dois estados e quatro estados. Em baixas temperaturas, os comportamentos dos parâmetros de ordem em ambos os modelos são indistinguíveis. Através desses resultados numéricos na figura 13 podemos ainda calcular as energias livres para os modelos 4S e 2S:

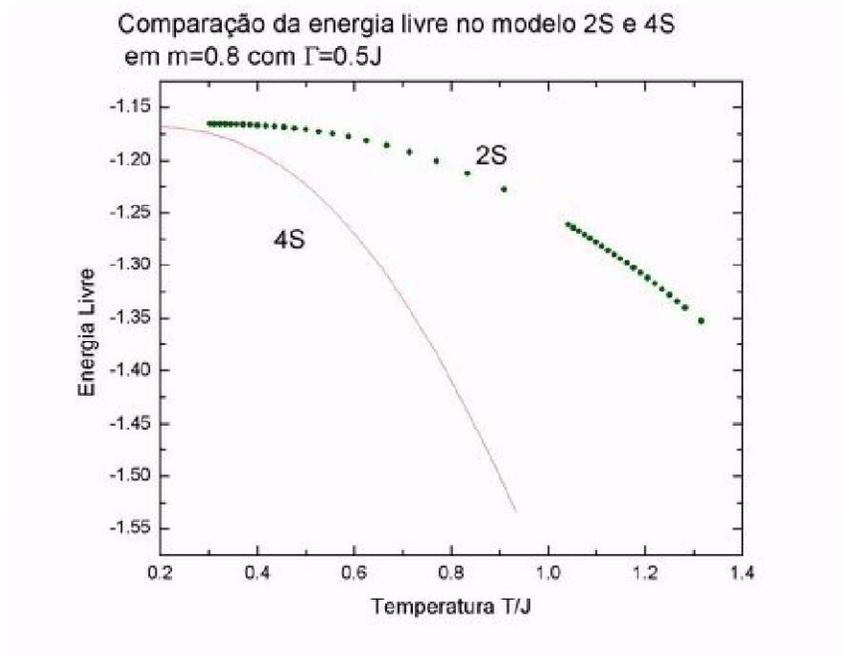


Figura 14. Energia livre no modelo de dois estados (2S) e modelo de quatro estados (4S) no caso $m=0.8$ e $\Gamma = 0.5J$.

Através do resultado dos parâmetros de ordem na figura 13, em particular no modelo 2S, calculamos a energia livre e a entropia:

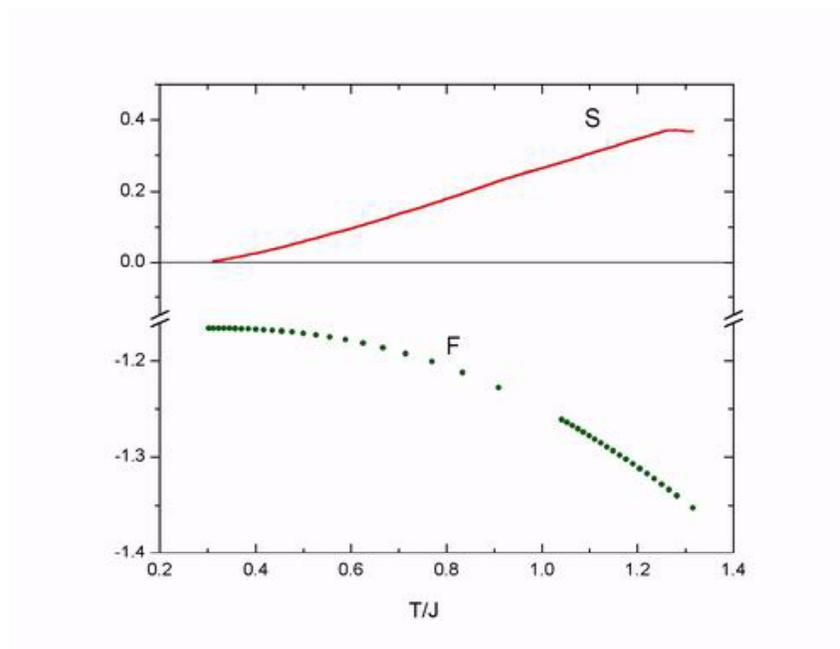


Figura 15. Entropia e energia livre em função da temperatura com QSR com campo transversal cuja intensidade $\Gamma = 0.5J$ e com parâmetro de otimização $m=0.8$.

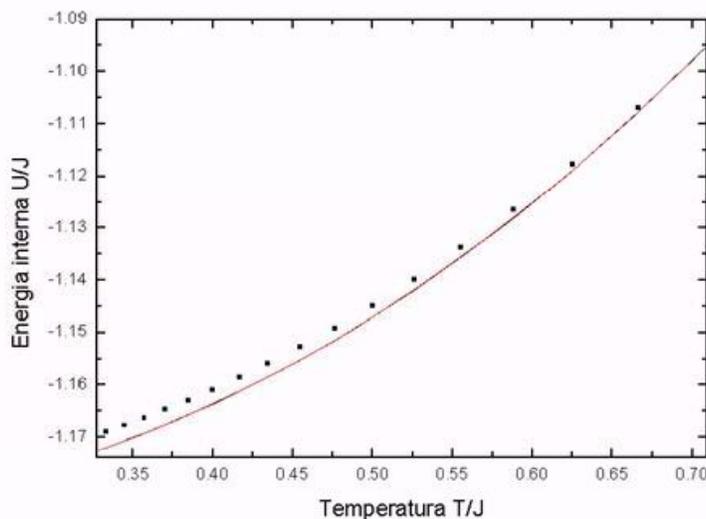


Figura 16. Os gráficos acima apresentam curvas da energia interna com campo transversal $\Gamma = 0.5J$, nos casos em RS com $m=1$ e em RSB com $m=0.8$.

O gráfico acima representa a energia interna com campo transversal $\Gamma = 0.5J$. A curva pontilhada é o caso de quebra de simetria de réplicas com parâmetro $m = 0.8$, a linha sólida é a simetria de réplicas $m=1$. A energia interna é maior na RSB do que SR. Nosso resultado da curva da energia interna em QSR, a energia interna é $U = -1.167J$ para $T = 0.3$ e no caso SR $m = 1$ é $U = -1.172J$. Comparando o nosso resultado da energia interna com o resultado energia interna de Parisi, o nosso resultado da energia interna é menor que o resultado de Parisi [2] por causa da presença do campo transversal.

Note-se que a energia livre e a entropia não puderam ser calculadas abaixo da temperatura $T/J \simeq 0.3$. Mesmo com a quebra de simetria de réplicas ainda temos a indicação de entropia negativa.

A seguir, vamos comparar os parâmetros de ordem em função do campo transversal com duas temperaturas diferentes e apenas no modelo de dois estados:

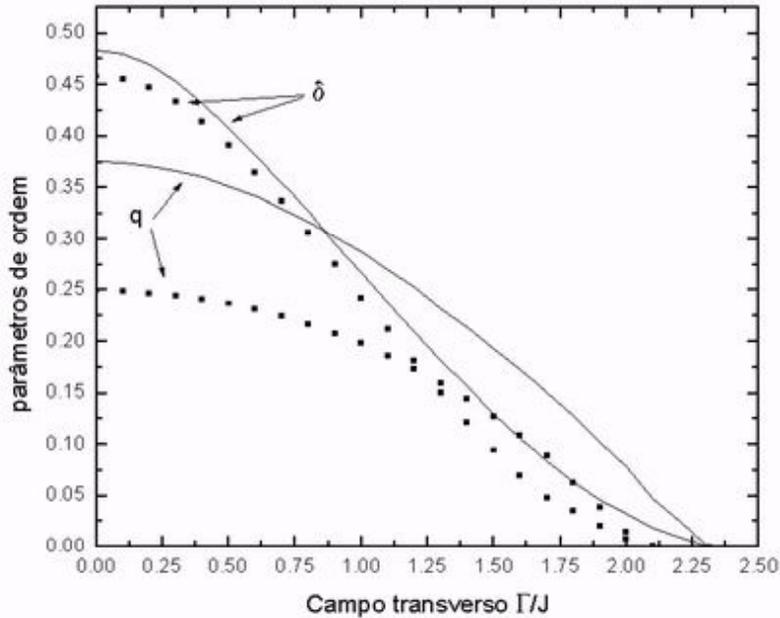


Figura 17. Os gráficos acima apresentam as curvas dos parâmetros de ordem q e δ em função de Γ . As curvas estão no caso $m=0.275$ e dois estados 2S. As curvas dos parâmetros de ordem com duas temperaturas diferentes: linha sólida $T/J=0.4$ e linha pontilhadas $T/J=0.6$.

A figura 17 acima mostra os parâmetro de ordem em função do campo transversal para duas temperaturas diferentes. Comparando-se os dois casos: ambos os parâmetros de ordem são menores em $T/J=0.6$ do que na temperatura $T/J=0.4$. Daí-se conclui que quanto mais cresce a temperatura, os parâmetro de ordem ficam menores até anularem-se na temperatura crítica. Nas curvas acima os parâmetro de ordem q e δ são separados e na referência [4] o parâmetro de ordem q é equivalente a Q_{22} e o parâmetro de ordem $q + \delta$ é equivalente a Q_1 . Então se fizermos uma comparação deste gráfico com o do artigo de Goldschmidt et al. [4], notamos que eles são semelhantes.

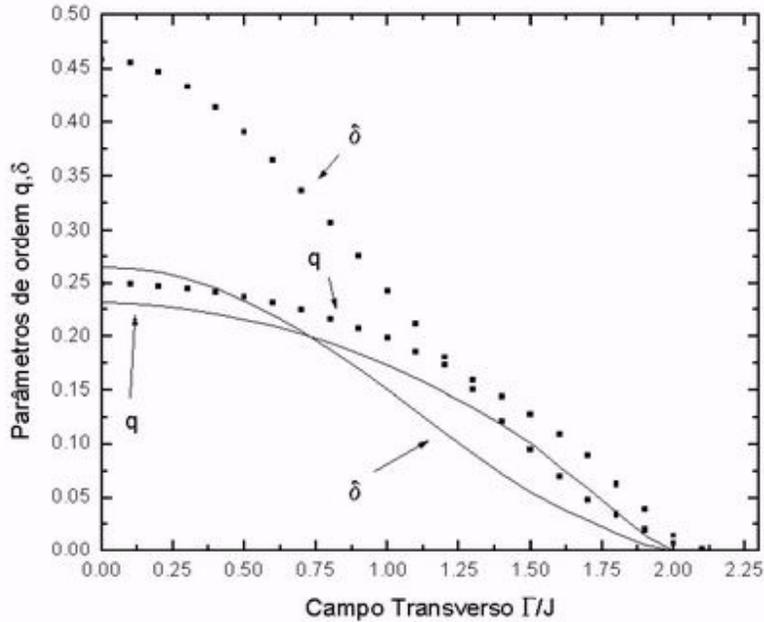


Figura 18. Comparação dos dois modelos na mesma temperatura $T/J=0.6$ e $m=0.275$ que exibem os parâmetro de ordem q e δ em função do campo transversal. As curvas traçadas em linhas sólidas são no modelo de quatro estados (4S) e as curvas traçadas em linhas pontilhadas são no modelo dois estados (2S).

A figura 18 mostra as curvas dos parâmetros de ordem em função do campo transversal para os dois modelos: as curvas para modelo de dois estados são as linhas pontilhadas e as curvas para o modelo de quatro estados são as linhas sólidas. Através dos resultados podemos compará-la: no modelo de dois estados os parâmetro de ordem são maiores que no modelo de quatro estados. Além disso, a partir do campo transversal $\Gamma \simeq 2.73J$ e $\Gamma \simeq 2.0J$ a fase se torna paramagnética para modelo de dois estados e quatro estados respectivamente.

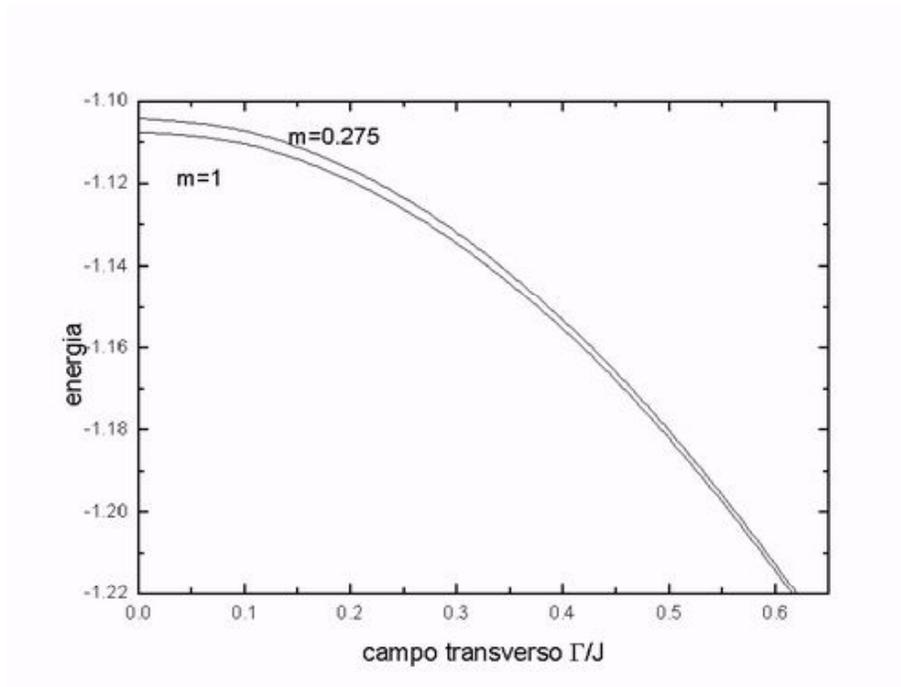


Figura 19. O esboço da energia livre é mantido fixo a temperatura $T/J=0.6$, mas variando o campo transverso no modelo 2S. A energia livre com QSR é maior que com SR.

Capítulo 3

Vidro de spins em um campo transverso II: Teoria de C. De Dominicis e T.Garel.

3.1 Teoria

A teoria de C. De Dominicis e T. Garel [5] é uma generalização da proposta de A. Blandin, diferente da teoria de Parisi. Nossa intenção é estudar esse tipo de problema no caso de vidro de spins em um campo transverso. Considere um sistema inicial de spin com p componentes em cada sítio denotados como:

$$\widehat{S}_i^z = \widehat{S}_{i,1}^z, \widehat{S}_{i,2}^z, \widehat{S}_{i,k}^z \dots \widehat{S}_{i,p}^z \quad (3.1)$$

Onde \widehat{S}_i^z é operador de spin na direção z no sítio i . A seguir, é feita a replicação m vezes do sistema inicial e obtemos $n = pm$ réplicas. Os parâmetros de ordem são definidos como:

$$q = \overline{\langle \widehat{S}_{i,\alpha,k}^z \widehat{S}_{i,\alpha,k'}^z \rangle} \quad (k) \neq (k') \quad (3.2)$$

e

$$r = \overline{\langle \widehat{S}_{i,\alpha,k}^z \widehat{S}_{i,\beta,k}^z \rangle} \quad \beta \neq (k). \quad (3.3)$$

Para melhor compreensão, vamos dar um exemplo:

$$\begin{array}{c}
\widehat{S}_{i,1,1}^z, \widehat{S}_{i,1,2}^z, \widehat{S}_{i,1,k}^z \cdots \widehat{S}_{i,1,p}^z \\
\widehat{S}_{i,2,1}^z, \widehat{S}_{i,2,2}^z, \widehat{S}_{i,2,k}^z \cdots \widehat{S}_{i,2,p}^z \\
\vdots \\
\widehat{S}_{i,\alpha,1}^z, \widehat{S}_{i,\alpha,2}^z, \widehat{S}_{i,\alpha,k}^z \cdots \widehat{S}_{i,\alpha,p}^z \\
\vdots \\
\widehat{S}_{i,m,1}^z, \widehat{S}_{i,m,2}^z, \widehat{S}_{i,m,k}^z \cdots \widehat{S}_{i,m,p}^z
\end{array}$$

observando o exemplo acima, cada linha é o spin com p componentes, as colunas são réplicas e $\widehat{S}_{i,\alpha,k}^z$ é a componente do operador de spin no sítio i com índice de réplica α e com índice k do componente. Por exemplo, se fizermos uma correlação de spin $\widehat{S}_{i,1,1}^z$ com $\widehat{S}_{i,2,2}^z$, ou $\widehat{S}_{i,1,1}^z$ com $\widehat{S}_{i,2,1}^z$, pela definição (3.2), temos:

$$r = \overline{\langle \widehat{S}_{i,1,1}^z \widehat{S}_{i,2,2}^z \rangle} = \overline{\langle \widehat{S}_{i,1,1}^z \widehat{S}_{i,2,1}^z \rangle}.$$

E se fizermos uma correlação de spin $\widehat{S}_{i,1,1}^z$ com $\widehat{S}_{i,1,2}^z$, pela definição (3.3), temos:

$$q = \overline{\langle \widehat{S}_{i,1,1}^z \widehat{S}_{i,1,2}^z \rangle}.$$

Conclui-se que r é a correlação de spins de réplicas diferentes e q é a correlação de componentes de spins diferentes. Isso nos fornece uma noção de como é feita a quebra de simetria de réplica na teoria de C. De Dominicis.

3.2 Cálculo da energia livre.

A seguir, vamos usar o hamiltoniano:

$$\widehat{H} = - \sum_{i,j} J_{ij} \widehat{S}_i \widehat{S}_j - 2\Gamma \sum_i \widehat{S}_i^x$$

e a distribuição de probabilidade Gaussiana centrada (1.72):

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

Como os spins são replicados p vezes no mesmo sítio, o hamiltoniano inicial deve ser:

$$\widehat{H} = \sum_{k=1}^p \widehat{H}_k = - \sum_{k=1}^p \left(\sum_{i,j} J_{ij} \widehat{S}_{i,k}^z \widehat{S}_{j,k}^z + 2\Gamma \sum_i \widehat{S}_{i,k}^x \right) \quad (3.4)$$

portanto os operadores de spins quânticos $\widehat{S}_{i,k}^z$ e $\widehat{S}_{i,k}^x$ são representados pelos campos auxiliares de férmions:

$$\widehat{S}_{i,k}^z = \frac{1}{2} \sum_{s=-}^+ s \widehat{n}_{i,s,k} = \frac{1}{2} \sum_{s=-}^+ s \widehat{a}_{i,s,k}^\dagger \widehat{a}_{i,s,k}, \quad (3.5)$$

$$\widehat{S}_{i,k}^x = \frac{1}{2} \sum_{s \neq s'}^+ \widehat{a}_{i,s,k}^\dagger \widehat{a}_{i,s',k}.$$

A função de partição para modelo 4S:

$$Z_{4S} = \prod_{k=1}^p \text{Tr} e^{-\beta \widehat{H}_k} \quad (3.6)$$

e a função de partição para modelo de 2S:

$$Z_{2S} = \prod_{k=1}^p \text{Tr} e^{-\beta \widehat{H}_k} \prod_{i=1}^N \delta(\widehat{n}_{i,k,+} + \widehat{n}_{i,k,-} - 1) \quad (3.7)$$

onde

$$\delta(\widehat{n}_{i,k,+} + \widehat{n}_{i,k,-} - 1) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx_{i,k} e^{ix_{i,k}(\widehat{n}_{i,k,+} + \widehat{n}_{i,k,-} - 1)}. \quad (3.8)$$

Porém $\widehat{S}_{i,k}^z$ e $\widehat{S}_{i,k}^x$ não comutam, então usamos novamente, a integral funcional das equações (1.79) e (1.80):

$$Z_{2lS} = \prod_{i=1}^N \prod_{k=1}^p \int D[\psi_{i,k}^*(\tau), \psi_{i,k}(\tau)] \int_0^{2\pi} \frac{dx_{i,k} e^{-\xi_{i,k}}}{2\pi} e^{A_{2lS}[\psi_{i,k}^*(\tau), \psi_{i,k}(\tau)]} \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} A_{2lS}[\psi_{i,k}^*(\tau), \psi_{i,k}(\tau)] &= \int_0^\beta d\tau \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^p \sum_s \left\{ \psi_{i,s,k}^*(\tau) \frac{\partial \psi_{i,s,k}(\tau)}{\partial \tau} + \frac{\xi_{i,k} \psi_{i,s,k}^*(\tau) \psi_{i,s,k}(\tau)}{\beta} \right\} + \\ &\sum_{k=1}^p \left\{ \sum_{i,j=1}^N J_{i,j} S_{i,k}^z(\tau) S_{j,k}^z(\tau) + 2\Gamma \sum_{i=1}^N S_i^x(\tau) \right\} \end{aligned}$$

onde ψ^* é conjugado de ψ e τ é o tempo imaginário que corresponde o inverso da temperatura e $l = 1$ é no modelo 2S e $l = 2$ é no modelo 4S, e $S_{i,k}^z(\tau)$ e $S_i^x(\tau)$ são agora funções de números de Grassmann,

$$S_{i,k}^z(\tau) = \frac{1}{2} \sum_s s \psi_{i,s,k}^*(\tau) \psi_{i,s,k}(\tau),$$

$$S_{i,k}^z(\tau) = \frac{1}{2} \sum_{s \neq s'} \psi_{i,s,k}^*(\tau) \psi_{i,s',k}(\tau).$$

Dentro da transformada de Fourier (ver no apêndice B) e na aproximação estática obtemos o seguinte resultado:

$$Z_{2lS} = \prod_{i=1}^N \prod_{k=1}^p \int D [\psi_{i,k}^*(\omega), \psi_{i,k}(\omega)] \int_0^{2\pi} \frac{dx_{i,k} e^{-\xi_{i,k}}}{2\pi} e^{A_{2lS}[\psi_{i,k}^*(\omega), \psi_{i,k}(\omega)]}$$

com

$$\begin{aligned} A_{2lS}[\psi^*(\omega), \psi(\omega)] &= \sum_{s=-}^+ \sum_{i=1}^N \sum_{\omega} \sum_{k=1}^p \{ (i\beta\omega + \xi_i) \psi_{s,i,k}^*(\omega) \psi_{s,i,k}(\omega) + 2\Gamma\beta S_{i,k}^x(0) \} + \\ &\quad \beta \sum_{i,j=1}^N J_{i,j} S_{i,k}^z(0) S_{j,k}^z(0) \end{aligned}$$

A ação $A_{2lS}[\psi^*(\omega), \psi(\omega)]$ é separada em duas partes:

$$A_{\Gamma} = \sum_k \sum_{\omega} \sum_i \sum_{s=-}^+ (i\beta\omega + \xi_i) \psi_{s,i,k}^*(\omega) \psi_{s,i,k}(\omega) + 2\Gamma\beta S_{i,k}^x(0)$$

e

$$\sum_{k=1}^p \sum_{i,j=1}^N D_{i,j,k}(J_{ij}) = \sum_{k=1}^p \sum_{i,j=1}^N J_{i,j} S_{i,k}^z(0) S_{j,k}^z(0)$$

portanto,

$$Z_{2lS} = \prod_{i=1}^N \prod_{k=1}^p \int D [\psi_{i,k}^*(\omega), \psi_{i,k}(\omega)] \int_0^{2\pi} \frac{dx_{i,k} e^{-\xi_{i,k}}}{2\pi} e^{A_{\Gamma} + \sum_{i,j=1}^N D_{i,j,k}(J_{ij})} \quad (3.10)$$

onde A_Γ é igual a equação (??). Esta função de partição é impossível calcular por causa das variáveis J_{ij} aleatórias. Então novamente, devemos fazer replicação e em seguida calcular a média de todos J_{ij} com a distribuição de probabilidade Gaussiana (1.72):

$$\langle Z_{2lS}^n \rangle_{J_{ij}} = \int \prod_{i,j} dJ_{ij} P(J_{ij}) Z_{2lS}^n$$

Após de um longo cálculo, ver o apêndice F, obtemos a média da função de partição na forma linear:

$$\begin{aligned} \langle Z_{2lS}^n \rangle_{J_{ij}} &= \int \prod_{\alpha,\beta} \prod_{k,k'} dq_{\alpha,k,k'} dr_{\alpha,\beta,k} dr_{\alpha,\beta,k,k'} dX_{\alpha,k} \times \\ &\exp \left[-\frac{\beta^2 J^2 N}{2} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{k,k'} \left\{ q_{\alpha,k,k'}^2 + r_{\alpha,\beta,k}^2 + r_{\alpha,\beta,k,k'}^2 + X_{\alpha,k}^2 \right\} + N \ln \Lambda \right] \end{aligned} \quad (3.11)$$

onde

$$\begin{aligned} \Lambda &= \prod_{k=1}^p \prod_{\alpha=0}^n \int D[\psi_{k,\alpha}^*(\omega), \psi_{k,\alpha}(\omega)] \int_0^{2\pi} \frac{dx_{k,\alpha}}{2\pi} \exp[-\xi_{k,\alpha} + A_\Gamma] \times \\ &\exp \left[4\beta^2 J^2 \sum_{\alpha,\beta} \sum_{k,k'} \left\{ S_{\alpha,k}^z S_{\alpha,k'}^z q_{\alpha,k,k'} + S_{\alpha,k}^z S_{\beta,k}^z r_{\alpha,\beta,k} + S_{\alpha,k}^z S_{\beta,k'}^z r_{\alpha,\beta,k,k'} + (S_{\alpha,k}^z)^2 X_{\alpha,k} \right\} \right] \end{aligned} \quad (3.12)$$

Agora calcula-se a integral (3.11) pelo método de ponto de sela:

$$\frac{d \langle Z_{2lS}^n \rangle_{J_{ij}}}{dq_{\alpha,k,k'}} \Big|_{q_{\alpha,k,k'}=q} = -N e^{-Ng} \frac{dg}{dq_{\alpha,k,k'}} \Big|_{q_{\alpha,k,k'}=q} = 0$$

onde

$$q_{\alpha,k,k'} = 4 \left\langle S_{\alpha,k}^z S_{\alpha,k'}^z \right\rangle = q, \quad (3.13)$$

$$\frac{d \langle Z_{2lS}^n \rangle_{J_{ij}}}{dr_{\alpha,k,k'}} \Big|_{r_{\alpha,k,k'}=r} = -N e^{-Ng} \frac{dg}{dr_{\alpha,k,k'}} \Big|_{r_{\alpha,k,k'}=r} = 0$$

onde

$$r_{\alpha,\beta,k} = 4 \langle S_{\alpha,k}^z S_{\beta,k}^z \rangle = r, \quad (3.14)$$

$$\frac{d \langle Z_{2lS}^n \rangle_{J_{ij}}}{dr_{\alpha,\beta,k,k'}} \Big|_{r_{\alpha,\beta,k,k'}=r} = 0$$

onde

$$r_{\alpha,\beta,k,k'} = 4 \langle S_{\alpha,k}^z S_{\beta,k'}^z \rangle = r, \quad (3.15)$$

$$\frac{d \langle Z_{2lS}^n \rangle_{J_{ij}}}{dX_{\alpha,k}} \Big|_{X_{\alpha,k}=X} = 0$$

onde

$$X_{\alpha,k} = 4 \langle (S_{\alpha,k}^z)^2 \rangle = \bar{\chi} + q. \quad (3.16)$$

Introduzimos (3.16)-(3.13) em (3.12) e obtemos um resultado aproximado da integral:

$$\langle Z_{2lS}^m \rangle_{J_{ij}} = e^{-\frac{\beta^2 J^2 N m p}{2} \{ (p-1)q^2 - r^2 + (\chi+q)^2 \} + N m \int Dx \ln \int Dy [\int Dz (1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Xi})]}$$

e agora introduz-se este resultado em:

$$\beta f = - \lim_{m \rightarrow 0} \frac{\langle Z_{2lS}^m \rangle_{J_{ij}} - 1}{m p}$$

Depois de uma longa álgebra, o mesmo que fizemos no capítulo anterior, obtemos a seguinte expressão para energia livre:

$$\beta f_{2lS} = \frac{\beta^2 J^2}{2} \{ (p-1)q^2 - r^2 + (\chi+q)^2 \} - \frac{1}{p} \int Dx \ln \int Dy \left[\int Dz (1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Xi}) \right]^p \quad (3.17)$$

onde

$$\begin{aligned} \Xi &= \lambda^2 + \beta^2 \Gamma^2, \\ \lambda &= \beta J \left(y \sqrt{2(q-r)} + x \sqrt{2r} + z \sqrt{2\chi} \right). \end{aligned}$$

É possível eliminar o p no limite de $p \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned}
I &= \int Dy \left[\int Dz \left(1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Xi} \right) \right]^p \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dy e^{-\frac{1}{2}y^2} \left[\int Dz \left(1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Xi} \right) \right]^p
\end{aligned}$$

Trocando-se a variável $y = v\sqrt{p}$, teremos

$$I = \frac{\sqrt{p}}{\sqrt{2\pi}} \int dv e^{-\frac{pv^2}{2}} \left[\int Dz \left(1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Xi(v)} \right) \right]^p$$

onde

$$\Xi(v) = \beta J \left(v\sqrt{2a} + x\sqrt{2r} + z\sqrt{2\chi} \right)^2 + \beta^2 \Gamma^2$$

$$a = p(q - r).$$

É conveniente escrever a integral na forma:

$$I = \frac{\sqrt{p}}{\sqrt{2\pi}} \int dv e^{-\frac{pv^2}{2} + p \ln \left[\int Dz \left(1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Xi(v)} \right) \right]}.$$

Portanto essa integral pode ser calculada na forma aproximada pelo método de ponto de sela:

$$I \simeq e^{-\frac{pv_0^2}{2} + p \ln \left[\int Dz \left(1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Xi(v_0)} \right) \right]}$$

onde v_0 é a solução do ponto de sela e

$$v_0 = \frac{\sqrt{2a} \int Dz 2 \sinh \sqrt{\Xi(v_0)} \frac{\lambda}{\sqrt{\Xi(v_0)}}}{\int Dz \left(1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Xi(v_0)} \right)},$$

$$\Xi(v_0) = \beta J \left(v_0\sqrt{2a} + x\sqrt{2r} + z\sqrt{2\chi} \right)^2 + \beta^2 \Gamma^2$$

Assim, a expressão para energia livre fica mais simplificada:

$$\beta f_{2lS} = \frac{\beta^2 J^2}{2} [2ra + \chi^2 + 2\chi r] + \int Dx \left[\frac{v_0^2}{2} - \ln \int Dz \left\{ 1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Xi(v_0)} \right\} \right]. \quad (3.18)$$

Mas é conveniente escrever βf_{2lS} a, r e χ nas seguintes formas:

$$\begin{aligned}
\beta J \sqrt{2a} &= \sqrt{A}, \\
\beta J \sqrt{2r} &= \sqrt{R}, \\
\beta J \sqrt{2\chi} &= \sqrt{\theta}.
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Portanto:

$$\beta f_{2IS} = \frac{1}{8\beta^2 J^2} [2AR + \theta^2 + 2\theta R] + \int Dx \left[\frac{V^2}{2A} - \ln \int Dz \left\{ 1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Xi(V)} \right\} \right] \tag{3.20}$$

onde

$$\Xi(V) = \lambda(V) + \beta^2 \Gamma^2 = \left(V + x\sqrt{R} + z\sqrt{\theta} \right)^2 + \beta^2 \Gamma^2$$

e

$$V = A \frac{2 \int Dz \sinh \sqrt{\Xi(V)} \frac{\lambda(V)}{\sqrt{\Xi(V)}}}{\int Dz \left(1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Xi(V)} \right)}. \tag{3.21}$$

3.3 Equações do ponto de sela.

As equações do ponto de sela podem ser obtidas em:

$$\frac{\partial f}{\partial A} = \frac{\partial f}{\partial R} = \frac{\partial f}{\partial \theta} = 0$$

Portanto as soluções do ponto de sela são:

$$\frac{1}{2} (\theta + A) = \frac{\beta^2 J^2}{\sqrt{R}} \int Dx \frac{2 \int Dz \sinh \sqrt{\Xi(V)} \frac{\lambda_x}{\sqrt{\Xi(V)}}}{\int Dz \left(1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Xi(V)} \right)}, \tag{3.22}$$

$$\frac{1}{2} (\theta + R) = \frac{\beta^2 J^2}{\sqrt{\theta}} \int Dx \frac{2 \int Dz \sinh \sqrt{\Xi(V)} \frac{\lambda_z}{\sqrt{\Xi(V)}}}{\int Dz \left(1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Xi(V)} \right)}, \tag{3.23}$$

$$R = 2\beta^2 J^2 \int Dx \left(\frac{2 \int Dz \sinh \sqrt{\Xi(V)} \frac{\lambda(V)}{\sqrt{\Xi(V)}}}{\int Dz \left(1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Xi(V)} \right)} \right)^2. \tag{3.24}$$

3.4 Cálculo da temperatura crítica e campo transverso crítico e diagrama de fase.

Nosso objetivo agora é calcular a temperatura crítica, para isso definimos:

$$\mu = V + x\sqrt{R}.$$

Como V e R são pequenos na proximidade da temperatura crítica, portanto temos $\mu \ll 1$, então,

$$\Xi(\mu) = \lambda(\mu)^2 + \beta^2\Gamma^2 = \left[\mu + z\sqrt{\theta}\right]^2 + \beta^2\Gamma^2. \quad (3.25)$$

Agora precisamos expandir em série de μ na equação (3.21):

$$V = V_0 + V_1\mu$$

onde

$$V_0 = A \frac{2 \int Dz \sinh \sqrt{z^2\theta + \beta^2\Gamma^2} \frac{z^2\theta}{\sqrt{z^2\theta + \beta^2\Gamma^2}}}{\int Dz \left(1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{z^2\theta + \beta^2\Gamma^2}\right)} = \frac{\tilde{\phi}_1}{\tilde{\phi}_{0,2lS}} = 0,$$

porque

$$2 \int Dz \sinh \sqrt{z^2\theta + \beta^2\Gamma^2} \frac{z^2\theta}{\sqrt{z^2\theta + \beta^2\Gamma^2}} = 0$$

e

$$V_1 = A \frac{2 \int Dz \left\{ \cosh \sqrt{z^2\theta + \beta^2\Gamma^2} \frac{z^4\theta^2}{z^2\theta + \beta^2\Gamma^2} + \beta^2\Gamma^2 \sinh \sqrt{z^2\theta + \beta^2\Gamma^2} \frac{1}{(z^2\theta + \beta^2\Gamma^2)^{3/2}} \right\}}{\int Dz \left(1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{z^2\theta + \beta^2\Gamma^2}\right)} =$$

$$V_1 = \frac{\tilde{\Phi}_2}{\tilde{\Phi}_{0,2lS}} \Big|_{V=R=0} = \frac{\tilde{\phi}_2}{\tilde{\phi}_{0,2lS}}.$$

onde adotamos a convenção $\tilde{\Phi}$ para representar os elementos da teoria de C. de Dominics et. al. com campo transverso enquanto a convenção Φ foi usada para representar a teoria de Parisi com campo transverso que foi desenvolvida na primeira parte do trabalho.

Através dos resultados V_0 e V_1 podemos escrever uma equação para V :

$$V \simeq V_1\mu = V_1 \left(x\sqrt{R} + V\right).$$

Resolvendo essa equação:

$$V = \frac{V_1 x \sqrt{R}}{1 - V_1}. \quad (3.26)$$

Agora usamos a última equação (3.26) para calcular a integração por parte na equação (3.24):

$$\frac{1}{2} (2\theta + R + A) = -\beta^2 J^2 \int Dx \frac{\tilde{\Phi}_1^2}{\tilde{\Phi}_{0,2lS}^2} \frac{1}{1 - V_1} + \beta^2 J^2 \int Dx \left(\frac{2 - V_1}{1 - V_1} \right) \frac{\tilde{\Phi}_2}{\tilde{\Phi}_{0,2lS}} = g(A, R, \theta) \quad (3.27)$$

onde

$$\frac{\tilde{\Phi}_1^2}{\tilde{\Phi}_{0,2lS}^2} \Big|_{R,V=0} = \frac{\tilde{\phi}_1^2}{\tilde{\phi}_{0,2lS}^2},$$

$$\frac{\tilde{\Phi}_2}{\tilde{\Phi}_{0,2lS}} \Big|_{R,V=0} = \frac{\tilde{\phi}_2}{\tilde{\phi}_{0,2lS}}.$$

Como θ não é pequeno, mas depende de R e A , então precisamos expandir θ em série potências de A e R :

$$\theta = \theta_0 + \theta_1 A + \theta_2 R + \dots \quad (3.28)$$

A seguir, vamos usar (3.27) para escrever:

$$\frac{1}{2} (2[\theta_0 + \theta_1 A + \theta_2 R + \dots] + R + A) = g(A, R, \theta_0 + \theta_1 A + \theta_2 R + \dots)$$

e expandir novamente no segundo membro da equação acima em série de A e R com a equação (3.27):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} (2[\theta_0 + \theta_1 A + \theta_2 R + \dots] + R + A) &= & (3.29) \\ g(A, R, \theta_0 + \theta_1 A + \theta_2 R + \dots) &\simeq g(0, 0, \theta_0) + \frac{dg}{dA} \Big|_{A=R=0} A + \frac{dg}{dR} \Big|_{A=R=0} R + \dots \end{aligned}$$

onde

$$\frac{dg}{dA} \Big|_{A=R=0} = \frac{\partial g}{\partial A} + \frac{\partial g}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial A} \Big|_{A=R=0} = \frac{\partial g}{\partial A} + \frac{\partial g}{\partial \theta} \theta_1 \Big|_{A=R=0}$$

e

$$\frac{dg}{dR}\Big|_{A=R=0} = \frac{\partial g}{\partial A} + \frac{\partial g}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial R}\Big|_{A=R=0} = \frac{\partial g}{\partial R} + \frac{\partial g}{\partial \theta} \theta_2\Big|_{A=R=0}.$$

Equacionando (3.28) para cada termo de potência de A e R , temos os seguintes resultados:

$$\theta_0 = g(0, 0, \theta_0) \quad (3.30)$$

$$\theta_1 = \frac{\frac{\partial g}{\partial A}\Big|_{A=R=0} - \frac{1}{2}}{1 - \frac{\partial g}{\partial \theta}\Big|_{A=R=0}} \quad (3.31)$$

$$\theta_2 = -\frac{\frac{\partial g}{\partial R}\Big|_{A=R=0} - \frac{1}{2}}{1 - \frac{\partial g}{\partial \theta}\Big|_{A=R=0}} \quad (3.32)$$

Após uma longa álgebra obtemos:

$$\theta_0 = 2\beta^2 J^2 \left(\frac{\tilde{\phi}_2}{\tilde{\phi}_{0,2IS}} \right)$$

$$\theta_1 = \frac{2\beta^2 J^2 \left(\frac{\tilde{\phi}_2}{\tilde{\phi}_{0,2IS}} \right)^2 - \frac{1}{2}}{1 - \beta^2 J^2 \left(\frac{\tilde{\phi}_4}{\tilde{\phi}_{2IS}} - \left[\frac{\tilde{\phi}_2}{\tilde{\phi}_{2IS}} \right]^2 \right)}$$

$$\theta_2 = \frac{\beta^2 J^2 \left(\frac{\tilde{\phi}_4}{\tilde{\phi}_{0,2IS}} - 2 \left[\frac{\tilde{\phi}_2}{\tilde{\phi}_{0,2IS}} \right]^2 \right) - \frac{1}{2}}{1 - \beta^2 J^2 \left(\frac{\tilde{\phi}_4}{\tilde{\phi}_{2IS}} - \left[\frac{\tilde{\phi}_2}{\tilde{\phi}_{2IS}} \right]^2 \right)}$$

A equação para θ_1 e a equação para θ_2 podem ser relacionadas:

$$\theta_2 = 1 - \theta_1 \quad (3.33)$$

Finalmente, podemos escrever θ em série de potências de A e R :

$$\theta = \theta_0 + (A - R)\theta_1 - R. \quad (3.34)$$

Próximo passo, é expandir a energia livre em série de A e R :

$$\begin{aligned}
f &= f(0, 0, \theta_0) + \frac{df}{dR}\Big|_{A=R=0}A + \frac{df}{dA}\Big|_{A=R=0}R + \frac{1}{2}\frac{d^2f}{dR^2}\Big|_{A=R=0}R^2 + \frac{1}{2}\frac{d^2f}{dA^2}\Big|_{A=R=0}A^2 + \\
&\quad \frac{d^2f}{dAdR}\Big|_{A=R=0}AR + \dots
\end{aligned} \tag{3.35}$$

onde

$$\begin{aligned}
\frac{df}{dR}\Big|_{A=R=0} &= \frac{\partial f}{\partial R} + \frac{\partial f}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial R}\Big|_{A=R=0} \\
\frac{df}{dA}\Big|_{A=R=0} &= \frac{\partial f}{\partial A} + \frac{\partial f}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial A}\Big|_{A=R=0} \\
\frac{d^2f}{dR^2}\Big|_{A=R=0} &= \frac{\partial^2 f}{\partial R^2} + 2\frac{\partial^2 f}{\partial R \partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial R} + \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} \left(\frac{\partial \theta}{\partial R}\right)^2\Big|_{A=R=0} \\
\frac{d^2f}{dA^2}\Big|_{A=R=0} &= \frac{\partial^2 f}{\partial A^2} + 2\frac{\partial^2 f}{\partial A \partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial A} + \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} \left(\frac{\partial \theta}{\partial A}\right)^2\Big|_{A=R=0} \\
\frac{d^2f}{dAdR}\Big|_{A=R=0} &= \frac{\partial^2 f}{\partial A \partial R} + \frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial R} \frac{\partial \theta}{\partial R} + \frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial A} \frac{\partial \theta}{\partial A} + \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} \left(\frac{\partial \theta}{\partial A}\right) \left(\frac{\partial \theta}{\partial R}\right)\Big|_{A=R=0}
\end{aligned}$$

Com auxílio das equações (3.34) e (3.35), obtemos a energia livre na forma aproximada para $T \simeq T_c$:

$$f = f_0 + \frac{1}{2} \left(\beta^2 J^2 \frac{\tilde{\phi}_2}{\tilde{\phi}_{0,2IS}} - \frac{1}{2} \right) T_1 R^2 + \dots$$

onde

$$T_1 = \left[\frac{1}{2\beta^2 J^2} + \frac{\frac{\beta^2 J^2}{4} \left(\beta^2 J^2 \left(\frac{\tilde{\phi}_2}{\tilde{\phi}_{0,2IS}} \right)^2 - \frac{1}{2} \right)}{1 - \beta^2 J^2 \left(\frac{\tilde{\phi}_4}{\tilde{\phi}_{2IS}} - \left[\frac{\tilde{\phi}_2}{\tilde{\phi}_{2IS}} \right]^2 \right)} \right]$$

Então, na temperatura crítica, os termos R^2 , A^2 e AR são zeros e portanto:

$$\left(\beta^2 J^2 \frac{\tilde{\phi}_2}{\tilde{\phi}_{0,2IS}} - \frac{1}{2} \right) = 0 \quad e \quad T_1 \neq 0$$

Resolvendo-se essa equação obtemos uma relação:

$$T_c = J\sqrt{2} \frac{\tilde{\phi}_2(T_c, \Gamma)}{\tilde{\phi}_{0,2IS}(T_c, \Gamma)}$$

Para $\Gamma = 0$ e $T_c = 0$ é possível calcular analiticamente como foi feito no capítulo anterior, então resumizamos os resultados em uma tabela:

	2S	4S
$T_c(\Gamma = 0)$	$J\sqrt{2}$	$1.04/J$
$\Gamma_c(T_c = 0)$	$2\sqrt{2}J$	$2\sqrt{2}J$

O diagrama de fase é:

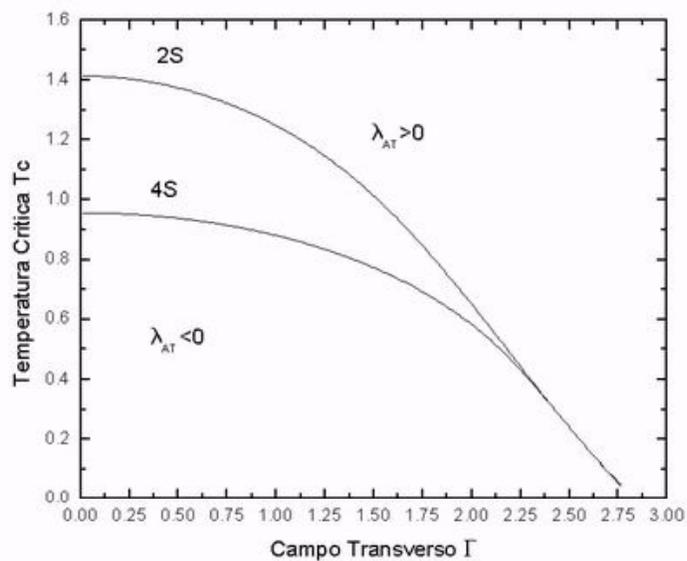


Figura 20. Diagrama de fase da teoria de C. De Dominicis e T. Garel com campo transversal.

Nosso diagrama de fase é igual ao resultado obtido em [3].

Capítulo 4

Comparação dos resultados e conclusão

4.1 Comparação dos resultados da primeira parte do trabalho:

O objetivo agora é fazer a comparação dos resultados com outros artigos já publicados. Vamos nos preocupar só com a energia livre porque a partir dela surgem outros resultados como a entropia, os parâmetros de ordem, etc. Mas também vamos comparar nosso resultado para o autovalor de Almeida Thouless com o de Alba Theumann et. al. [3]

4.1.1 Comparação dos resultados do nosso trabalho com os resultados de Goldschmidt et. al. [4].

Vamos começar a comparar o nosso trabalho com o de Goldschmidt, partindo da equação da energia livre para dois modelos (2.15):

$$\beta f_{2lS} = \frac{\beta^2 J^2}{2} \{(\bar{\chi} + q)^2 - (q + \delta)^2 + m(\delta^2 + 2q\delta)\} - \frac{1}{m} \int Dz_1 \ln K_{2lS}$$

O artigo de Goldschmidt et. al. [4] é no modelo de 2 estados. Então no nosso caso, o modelo de dois estados da equação acima é $l=1$:

$$\beta f_{2S} = \frac{\beta^2 J^2}{2} \{(\bar{\chi} + q)^2 - (q + \delta)^2 + m(\delta^2 + 2q\delta)\} - \frac{1}{m} \int Dz_1 \ln K_{2S} \quad (4.1)$$

com

$$K_{2S} = \int Dz_2 \left(\int Dz_3 2 \cosh \sqrt{\Delta} \right)^m$$

$$\Delta = \beta J \left(z_3 \sqrt{2(\bar{\chi} - \delta)} + z_2 \sqrt{2\delta} + z_1 \sqrt{2q} \right)^2 + \beta^2 \Gamma^2$$

Agora falta escrever $R = q + \bar{\chi}$, então:

$$\beta f_{2S} = \frac{\beta^2 J^2}{2} \left\{ R^2 - (q + \delta)^2 + m(\delta^2 + 2q\delta) \right\} - \frac{1}{m} \int D z_1 \ln K_{2S} \quad (4.2)$$

com

$$K_{2S} = \int D z_2 \left(\int D z_3 2 \cosh \sqrt{\Delta} \right)^m$$

$$\Delta = \beta J \left(z_3 \sqrt{2(R - q - \delta)} + z_2 \sqrt{2\delta} + z_1 \sqrt{2q} \right)^2 + \beta^2 \Gamma^2$$

Comparando a equação (4.2) com a equação do artigo de Goldschmidt (1.68), ambas são idênticas. Mas o nosso parâmetro de ordem $R = \bar{\chi} + q$ e o parâmetro de ordem de Goldschmidt R são diferentes porque neste não foi feita aproximação estática.

4.1.2 Comparação do nosso trabalho com Alba Theumann et. al. [3].

Para isso vamos ver o nosso resultado na ausência de quebra de simetria, isto é $m=1$, nos modelos de dois e quatro estados:

$$\begin{aligned} \beta f_{2IS} &= \frac{\beta^2 J^2}{2} \left\{ (\bar{\chi} + q)^2 - (q + \delta)^2 + (\delta^2 + 2q\delta) \right\} - \\ &\int D z_1 \ln \int D z_2 \int D z_3 \left(1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Delta} \right) \end{aligned}$$

Manipulamos a energia livre acima algebricamente e obtemos o seguinte resultado:

$$\beta f_{2IS} = \frac{\beta^2 J^2}{2} \left\{ \bar{\chi}^2 + 2q\bar{\chi} \right\} - \int D z_1 \ln \int D z_2 \int D z_3 \left(1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Delta} \right)$$

Resta ainda saber qual é o valor para δ . Para isso, devemos derivar a energia livre em relação a δ e igualando a zero, temos,

$$\frac{\partial f_{2IS}}{\partial \delta} = 0 - \int D z_1 \frac{\int D z_2 \int D z_3 2 \sinh \sqrt{\Delta}}{\int D z_2 \int D z_3 \left(1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Delta} \right)} \frac{\gamma}{\sqrt{\Delta}} \left[\frac{\beta J z_2}{\sqrt{2\delta}} - \frac{\beta J z_3}{\sqrt{2(\bar{\chi} - \delta)}} \right] = 0$$

fazendo integração por partes, temos:

$$0 = \frac{\partial f_{2lS}}{\partial \delta} = \beta^2 \Gamma^2 \int D_1 \frac{1}{K_{2lS}} \int D_{z_2} \int D_{z_3} \left\{ 2 \cosh \sqrt{\Delta} \frac{\gamma^2}{\Delta} + \frac{2\beta^2 \Gamma^2}{\Delta^{3/2}} \sinh \sqrt{\Delta} \right\} - \beta^2 \Gamma^2 \int D_1 \frac{1}{K_{2lS}} \int D_{z_2} \int D_{z_3} \left\{ 2 \cosh \sqrt{\Delta} \frac{\gamma^2}{\Delta} + \frac{2\beta^2 \Gamma^2}{\Delta^{3/2}} \sinh \sqrt{\Delta} \right\}$$

Esta solução para δ é trivial, então sugerimos $\delta = 0$ e conseqüentemente, a integral $\int D_{z_2} = 1$ então:

$$\beta f_{2lS} = \frac{\beta^2 J^2}{2} \{ \bar{\chi}^2 + 2q\bar{\chi} \} - \int D_{z_1} \ln \int D_{z_3} \left(1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\beta J \left(z_3 \sqrt{2\bar{\chi}} + z_1 \sqrt{2q} \right)^2 + \beta^2 \Gamma^2} \right) \quad (4.3)$$

Comparando essa energia livre com o artigo da Alba Theumann e et. al. ou na introdução a equação (1.92) podemos ver que são idênticas.

4.1.3 Comparação do nosso λ_{AT} com Alba Theumann et. al. [3].

Agora vamos comparar o autovalor de Almeida Thouless partindo da equação (2.56) para o caso de $m=1$:

$$\lambda_{AT} = 1 - 2\beta^2 J^2 \left(\int D_{z_1} \left(\frac{\int D_{z_2} \Phi_2}{\int D_{z_2} \Phi_{0,2lS}} \right)^2 - 2 \int D_{z_1} \frac{\int D_{z_2} \Phi_2 \left(\int D_{z_2} \Phi_1 \right)^2}{\left(\int D_{z_2} \Phi_{0,2lS} \right)^3} + \int D_{z_1} \left(\frac{\int D_{z_2} \Phi_1}{\int D_{z_2} \Phi_{0,2lS}} \right)^4 \right)$$

Porém $m=1$ é uma situação de simetria de réplica, portanto $\delta = 0$ e a integral $\int D_{z_2} = 1$, então,

$$\begin{aligned} \lambda_{AT} &= 1 - 2\beta^2 J^2 \left(\int D_{z_1} \frac{\Phi_2^2}{\Phi_{0,2lS}^2} - 2 \int D_{z_1} \frac{\Phi_2 \Phi_1^2}{\Phi_0^3} + \int D_{z_1} \left(\frac{\Phi_1}{\Phi_0} \right)^4 \right) \\ \lambda_{AT} &= 1 - 2\beta^2 J^2 \int D_{z_1} \left(\frac{\Phi_2^2}{\Phi_{0,2lS}^2} - 2 \frac{\Phi_2 \Phi_1^2}{\Phi_{0,2lS}^3} + \left(\frac{\Phi_1}{\Phi_{0,2lS}} \right)^4 \right) \\ \lambda_{AT} &= 1 - 2\beta^2 J^2 \frac{1}{R_0^4} \int D_{z_1} (\Phi_{0,2lS} \Phi_2 - \Phi_1)^2 \end{aligned}$$

ou explicitamente:

$$\lambda_{AT} =$$

$$1 - \frac{2\beta^2 J^2}{R_0^4} \int Dz_1 \times \quad (4.4)$$

$$\left[\Phi_{0,2lS} \int Dz_3 \left[2 \cosh \sqrt{\Delta} \frac{h^2}{\Delta} + \frac{\beta^2 \Gamma^2}{\Delta^{3/2}} \sinh \sqrt{\Delta} \right] - \int Dz_3 2 \sinh \sqrt{\Delta} \frac{h}{\sqrt{\Delta}} \right]^2$$

Este resultado é idêntico ao [3], se o campo transversal for zero, isto é $\Gamma = 0$ em particular no modelo de 4 estados, teremos um resultado idêntico ao [36].

4.2 Comparação dos resultados da segunda parte do trabalho:

4.2.1 Comparação do nosso resultado da energia livre com o resultado da teoria de C. De Dominicis e T.Garel:

Energia livre com quebra de simetria de réplicas de C. De Dominicis (3.17):

$$\beta f_{2lS} = \frac{\beta^2 J^2}{2} \{ (p-1)q^2 - r^2 + (\chi + q)^2 \} -$$

$$\frac{1}{p} \int Dx \ln \int Dy \left[\int Dz \left(1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Xi} \right) \right]^p \quad (4.5)$$

onde

$$\Xi = \lambda^2 + \beta^2 \Gamma^2,$$

$$\lambda = \beta J \left(y \sqrt{2(q-r)} + x \sqrt{2r} + z \sqrt{2\chi} \right).$$

Para $\Gamma = 0$, e $l=1$, temos:

$$\beta f_{2S} = \frac{\beta^2 J^2}{2} \{ (p-1)q^2 - r^2 + (\chi + q)^2 \} - \frac{1}{p} \int Dx \ln \int Dy \left[\int Dz (2 \cosh \lambda) \right]^p \quad (4.6)$$

Integração a respeito de z é fácil calcular, então temos:

$$\beta f_{2S} = \frac{\beta^2 J^2}{2} \{(p-1)q^2 - r^2 + (\chi + q)^2\} -$$

$$\frac{1}{p} \int Dx \ln e^{p\beta^2 J^2 \chi} \int Dy \left(2 \cosh \beta J \left(y\sqrt{2(q-r)} + x\sqrt{2r} \right) \right)^p \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned} \beta f_{2S} &= \frac{\beta^2 J^2}{2} \{(p-1)q^2 - r^2 + (\chi + q)^2\} - \frac{1}{p} \int Dx \ln e^{p\beta^2 J^2 \chi} - \\ &\frac{1}{p} \int Dx \ln \int Dy \left(2 \cosh \beta J \left(y\sqrt{2(q-r)} + x\sqrt{2r} \right) \right)^p \end{aligned}$$

integrando o segundo termo a respeito de x,

$$\begin{aligned} \beta f_{2S} &= \frac{\beta^2 J^2}{2} \{(p-1)q^2 - r^2 + (\chi + q)^2 - 2\chi\} \\ &\frac{1}{p} \int Dx \ln \int Dy \left(2 \cosh \beta J \left[y\sqrt{2(q-r)} + x\sqrt{2r} \right] \right)^p \end{aligned} \quad (4.8)$$

Agora deriva-se

$$\frac{df_{2S}}{d\chi} = \beta^2 J^2 (\chi + q - 1) = 0,$$

e introduz-se a solução,

$$\chi = 1 - q$$

em (4.8):

$$\beta f_{2S} = \frac{\beta^2 J^2}{2} \{(p-1)q^2 - pr^2 + 2q - 1\} - \frac{1}{p} \int Dx \ln (2 \cosh \Xi)^p \quad (4.9)$$

onde

$$\Xi = \beta J \left(y\sqrt{2(q-r)} + x\sqrt{2r} \right)$$

O resultado (4.9) é igual à teoria de C. De Dominicis et. al. na referência [5].

4.3 Discussão e conclusão.

4.3.1 Discussão sobre a primeira parte do trabalho:

Na primeira parte do nosso trabalho foi desenvolvido um vidro de spins de Ising com campo transversal, onde usamos a técnica de integrais funcionais com operadores de spins na representação fermiônica e dentro da transformada de Fourier, aproximação estática e a teoria de Parisi obtemos uma expressão para energia livre, entropia e energia interna para m fixo. Nosso trabalho é diferente da teoria de Parisi, onde $m(T)$ é dependente da temperatura e é determinado pela otimização da energia livre e no nosso trabalho mantemos o parâmetro de otimização m fixo. Nosso argumento é que, segundo A. Blandin [10] afirma, existem várias possibilidades de quebra de simetria de réplicas e isto nos permitiu fixar m . A grande vantagem de manter m fixo está na facilidade computacional. Assim, os nossos resultados são consistentes com os artigos anteriores nas referências [3, 4].

4.3.2 Discussão dos resultados da seção 2.6.

É interessante comentar os resultados numéricos da seção 2.6. De acordo com a figura 11 e 13 o parâmetro de ordem δ vai a zero quando $T = 0$, independente do valor de m . Se $\delta(\Gamma \neq 0, T = 0) = 0$, os resultados poderiam ser iguais na simetria de réplicas como na referência [3]. E se $\delta(\Gamma = 0, T = 0) = 0$ e no modelo de dois estados, os resultados seriam iguais da teoria S.K. conforme a referência [1], a entropia permaneceria inalterada e negativa. A origem dessa discrepância é que m é mantido fixo. Através dos resultados dos parâmetros de ordem da figura 11 obtemos as energias livre na figura 12. A energia livre é maximizada com baixos valores de m e isso está consistente com o resultado de Parisi [12]. Para clarificar isto, apresentamos o resultado $m(T)$ obtido pela otimização da energia livre de Parisi:

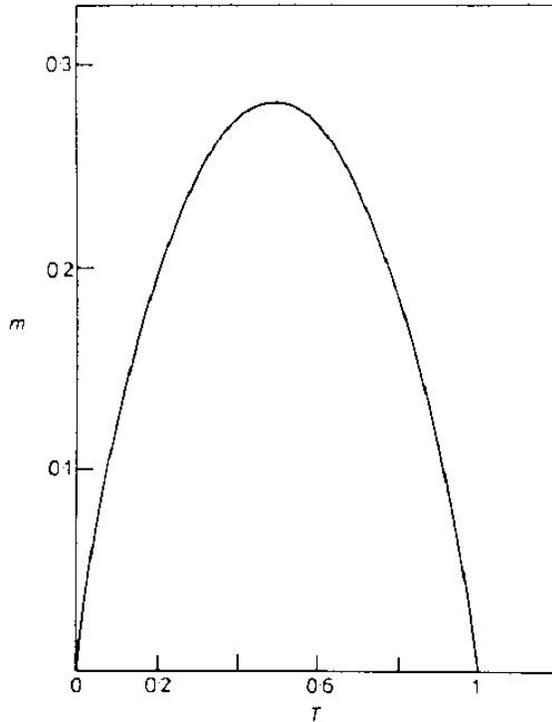


Figura 21. O resultado da teoria de Parisi [12], a energia livre é otimizada na variação de m em função da temperatura.

No nosso resultado da energia livre na figura 12, na temperatura $T=0.2$ e com parâmetro de otimização $m=0.2$ temos a maior energia livre e isso pode ser comparado com o resultado de Parisi na figura 21, onde temos $T=0.2$ e $m \simeq 0.17$. Este resultado de Parisi refletiu no nosso resultado da energia livre, onde a pequena diferença do resultado do valor de m deles e o nosso é por causa da presença do campo transversal. Assim para pequenos valores de m a energia livre é maximizada no nosso trabalho para baixas temperaturas.

Então os resultados dos parâmetros de ordem na figura 13 para ambos os modelos, em altas temperaturas a temperatura crítica para o modelo de dois estados é maior que no modelo de quatro estados, mas em baixas temperaturas o comportamento dos parâmetros de ordem são indistinguíveis. Isto ocorre também na figura 14 onde as energias livres são a mesma para ambos os modelos em baixas temperaturas. No regime de baixas temperaturas os parâmetros de ordem e energia livre estão de acordo com os cálculos analíticos. Por exemplo, no cálculo da determinação do campo crítico (ver na equação (5.84)) a dependência de L que difere os modelos, onde $L=0$ e $L=1$ é no modelo de 2S e 4S respectivamente, é desprezível comparado com $e^{\beta T}$.

Através dos resultados dos parâmetros de ordem na figura 12 e na figura

13 no modelo de dois estados foi possível calcular também a energia livre na figura 14. Na figura 14 fazemos uma comparação das energias livres com QSR e SR onde a energia livre é maior com QSR no caso $m=0.275$ do que a energia livre com SR $m=1$. Nossos resultados da energia livre na figura 14 estão em concordância com os resultados da energia livre de Y. Goldschmidt et. al. [4]. No entanto, a diferença está no valor da energia livre na ausência do campo transversal, segundo o resultado do Y. Goldschmidt [4] é $F(\Gamma = 0) \simeq -0.82J$ na temperatura $T = 0.1J$ enquanto no nosso trabalho, temos $F(\Gamma = 0) \simeq -1.105J$ na temperatura $T = 0.6J$, essa diferença do valor da energia livre é esperada porque a nossa temperatura é bem maior que a temperatura de Y. Goldschmidt et. al. [4]. Se fizermos um gráfico de $f(\Gamma)$ para temperaturas menores é provável que teremos $F(T/J = 0.6) < F(T/J < 0.6)$.

Na figura 15, o diagrama de fase para ambos os modelos, a temperatura crítica é reduzida pela presença do campo transversal e quando a temperatura crítica for zero, isto é $T_c = 0$, o campo transversal atingirá o valor crítico Γ_c . Então, acima do campo crítico Γ_c a amostra não exibirá a fase de vidro de spins e sim fase paramagnética e também está de acordo com [16]. Ainda neste diagrama de fase, é interessante fazer uma comparação dos resultados dos cálculos analíticos e os resultados obtidos numericamente. Porém o método analítico é limitado porque só podemos calcular T_c com $\Gamma = 0$ e $T_c \simeq 0$ com $\Gamma \simeq \Gamma_c$. Apesar dessa limitação, a vantagem do método analítico nos fornece um valor exato na determinação da temperatura crítica e o campo crítico. Então o cálculo analítico para o modelo de 2S prevê a temperatura crítica $T_c = \sqrt{2}J$ com $\Gamma = 0$ que pode ser comparado numericamente $T_c = 1.42J$ para $\Gamma = 0$ na figura 15. No cálculo analítico para o modelo de 4S prevê a temperatura crítica $T_c = 0.94J$ para $\Gamma = 0$ que pode ser comparado numericamente que tem o mesmo valor na figura 15. O campo crítico independe dos modelos de quatro ou dois estados no regime de baixas temperaturas tem o seguinte resultado $\Gamma_c = 2\sqrt{2}J$ que pode ser comparado numericamente com resultado $\Gamma_c = 2.82J$. Então em ambos os métodos, tanto analítica como numericamente, chegamos aos mesmos resultados. Para finalizar, os resultados dos cálculos analíticos como a temperatura crítica T_c , campo crítico Γ_c e a relação $T_c \simeq \frac{2}{3}(\Gamma - \Gamma_c)$ para $T_c \simeq 0$ permanecem os mesmos em relação ao caso de simetria de réplica Alba Theumann [3] para ambos os modelos. Podemos concluir que na região crítica não se alteram os valores das quantidades termodinâmicas quando a simetria de réplica é quebrada.

4.3.3 Discussão sobre a segunda parte do trabalho.

Na segunda parte do trabalho estendemos a teoria de C. De Dominicis et. al. [5] com campo transverso. Nesta parte do trabalho também usamos a função de partição na forma de integral funcional num sistema de vidro de spins de Ising com campo transverso com operadores de spin na representação fermiônica, dentro da transformada de Fourier e na aproximação estática e na teoria de C. De Dominicis et. al. obtemos uma expressão para energia livre e também obtemos parâmetros de ordem. A vantagem é que nesta teoria é mais fácil calcular a energia livre. Nossos resultados são consistentes com a teoria de Dominicis na ausência do campo transverso no modelo de dois estados.

Mesmo na outra teoria de quebra de simetria de réplicas, a teoria de C. De Dominicis et. al., temos resultados dos cálculos analíticos na temperatura crítica, campo críticos e diagrama de fase que permanecem inalterados e são iguais aos resultados obtidos por Alba Theumann et. al. [3].

4.3.4 Considerações finais.

Do ponto de vista geral, embora as teorias de quebra de simetria de réplicas diferentes e na teoria de simetria de réplicas, chegamos ao mesmo resultado na temperatura crítica em função do campo transverso $T_c(\Gamma)$, campo crítico Γ_c e o diagrama de fase de $T_c - \Gamma$. Os resultados da energia livre da teoria de Parisi e C. De Dominicis com campo transverso são parecidos mas não são iguais.

É importante ressaltar a diferença entre a teoria de simetria de réplicas e as teorias de quebra de simetria de réplicas. Começamos na teoria de simetria de réplicas, operador de spin \widehat{S}_i^z tem uma componente e é replicado n vezes. Então a correlação de spins de réplicas diferentes é $q = \langle S_{i,\alpha}^z S_{i,\beta}^z \rangle$ onde α e β são índices de réplicas. Ainda nesta teoria SR, q independe do valor de índice de réplicas. Na quebra de simetria de réplicas QSR, na teoria de Parisi, a matriz com n elementos, a simetria de réplicas é quebrada com $K = \frac{n}{m}$ blocos de tamanho m onde atribuímos os elementos do mesmo bloco como $q + \delta$ e os elementos de blocos diferentes como q . Nesta teoria, o operador de spin ainda tem uma só componente, mas a correlação de spins de réplicas diferentes, isto é $q_{\alpha\beta} = \langle S_{i,\alpha}^z S_{i,\beta}^z \rangle$, depende do índice de réplicas. Outra teoria de quebra de simetria de réplicas é a teoria de C. de Dominicis e T.Garel. Nesta teoria, o operador de spin \widehat{S}_i^z agora tem p componentes e é replicado m vezes com $n = pm$ réplicas. A diferença entre a teoria de C. De Dominicis et al. e a teoria de Parisi é o número de componente para o operador de spin \widehat{S}_i^z . Então, o resultado q da teoria de Parisi é parecido com o resultado

R da teoria de C. De Dominicis e T. Garel porque ambas fazem correlações de réplicas diferentes. Ainda podemos concluir, embora a teoria de Parisi e a teoria de C. De Dominicis et. al. são diferentes os resultados são muito semelhante para a energia livre e os parâmetros de ordem q e R .

Capítulo 5

Apêndices

5.1 Apêndice A:

5.1.1 Parametrização de Parisi.

A parametrização do da primeira etapa de quebra de simetria de réplicas Parisi em geral é ¹:

$$\begin{aligned} Q_{\alpha\alpha} &= Q_0 \\ Q_{\alpha\beta} &= Q_1 \quad \text{se} \quad I\left(\frac{\alpha}{m}\right) = I\left(\frac{\beta}{m}\right) \\ Q_{\alpha\beta} &= Q_2 \quad \text{se} \quad I\left(\frac{\alpha}{m}\right) \neq I\left(\frac{\beta}{m}\right) \end{aligned} \quad (5.1)$$

Aplicando a parametrização acima no termo:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta}^2 &= \sum_{\beta} \left\{ \sum_{\alpha} (m-1) Q_1^2 + Q_0^2 + (n-m) Q_2^2 \right\} \\ &= n \left\{ \sum_{\alpha} (m-1) Q_1^2 + Q_0^2 + (n-m) Q_2^2 \right\} \end{aligned}$$

desprezando o n dentro dos parênteses, teremos:

$$\sum_{(\alpha\beta)} Q_{\alpha\beta}^2 = \left\{ \sum_{\alpha} m (Q_1^2 - Q_2^2) + Q_0^2 - Q_1^2 \right\} \quad (5.2)$$

¹Como os cálculos são muito parecidos, é conveniente escrever em uma forma geral.

Agora parametrizamos o termo:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta} S_{\alpha} S_{\beta} &= \sum_{\alpha} Q_{\alpha\alpha} [S_{\alpha}]^2 + \sum_{\alpha \neq \beta} Q_{\alpha\beta} S_{\alpha} S_{\beta} \\ &= \sum_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta} S_{\alpha} S_{\beta} = \\ &= \sum_{\alpha} Q_{\alpha\alpha} [S_{\alpha}]^2 + \sum_{\beta=1}^m \left\{ \sum_{\alpha=1}^m Q_1 S_{\alpha} S_{\beta} + \sum_{\alpha=m+1}^{2m} Q_2 S_{\alpha} S_{\beta} + \dots + \sum_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} Q_2 S_{\alpha} S_{\beta} \right\} \\ &+ \sum_{\beta=m'+1}^{2m} \left\{ \sum_{\alpha=1}^m Q_2 S_{\alpha} S_{\beta} + \sum_{\alpha=m+1}^{2m} Q_1 S_{\alpha} S_{\beta} + \dots + \sum_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} Q_2 S_{\alpha} S_{\beta} \right\} \\ &\dots + \sum_{\beta=(K-1)m+1}^{Km} \left\{ \sum_{\alpha=1}^m Q_2 S_{\alpha} S_{\beta} + \sum_{\alpha=m+1}^{2m} Q_2 S_{\alpha} S_{\beta} + \dots + \sum_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} Q_1 S_{\alpha} S_{\beta} \right\} \end{aligned}$$

Nota que se agrupando esses termos:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta} S_{\alpha} S_{\beta} &= \sum_{\alpha} Q_0 [S_{\alpha}]^2 + \sum_{\beta=1}^m \sum_{\alpha=1}^m Q_1 S_{\alpha} S_{\beta} + \sum_{\beta=m+1}^{2m} \sum_{\alpha=m+1}^{2m} Q_1 S_{\alpha} S_{\beta} + \dots \\ &+ \sum_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} \sum_{\beta=(K-1)m+1}^{Km} Q_1 S_{\alpha} S_{\beta} \\ &+ \sum_{\beta=m+1}^{2m} \sum_{\alpha=1}^m Q_2 S_{\alpha} S_{\beta} + \sum_{\beta=1}^m \sum_{\alpha=m+1}^{2m} Q_2 S_{\alpha} S_{\beta} + \dots + \sum_{\beta=1}^m \sum_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} Q_2 S_{\alpha} S_{\beta} \\ &\dots + \sum_{\beta=(K-1)m+1}^{Km} \sum_{\alpha=1}^m Q_2 S_{\alpha} S_{\beta} \end{aligned}$$

podemos escrever em uma forma mais geral:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta} S_{\alpha} S_{\beta} &= \sum_{\alpha} Q_0 [S_{\alpha}]^2 + \sum_{K=1}^{n/m} \sum_{\alpha=(K-1)m'+1}^{Km} \sum_{\beta=(K-1)m'+1}^{Km} Q_1 S_{\alpha} S_{\beta} \\ &+ \sum_{KK'\beta=(K-1)m+1}^{Km} \sum_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} Q_2 S_{\alpha} S_{\beta} \end{aligned}$$

Esta soma também pode ser escrita na forma quadrática:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta} S_{\alpha} S_{\beta} &= (Q_0 - Q_1) \sum_{\alpha} [S_{\alpha}]^2 + (Q_1 - Q_2) \sum_{K=1}^{n/m} \left[\sum_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} S_{\alpha} \right]^2 \\ &\quad + Q_2 \left[\sum_K \sum_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} S_{\alpha} \right]^2 \end{aligned} \quad (5.3)$$

5.2 Apêndice B:

5.2.1 Transformada de Fourier:

A função de partição:

$$Z_{2lS} = \prod_{i=1}^N \prod_{k=1}^p \int D[\psi_i^*(\tau), \psi_i(\tau)] \int_0^{2\pi} \frac{dx_i e^{-\xi_i}}{2\pi} e^{A_{2lS}[\psi_i^*(\tau), \psi_i(\tau)]} \quad (5.4)$$

onde,

$$\begin{aligned} A_{2lS}[\psi^*(\tau), \psi(\tau)] &= \int_0^{\beta} d\tau \sum_s \sum_i \left\{ \psi_{i,s}^*(\tau) \frac{\partial \psi_{i,s}(\tau)}{\partial \tau} + \frac{\xi_i \psi_{i,s}^*(\tau) \psi_{i,s}(\tau)}{\beta} + 2\Gamma S_i^x(\tau) \right\} + \\ &\quad \sum_{i,j=1}^N J_{i,j} S_i^z(\tau) S_j^z(\tau) \end{aligned}$$

onde,

$$S_i^z(\tau) = \frac{1}{2} \sum_s s \psi_{i,s}^*(\tau) \psi_{i,s}(\tau),$$

$$S_i^x(\tau) = \frac{1}{2} \sum_{s \neq s'} \psi_{i,s}^*(\tau) \psi_{i,s'}(\tau).$$

Desejamos calcular a ação A (5.4), para isso, as funções $\psi_{i,s}^*(\tau)$ e $\psi_{i,s'}(\tau)$ podem ser decompostas como uma soma de funções periódicas complexas $e^{i\omega\tau}$ com coeficientes $\psi_{i,s}^*(\omega)$ e $\psi_{i,s}(\omega)$ respectivamente no intervalo do tempo

imaginário $0 < \tau < \beta$ e onde $\omega = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$ são as frequências de Matsubara para férmions:

$$\psi_{i,s}^*(\tau) = \sum_{\omega} \psi_{i,s}^*(\omega) e^{-i\omega\tau} \quad (5.5)$$

$$\psi_{i,s}(\tau) = \sum_{\omega} \psi_{i,s}(\omega) e^{i\omega\tau} \quad (5.6)$$

Agora vamos calcular passo a passo os elementos da ação A, usando (5.5) e (5.6):

$$\begin{aligned} \int_0^{\beta} d\tau \psi_{i,s}^*(\tau) \frac{d\psi_{i,s}(\tau)}{d\tau} &= \int_0^{\beta} d\tau \sum_{\omega, \omega'} \psi_{i,s}^*(\omega) e^{i\omega\tau} \frac{d}{d\tau} \left(\psi_{i,s}(\omega') e^{i\omega'\tau} \right) \\ &= \sum_{\omega, \omega'} i\omega' \psi_{i,s}^*(\omega) \psi_{i,s}(\omega') \int_0^{\beta} d\tau e^{-i(\omega-\omega')\tau} \\ &= \sum_{\omega, \omega'} i\omega' \beta \psi_{i,s}^*(\omega) \psi_{i,s}(\omega') \delta(\omega - \omega') \\ &= i\beta \sum_{\omega} \omega \psi_{i,s}^*(\omega) \psi_{i,s}(\omega) \end{aligned} \quad (5.7)$$

a mesma coisa para:

$$\int_0^{\beta} d\tau \psi_{i,s}^*(\tau) \psi_{i,s}(\tau) = \beta \sum_{\omega} \psi_{i,s}^*(\omega) \psi_{i,s}(\omega). \quad (5.8)$$

Agora calculamos a transformada para $S^x(\tau)$:

$$\begin{aligned} \int_0^{\beta} d\tau S_i^x(\tau) &= \frac{1}{2} \int_0^{\beta} d\tau \sum_{s \neq s'} \psi_{i,s}^*(\tau) \psi_{i,s'}(\tau) \\ &= \frac{\beta}{2} \sum_{\omega} \sum_{s, s'} \psi_{i,s}^*(\omega) \psi_{i,s'}(\omega) = S_i^x(0) \end{aligned} \quad (5.9)$$

e

$$\int_0^{\beta} d\tau S_{i,k}^z(\tau) S_j^z(\tau) = \frac{1}{4} \int_0^{\beta} d\tau \sum_s s s' \psi_{i,s}^*(\tau) \psi_{i,s}(\tau) \psi_{j,s'}^*(\tau) \psi_{j,s'}(\tau)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{4} \sum_s ss' \sum_{\omega, \omega', \omega'', \omega'''} \psi_{i,s}^*(\omega) \psi_{i,s}(\omega') \psi_{j,s'}^*(\omega'') \psi_{j,s'}(\omega''') \times \\
&\quad \int_0^\beta d\tau e^{i(\omega - \omega''' + \omega'' - \omega')\tau} \\
&= \frac{\beta}{4} \sum_s ss' \sum_{\omega, \omega', \omega'', \omega'''} \psi_{i,s}^*(\omega) \psi_{i,s}(\omega') \psi_{j,s'}^*(\omega'') \psi_{j,s'}(\omega''') \delta(\omega - \omega''' + \omega'' - \omega')
\end{aligned}$$

fazendo $\Omega = \omega - \omega'$ e $\Omega' = \omega'' - \omega'$ agora substituímos ω''' por $\omega''' = \Omega - \omega$ e $\omega' = \Omega' + \omega''$, então:

$$\begin{aligned}
&\int_0^\beta d\tau S_{i,k}^z(\tau) S_j^z(\tau) = \\
&\quad \frac{\beta}{4} \sum_s ss' \sum_{\Omega, \Omega', \omega', \omega''} \psi_{i,s}^*(\omega) \psi_{i,s}(\Omega' + \omega'') \psi_{j,s'}^*(\omega'') \psi_{j,s'}(\Omega - \omega) \delta(\Omega - \Omega') \\
&= \frac{\beta}{4} \sum_s ss' \sum_{\Omega, \omega', \omega''} \psi_{i,s}^*(\omega) \psi_{i,s}(\Omega + \omega'') \psi_{j,s'}^*(\omega'') \psi_{j,s'}(\Omega - \omega) \\
&= \frac{\beta}{4} S_i(\Omega) S_j(-\Omega) \tag{5.10}
\end{aligned}$$

onde

$$S_i(\Omega) = \frac{1}{2} \sum_s \sum_\omega s \psi_{i,s}(\omega) \psi_{i,s}(\Omega + \omega'') \tag{5.11}$$

Com auxílio dos resultados (5.11-5.7) escrevemos a ação $A_{2lS}[\psi^*(\tau), \psi(\tau)]$ na transformada de Fourier:

$$\begin{aligned}
A_{2lS}[\psi^*(\omega), \psi(\omega)] &= \sum_s \sum_i \sum_\omega \{(i\beta\omega + \xi_i) \psi_{s,i}^*(\omega) \psi_{s,i}(\omega) + 2\Gamma\beta S_i^x(0)\} + \\
&\quad \beta \sum_{i,j=1}^N \sum_\Omega J_{i,j} S_{i,k}^z(\Omega) S_j^z(-\Omega)
\end{aligned}$$

Na aproximação estática, nós consideramos somente $\Omega = 0$ na soma das frequências Ω e portanto:

$$Z_{2lS} = \prod_{i=1}^N \int D[\psi_i^*(\omega), \psi_i(\omega)] \int_0^{2\pi} \frac{dx_i e^{-\xi_i}}{2\pi} e^{A_{2lS}[\psi_i^*(\omega), \psi_i(\omega)]}$$

$$\begin{aligned}
A_{2lS} [\psi^* (\omega) , \psi (\omega)] &= \sum_s \sum_i \sum_\omega \{ (i\beta\omega + \xi_i) \psi_{s,i}^* (\omega) \psi_{s,i} (\omega) + 2\Gamma\beta S_i^x (0) \} \\
&\quad \beta \sum_{i,j=1}^N J_{i,j} S_i^z (0) S_j^z (0)
\end{aligned} \tag{5.12}$$

mas isso também pode ser escrito em forma de matrizes:

$$A_{2lS} [\psi^* (\omega) , \psi (\omega)] = \sum_i \sum_\omega \underline{\psi}_i^T (\omega) \underline{\gamma}_i^{-1} (\omega) \underline{\psi}_{s,i} (\omega) + \beta \sum_{i,j=1}^N J_{i,j} S_i^z (0) S_j^z (0) \tag{5.13}$$

onde

$$\underline{\gamma}^{-1} (\omega) = (i\omega + \mu_i) \underline{\mathbf{I}} + \Gamma \underline{\sigma}^x$$

e

$$S_i^z (0) = \frac{1}{2} \sum_\omega \underline{\psi}_i^T (\omega) \underline{\sigma}^z \underline{\psi}_i (\omega)$$

$$\underline{\psi}_i^T (\omega) = \begin{bmatrix} \psi_{i,+}^* (\omega) \\ \psi_{i,-}^* (\omega) \end{bmatrix} \quad \underline{\psi}_i (\omega) = [\psi_{i,+} (\omega) \quad \psi_{i,-} (\omega)], \tag{5.14}$$

e onde $\underline{\mathbf{I}}$ é a matriz identidade e $\underline{\sigma}^x$, $\underline{\sigma}^z$ são matrizes de Pauli:

$$\underline{\sigma}^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad \underline{\sigma}^x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \underline{\mathbf{I}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{5.15}$$

As equações (5.13) podem ser conferidas em baixo:

$$\sum_s s \psi_{i,s,\alpha}^* (\omega) \psi_{i,s,\alpha} (\omega) = \underline{\psi}_{i,\alpha}^T (\omega) \underline{\sigma}^z \underline{\psi}_{i\alpha} (\omega)$$

$$\sum_{s,s'} \psi_{i,s,\alpha}^* (\omega) \psi_{i,s',\alpha} (\omega) = \underline{\psi}_{i,\alpha}^T (\omega) \underline{\sigma}^x \underline{\psi}_{i\alpha} (\omega)$$

$$\sum_s \psi_{i,s,\alpha}^* (\omega) \psi_{i,s,\alpha} (\omega) = \underline{\psi}_{i,\alpha}^T (\omega) \underline{\mathbf{I}} \underline{\psi}_{i\alpha} (\omega)$$

5.3 Apêndice C

5.3.1 Cálculo da integral funcional.

Nesta seção vamos calcular a integral funcional:

$$I = \int D [\psi^\dagger(\omega) \psi(\omega)] e^{\sum_{k,i,\alpha,\omega} \psi_{i,\alpha}^\dagger(\omega) \underline{\mathbf{G}}_{i\alpha}^{-1}(\omega) \psi_{i\alpha}(\omega)} \quad (5.16)$$

onde $\underline{\mathbf{G}}_{i\alpha}^{-1}(\omega)$ é a inversa da função de Green:

$$\underline{\mathbf{G}}_{i\alpha}^{-1}(\omega) = h_{i\alpha} \underline{\boldsymbol{\sigma}}^z + \lambda_{i\alpha}(\omega) \underline{\mathbf{I}} + \beta\Gamma \underline{\boldsymbol{\sigma}}^x \quad (5.17)$$

$$\lambda_{i\alpha}(\omega) = i\beta\omega + \xi_{i,\alpha} \quad (5.18)$$

onde $\underline{\mathbf{I}}$ é a matriz identidade e $\underline{\boldsymbol{\sigma}}^x$, $\underline{\boldsymbol{\sigma}}^z$ são spinors definidos em (5.15).

Queremos calcular a integral (5.16), é conveniente que $\underline{\mathbf{G}}_{i\alpha}^{-1}(\omega)$ seja diagonal, mas observe que

$$\underline{\mathbf{G}}_{i,\alpha}^{-1}(\omega) = \begin{bmatrix} h_{i\alpha} + \lambda_{i\alpha} - \lambda & \beta\Gamma \\ \beta\Gamma & -h_{i\alpha} + \lambda_{i\alpha} - \lambda \end{bmatrix} \quad (5.19)$$

não está na forma diagonal por causa do campo transverso, então é preciso diagonalizar. Para isso introduzimos $\underline{\boldsymbol{\psi}}(\omega) = \underline{\mathbf{S}} \underline{\boldsymbol{\rho}}(\omega)$ e $\underline{\boldsymbol{\psi}}^\dagger(\omega) = \underline{\boldsymbol{\rho}}(\omega)^\dagger \underline{\mathbf{S}}^{-1}$ na integral (5.16):

$$I = \int D [\rho^\dagger(\omega) \rho(\omega)] e^{\underline{\boldsymbol{\rho}}(\omega)^\dagger \underline{\mathbf{S}}^{-1} \underline{\mathbf{G}}_{i\alpha}^{-1}(\omega) \underline{\mathbf{S}} \underline{\boldsymbol{\rho}}(\omega)} \quad (5.20)$$

onde as matrizes $\underline{\mathbf{S}}^{-1}$ e $\underline{\mathbf{S}}$ diagonalizam $\underline{\mathbf{G}}_{i\alpha}^{-1}(\omega)$:

$$\underline{\mathbf{S}}^{-1} \underline{\mathbf{G}}_{i\alpha}^{-1}(\omega) \underline{\mathbf{S}} = \underline{\mathbf{G}}_{i\alpha}^{-1D}(\omega) \quad (5.21)$$

Assim pode-se escrever a integral funcional:

$$I = \int D [\rho^\dagger(\omega) \rho(\omega)] e^{\underline{\boldsymbol{\rho}}(\omega)^\dagger \underline{\mathbf{G}}_{i\alpha}^{-1D}(\omega) \underline{\boldsymbol{\rho}}(\omega)} \quad (5.22)$$

Uma forma simples de encontrar $\underline{\mathbf{G}}_{i\alpha}^{-1D}(\omega)$ é calcular os autovalores da matriz $\underline{\mathbf{G}}_{i,\alpha}^{-1}(\omega)$. Para isso calculamos o determinante da matriz $\underline{\mathbf{G}}_{i,\alpha}^{-1}(\omega)$,

$$\det |\underline{\mathbf{G}}_{i,\alpha}(\omega)| = \det \left| \begin{bmatrix} h_{i\alpha} + \lambda_{i\alpha}(\omega) - \lambda & \beta\Gamma \\ \beta\Gamma & -h_{i\alpha} + \lambda_{i\alpha}(\omega) - \lambda \end{bmatrix} \right| = 0$$

as soluções que satisfazem a equação acima são autovalores:

$$\lambda_{\pm} = \lambda_{i\alpha}(\omega) \pm \sqrt{h_{i\alpha}^2 + \beta^2\Gamma^2} = \lambda_{i\alpha}(\omega) \pm \sqrt{\Delta_{j\alpha}}.$$

Com estes autovalores é possível construir o inverso do propagador $\underline{\mathbf{G}}_{i,\alpha}^{-1}(\omega)$ na forma diagonal:

$$\underline{\mathbf{G}}_{i\alpha}^{-1D}(\omega) = \begin{bmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_{i\alpha}(\omega) + \sqrt{\Delta_{i\alpha}} & 0 \\ 0 & \lambda_{i\alpha}(\omega) - \sqrt{\Delta_{i\alpha}} \end{bmatrix} \quad (5.23)$$

Portanto,

$$I = \prod_{\alpha=0}^n \prod_{\omega}^{\infty} d\psi_{i\alpha}^*(\omega) d\psi_{i\alpha}(\omega) e^{\sum_s (\lambda_{i\alpha}(\omega) + s\sqrt{\Delta_{i\alpha}}) \psi_{i\alpha}^*(\omega) \psi_{i\alpha}(\omega)} \quad (5.24)$$

A integral funcional para férmion é com variáveis de Grassmann e pode ser avaliada até primeira potência da exponencial. O primeiro termo da exponencial expandida é zero e omitiremos no cálculo (ver na introdução), portanto a expansão da exponencial em primeira potência é:

$$I = \prod_{s=-1}^1 \prod_{\alpha=0}^n \prod_{\omega}^{\infty} (\lambda_{i\alpha}(\omega) + s\sqrt{\Delta_{i\alpha}}) = \prod_{\alpha} e^{\rho_{i\alpha}} \quad (5.25)$$

onde

$$\rho_{i\alpha} = \sum_{\omega} \sum_s \ln (\lambda_{i\alpha}(\omega) + s\sqrt{\Delta_{i\alpha}})$$

ou usando (5.16)

$$\rho_{i\alpha} = \sum_{\omega} \sum_s \ln (i\beta\omega + \xi_{i,\alpha} + s\sqrt{\Delta_{i\alpha}}). \quad (5.26)$$

Mas ainda resta calcular a soma das frequências de Matsubara ω , para isso devemos derivar $\xi_{i\alpha}$ porque não depende de ω , então:

$$\frac{d\rho_{i\alpha}}{d\xi_{i\alpha}} = \sum_{\omega} \frac{1}{i\beta\omega + p_{i\alpha+}} + \frac{1}{i\beta\omega + p_{i\alpha-}} \quad (5.27)$$

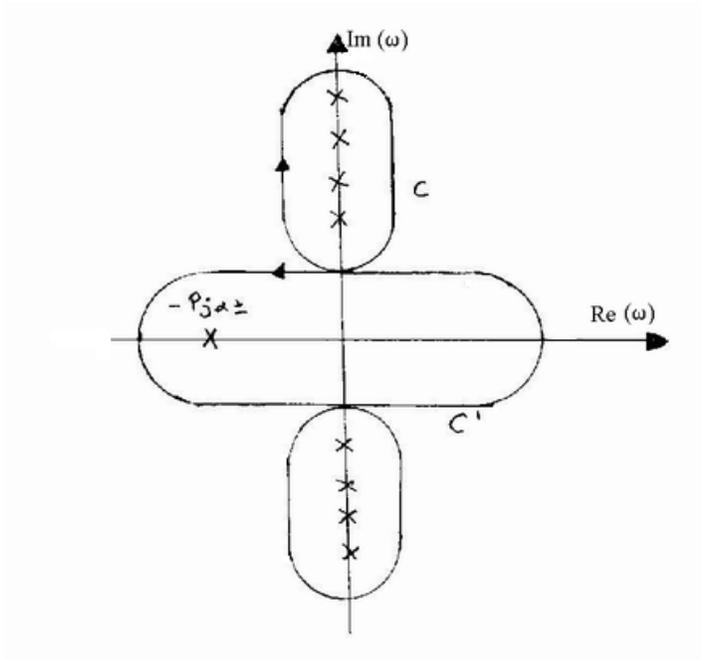
onde

$$p_{i,\alpha,\pm} = \xi_{i,\alpha} \pm \sqrt{\Delta_{i\alpha}} \quad (5.28)$$

A fórmula de Poisson para férmions ver [34, 33]:

$$I = \frac{1}{2\pi i} \oint_c \frac{F(\omega)}{e^{\beta\omega} + 1} = \frac{1}{2\pi i} \oint_c \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1} \frac{1}{\beta\omega + p_{i\alpha\pm}} \quad (5.29)$$

Com auxílio do gráfico do contorno no plano complexo:



O eixo imaginário ω na ordenada e o eixo real ω na abscissa. O contorno C está no sentido horário que possui pólos $n=-\infty.. \infty$ é deformado para o contorno C' no sentido anti-horário que agora possui um pólo à esquerda no ponto $\omega = -p_{j\alpha}$.

Para avaliar a integral, nós deformamos o contorno C para contorno C' , a integral troca de sinal porque o contorno C está no sentido horário e o C' está no sentido anti-horário, no contorno C tem pólos $\omega_n = \frac{(2n+1)\pi i}{\beta}$:

$$I - \frac{1}{2\pi i} \oint_{C'} \frac{d\omega}{(\beta\omega + p_{i\alpha\pm})(e^{\beta\omega} + 1)} = \sum_n \frac{2\pi i}{2\pi i} F \left[\frac{(2n+1)\pi i}{\beta} \right]$$

onde $\omega_n = \frac{(2n+1)\pi i}{\beta}$ é a frequência de Matsubara. Então

$$I - \frac{1}{2\pi i} \oint_{C'} \frac{d\omega}{(\beta\omega + p_{i\alpha\pm})(e^{\beta\omega} + 1)} = - \sum_{\omega} \frac{1}{i\beta\omega + p_{i\alpha\pm}}$$

mas

$$I = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{F(\omega)}{e^{\beta\omega} + 1} = \frac{2\pi i}{2\pi i} \frac{1}{e^{-p_{i\alpha\pm}} + 1}$$

igualando-se as duas últimas equações nós temos:

$$- \sum_{\omega} \frac{1}{i\beta\omega + p_{i\alpha\pm}} = \frac{1}{e^{-p_{i\alpha\pm}} + 1} \quad (5.30)$$

introduz-se (5.30) em (5.27)

$$\frac{d\rho_{j\alpha}}{d\xi_{j,s}} = \frac{-1}{1 + \exp(p_{i\alpha+})} - \frac{1}{1 + \exp(p_{i\alpha-})}$$

mas lembrando que:

$$\int \frac{d\rho_{i\alpha}}{d\xi_{i,\alpha}} d\xi_{i,\alpha} = - \int \frac{d\xi_{i,\alpha}}{1 + \exp(\xi_{i\alpha} + \sqrt{\Delta_{i\alpha}})} - \int \frac{d\xi_{i\alpha}}{1 + \exp(\xi_{i\alpha} - \sqrt{\Delta_{i\alpha}})}$$

troca-se a variável,

$$y_{\alpha\pm} = \xi_{i\alpha} \pm \sqrt{\Delta_{i\alpha}}$$

$$\rho_{i\alpha} = - \int \frac{dy_{\alpha+}}{1 + \exp(y_{\alpha+})} - \int \frac{dy_{\alpha-}}{1 + \exp(y_{\alpha-})}$$

isso pode ser integrado facilmente, e obtemos:

$$\rho_{i\alpha} = \ln(1 + \exp(-y_{\alpha+})) + \ln(1 + \exp(-y_{\alpha-}))$$

e lembrando $y_{\alpha\pm} = \xi_{i\alpha} \pm \sqrt{\Delta_{i\alpha}}$,

$$\rho_{i\alpha} = \ln\left(1 + \exp\left(\xi_{i\alpha} + \sqrt{\Delta_{i\alpha}}\right)\right) + \ln\left(1 + \exp\left(-\xi_{i\alpha} - \sqrt{\Delta_{i\alpha}}\right)\right),$$

em (5.25) é igual a,

$$\begin{aligned} I &= \prod_{\alpha} e^{\Phi_{i\alpha}} = \prod_{\alpha=0}^n \left(1 + \exp\left(\xi_{i\alpha} + \sqrt{\Delta_{j\alpha}}\right)\right) \left(1 + \exp\left(-\xi_{i\alpha} - \sqrt{\Delta_{j\alpha}}\right)\right) \\ I &= \prod_{\alpha=0}^n \left\{1 + e^{2\xi_{i\alpha}} + 2e^{\xi_{i\alpha}} \cosh \sqrt{\Delta_{i\alpha}}\right\} \end{aligned} \quad (5.31)$$

5.4 Apêndice D

5.4.1 Cálculo detalhado na determinação da temperatura crítica.

Detalhes do cálculo para a determinação da temperatura crítica. Expansão de $\bar{\chi}$ deve ser feita em série de potências de q e δ :

$$\bar{\chi} = C_0 + C_1q + C_2\delta + C_3q\delta + C_4q^2 + C_5\delta^2 + \dots \quad (5.32)$$

por outro lado,

$$\bar{\chi} = g(q, \delta, \bar{\chi}) \quad (5.33)$$

a função $g(q, \delta, \bar{\chi})$ é igual a (2.23). Agora resolvemos isso introduzindo (5.33) em (5.32) ambos os lados:

$$C_0 + C_1 q + C_2 \delta + C_3 q \delta + C_4 q^2 + C_5 \delta^2 = g(q, \delta, C_0 + C_1 q + C_2 \delta + C_3 q \delta + C_4 q^2 + C_5 \delta^2). \quad (5.34)$$

A seguir, expande em série de Taylor até segunda potência:

$$\begin{aligned} \bar{\chi} = & g(C_0, 0, 0) + \frac{dg}{dq}|_{q,\delta=0} q + \frac{dg}{d\delta}|_{q,\delta=0} \delta + \\ & \frac{d^2g}{dq d\delta}|_{q,\delta=0} q \delta + \frac{1}{2} \frac{d^2g}{dq^2}|_{q,\delta=0} q^2 + \frac{1}{2} \frac{d^2g}{d\delta^2}|_{q,\delta=0} \delta^2. \end{aligned}$$

A equação acima está escrita em termos de derivadas totais, mas como há mais variáveis independentes, então é conveniente escrever em termos de derivadas parciais:

$$\begin{aligned} \bar{\chi} = & g(C_0, 0, 0) + \left(\frac{\partial g}{\partial \bar{\chi}} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial q} + \frac{\partial g}{\partial q} \right) |_{q,\delta=0} q + \left(\frac{\partial g}{\partial \bar{\chi}} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial \delta} + \frac{\partial g}{\partial \delta} \right) |_{q,\delta=0} \delta \\ & \left[\frac{\partial^2 g}{\partial \bar{\chi} \partial \delta} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial q} + \frac{\partial^2 g}{\partial q \partial \bar{\chi}} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial \delta} + \frac{\partial^2 g}{\partial \bar{\chi}^2} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial \delta} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial q} + \frac{\partial g}{\partial \bar{\chi}} \frac{\partial^2 \bar{\chi}}{\partial \delta \partial q} + \frac{\partial^2 g}{\partial \bar{\chi} \partial \delta} \right] |_{q,\delta=0} \delta q + \\ & \frac{1}{2} \left[2 \frac{\partial^2 g}{\partial \bar{\chi} \partial q} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial q} + \frac{\partial g}{\partial q} \frac{\partial^2 \bar{\chi}}{\partial q^2} + \frac{\partial^2 g}{\partial \bar{\chi}^2} \left(\frac{\partial \bar{\chi}}{\partial q} \right)^2 + \frac{\partial^2 g}{\partial q^2} \right] |_{q,\delta=0} q^2 + \\ & \frac{1}{2} \left[2 \frac{\partial^2 g}{\partial \bar{\chi} \partial q} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial \delta} + \frac{\partial g}{\partial \delta} \frac{\partial^2 \bar{\chi}}{\partial \delta^2} + \frac{\partial^2 g}{\partial \bar{\chi}^2} \left(\frac{\partial \bar{\chi}}{\partial \delta} \right)^2 + \frac{\partial^2 g}{\partial \delta^2} \right] |_{q,\delta=0} \delta^2 \quad (5.35) \end{aligned}$$

Agora vamos calcular os elementos C_1, C_2, C_3 e C_3 da (5.32):

$$\frac{\partial \bar{\chi}}{\partial q}|_{q,\delta=0} = C_1 \quad \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial \delta}|_{q,\delta=0} = C_2 \quad \frac{\partial^2 \bar{\chi}}{\partial q \partial \delta}|_{q,\delta=0} = C_3 \quad \frac{\partial^2 \bar{\chi}}{\partial q^2}|_{q,\delta=0} = 2C_4 \quad \frac{\partial^2 \bar{\chi}}{\partial \delta^2}|_{q,\delta=0} = 2C_5 \quad (5.36)$$

Introduzindo os termos da (5.36) em (5.35) e resolvendo-se os termos C_0, C_1, C_2, C_3, C_4 e C_5 teremos as seguintes soluções:

$$C_0 = g(0, 0, C_0) \quad (5.37)$$

$$C_1 = \frac{\partial g}{\partial q}|_{q,\delta=0} / \left(1 - \frac{\partial g}{\partial \bar{\chi}}|_{q,\delta=0} \right) \quad (5.38)$$

$$C_2 = \frac{\partial g}{\partial \delta}|_{q,\delta=0} / \left(1 - \frac{\partial g}{\partial \bar{\chi}}|_{q,\delta=0} \right) \quad (5.39)$$

$$C_3 = \left\{ \frac{\partial^2 g}{\partial \delta \partial \bar{\chi}}|_{q,\delta=0} C_1 + \frac{\partial^2 g}{\partial q \partial \bar{\chi}}|_{q,\delta=0} C_2 + \frac{\partial^2 g}{\partial \bar{\chi}^2}|_{q,\delta=0} C_1 C_2 + \frac{\partial^2 g}{\partial \delta \partial q}|_{q,\delta=0} \right\} / \left(1 - \frac{\partial g}{\partial \bar{\chi}}|_{q,\delta=0} \right) \quad (5.40)$$

$$C_4 = \left\{ \frac{\partial^2 g}{\partial q \partial \bar{\chi}}|_{q,\delta=0} C_1 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 g}{\partial \bar{\chi}^2}|_{q,\delta=0} C_1^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 g}{\partial q^2}|_{q,\delta=0} \right\} / \left(1 - \frac{\partial g}{\partial \bar{\chi}}|_{q,\delta=0} \right) \quad (5.41)$$

$$C_4 = \left\{ \frac{\partial^2 g}{\partial \delta \partial \bar{\chi}}|_{q,\delta=0} C_2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 g}{\partial \bar{\chi}^2}|_{q,\delta=0} C_2^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 g}{\partial q^2}|_{q,\delta=0} \right\} / \left(1 - \frac{\partial g}{\partial \bar{\chi}}|_{q,\delta=0} \right) \quad (5.42)$$

Antes de analisar a expansão dos termos $C_0 \dots C_5$ devemos analisar os significados dos coeficientes $\phi_{0,2lS}$, ϕ_2 , ϕ_3 e ϕ_4 que serão usados posteriormente:

$$\Phi_{0,2lS}|_{q,\delta=0} = \phi_{0,2lS} = \int Dz_3 \left(1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Delta_o} \right) \quad (5.43)$$

onde $\Delta_o = \gamma_o^2 + \beta^2 \Gamma^2$ e $\gamma_o^2 = 2\bar{\chi} \beta^2 J^2 z_3^2$, e o Φ_1 :

$$\Phi_1|_{q,\delta=0} = \phi_1 = \int Dz_3 2 \sinh \sqrt{\Delta_o} \frac{\gamma_o}{\sqrt{\Delta_o}} = 0 \quad (5.44)$$

A integral acima é ímpar, portanto é igual a zero e o R_2 :

$$\Phi_2|_{q,\delta=0} = \phi_2 = \int Dz_3 2 \cosh \sqrt{\Delta_o} \frac{\gamma_o^2}{\Delta_o} + \int Dz_3 2 \sinh \sqrt{\Delta_o} \frac{\beta^2 \Gamma^2}{\Delta_o^{3/2}} \quad (5.45)$$

A função Φ_3 :

$$\begin{aligned} \Phi_3|_{q,\delta=0} = \phi_3 = & \int Dz_3 2 \cosh \sqrt{\Delta_o} \left(\frac{2\beta J z_3 \sqrt{2\bar{\chi}}}{\Delta_o} - \frac{2\beta J z_3 \sqrt{2\bar{\chi}}}{\Delta_o^2} (\beta^2 \Gamma^2 - 2\beta^2 J^2 z_3^2 \bar{\chi}) \right) \\ & \int Dz_3 2 \sinh \sqrt{\Delta_o} \left\{ \frac{2\beta^2 J^2 z_3^2 \bar{\chi}}{\Delta_o^{3/2}} - \frac{6\beta^2 \Gamma^2}{\Delta_o^{5/2}} \right\} \end{aligned}$$

$$\phi_3 = 0 \quad (5.46)$$

Porque ϕ_3 também é ímpar e portanto a integral é zero.

$$\begin{aligned} \Phi_4|_{q,\delta=0} = \phi_4 &= \int Dz_3 2 \cosh \sqrt{\Delta_o} \left\{ \left(\frac{2}{\Delta_o} - \frac{4\gamma_o^2}{\Delta_o^2} \right) \left(1 - \frac{1}{\Delta_o^2} + \frac{4\gamma_o^2}{\Delta_o^3} \right) - \frac{\gamma_o^3}{\Delta_o^2} - \frac{6\beta^2\Gamma^2\gamma_o}{\Delta_o^3} \right\} \\ &+ \int Dz_3 2 \sinh \sqrt{\Delta_o} \left\{ -\frac{2\gamma_o^2}{\Delta_o^{3/2}} \left(1 - \gamma_o^2 + \beta^2\Gamma^2 + \frac{1}{\gamma_o^2} \right) - \frac{3\gamma_o^3}{\Delta_o^{5/2}} - \frac{60\beta^2\Gamma^2\gamma_o}{\Delta_o^{7/2}} \right\} \end{aligned} \quad (5.47)$$

Para o primeiro termo C_0 obtemos da equação (2.23):

$$C_0 = g(0.0, C_0)$$

$$g = \bar{\chi}|_{q,\delta=0} = \int Dz_1 \frac{1}{K_{2lS}} \int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^{m-1} \Phi_2 - q|_{q,\delta=0} = \frac{\phi_2}{\phi_{0,2lS}} = \bar{\chi}_o \quad (5.48)$$

Para o segundo termo C_1 :

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial \bar{\chi}}|_{q=\bar{\chi}=0} &= \frac{\partial}{\partial \bar{\chi}} \left[\int Dz_1 \frac{1}{K_{2lS}} \int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^{m-1} \Phi_2 - q \right] |_{q,\delta=0} \\ \frac{\partial g}{\partial \bar{\chi}}|_{q=\bar{\chi}=0} &= \beta^2 J^2 \left\{ \frac{\phi_4}{\phi_{0,2lS}} - \frac{\phi_2^2}{\phi_{02lS}^2} \right\} \end{aligned} \quad (5.49)$$

$$\frac{\partial g}{\partial q}|_{q=\bar{\chi}=0} = \beta^2 J^2 \left\{ \frac{\phi_4}{\phi_{0,2lS}} - \frac{\phi_2^2}{\phi_{02lS}^2} \right\} - 1 \quad (5.50)$$

Com os resultados (5.50) e (5.49) podemos escrever C_1 , equação (5.38), temos:

$$C_1 = \frac{-1 + \beta^2 J^2 \left\{ \frac{\phi_4}{\phi_{0,2lS}} - \frac{\phi_2^2}{\phi_{0,2lS}^2} \right\}}{1 - \beta^2 J^2 \left\{ \frac{\phi_4}{\phi_{0,2lS}} - \frac{\phi_2^2}{\phi_{0,2lS}^2} \right\}} = -1 \quad (5.51)$$

Na equação (5.39) precisamos calcular:

$$\frac{\partial g}{\partial \delta}|_{q,\delta=0} = 0$$

portanto o termo C_2 :

$$C_2 = 0. \quad (5.52)$$

O termo C_3

$$C_3 = \frac{2(m-1)\beta^4 J^4 \left[\frac{\phi_4 \phi_2}{\phi_{0,2IS}^2} - \frac{\phi_2^3}{\phi_{0,2IS}^3} \right]}{1 - \beta^2 J^2 \left\{ \frac{\phi_4}{\phi_{0,2IS}} - \frac{\phi_2^2}{\phi_{0,2IS}^2} \right\}} \quad (5.53)$$

O termo C_4

$$C_4 = \frac{2 \frac{r_2}{r_{0,2IS}} \left(\frac{\phi_2^2}{\phi_{0,2IS}^2} - \frac{\phi_4}{\phi_{0,2IS}} \right)}{1 - \beta^2 J^2 \left\{ \frac{\phi_4}{\phi_{0,2IS}} - \frac{\phi_2^2}{\phi_{0,2IS}^2} \right\}} \quad (5.54)$$

O termo C_5

$$C_5 = \frac{1}{2} \frac{(m-1)\beta^4 J^4 \left(\frac{\phi_2^2}{\phi_{0,2IS}^2} - \frac{\phi_4}{\phi_{0,2IS}} \right)}{1 - \beta^2 J^2 \left\{ \frac{\phi_4}{\phi_{0,2IS}} - \frac{\phi_2^2}{\phi_{0,2IS}^2} \right\}} \quad (5.55)$$

Através dos termos (5.51)-(5.55) podemos escrever uma expressão para em (5.32):

$$\bar{\chi} = \bar{\chi}_0 - q + 4\zeta(m-1)\delta q + 2(m-1)\zeta\delta^2 - 2\zeta q^2 \quad (5.56)$$

ou

$$\bar{\chi} = \bar{\chi}_0 - q + 2\zeta(m-1)(q + \delta)^2 - 2m\zeta q^2$$

cujos coeficientes identificam-se

$$\begin{aligned} C_0 &= \bar{\chi}_0, & C_1 &= -1, & C_2 &= 0, & C_3 &= 2\zeta(m-1), & C_4 &= -2\zeta, \\ C_5 &= 2\zeta(m-1), \end{aligned} \quad (5.57)$$

e

$$\zeta = \frac{\beta^4 J^4 \left[\frac{\phi_4 \phi_2}{\phi_{0,2IS}^2} - \frac{\phi_2^3}{\phi_{0,2IS}^3} \right]}{1 - \beta^2 J^2 \left(\frac{\phi_4}{\phi_{0,2IS}} - \frac{\phi_2^2}{\phi_{0,2IS}^2} \right)}. \quad (5.58)$$

Agora expande-se a energia livre em série de potências de q e δ :

$$\begin{aligned} f(q, \delta, \bar{\chi}) &= f(0, 0, \bar{\chi}) + \frac{df}{dq}\Big|_{q,\delta=0} q + \frac{df}{d\delta}\Big|_{q,\delta=0} \delta + \frac{1}{2} \frac{d^2 f}{d\delta^2}\Big|_{q,\delta=0} \delta^2 + \frac{1}{2} \frac{d^2 f}{dq^2}\Big|_{q,\delta=0} q^2 \\ &\quad + \frac{d^2 f}{d\delta dq}\Big|_{q,\delta=0} q\delta \end{aligned} \quad (5.59)$$

onde

$$\begin{aligned}
\frac{df}{dq}\Big|_{q,\delta=0} &= \frac{\partial f}{\partial \bar{\chi}} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial q}\Big|_{q,\delta=0} + \frac{\partial f}{\partial q}\Big|_{q,\delta=0} \\
\frac{df}{d\delta}\Big|_{q,\delta=0} &= \frac{\partial f}{\partial \bar{\chi}} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial \delta}\Big|_{q,\delta=0} + \frac{\partial f}{\partial \delta}\Big|_{q,\delta=0} \\
\frac{d^2 f}{dq^2}\Big|_{q,\delta=0} &= 2 \frac{\partial^2 f}{\partial q \partial \bar{\chi}} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial q}\Big|_{q,\delta=0} + \frac{\partial^2 f}{\partial \bar{\chi}^2} \left(\frac{\partial \bar{\chi}}{\partial q} \right)^2 \Big|_{q,\delta=0} + \frac{\partial f}{\partial \bar{\chi}} \frac{\partial^2 \bar{\chi}}{\partial q^2}\Big|_{q,\delta=0} + \frac{\partial^2 f}{\partial q^2}\Big|_{q,\delta=0} \\
\frac{d^2 f}{d\delta^2}\Big|_{q,\delta=0} &= 2 \frac{\partial^2 f}{\partial \delta \partial \bar{\chi}} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial \delta}\Big|_{q,\delta=0} + \frac{\partial^2 f}{\partial \bar{\chi}^2} \left(\frac{\partial \bar{\chi}}{\partial \delta} \right)^2 \Big|_{q,\delta=0} + \frac{\partial f}{\partial \bar{\chi}} \frac{\partial^2 \bar{\chi}}{\partial \delta^2}\Big|_{q,\delta=0} + \frac{\partial^2 f}{\partial \delta^2}\Big|_{q,\delta=0} \\
\frac{d^2 f}{dq d\delta}\Big|_{q,\delta=0} &= 2 \frac{\partial^2 f}{\partial \delta \partial \bar{\chi}} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial q}\Big|_{q,\delta=0} + \frac{\partial^2 f}{\partial \bar{\chi}^2} \left(\frac{\partial \bar{\chi}}{\partial q} \right)^2 \Big|_{q,\delta=0} + \frac{\partial f}{\partial \bar{\chi}} \frac{\partial^2 \bar{\chi}}{\partial q \partial \delta}\Big|_{q,\delta=0} + \\
&\quad \frac{\partial^2 f}{\partial \bar{\chi}^2} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial q} \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial \delta}\Big|_{q,\delta=0} + \frac{\partial^2 f}{\partial q \partial \delta}\Big|_{q,\delta=0}
\end{aligned} \tag{5.60}$$

Com o uso da (5.60) e (5.36) podemos escrever então a energia livre na seguinte forma:

$$\begin{aligned}
f &= f(0, 0, C_0) + \left[\frac{\partial f}{\partial \bar{\chi}}\Big|_{q,\delta=0} C_1 + \frac{\partial f}{\partial q}\Big|_{q,\delta=0} \right] q + \left[\frac{\partial f}{\partial \bar{\chi}}\Big|_{q,\delta=0} C_2 + \frac{\partial f}{\partial \delta}\Big|_{q,\delta=0} \right] \delta + \\
&\quad \frac{1}{2} \left[2 \frac{\partial^2 f}{\partial q \partial \bar{\chi}}\Big|_{q,\delta=0} C_1 + \frac{\partial^2 f}{\partial \bar{\chi}^2}\Big|_{q,\delta=0} C_1^2 + 2 \frac{\partial f}{\partial \bar{\chi}}\Big|_{q,\delta=0} C_4 + \frac{\partial^2 f}{\partial q^2}\Big|_{q,\delta=0} \right] q^2 + \\
&\quad \frac{1}{2} \left[2 \frac{\partial^2 f}{\partial \delta \partial \bar{\chi}}\Big|_{q,\delta=0} C_2 + \frac{\partial^2 f}{\partial \bar{\chi}^2}\Big|_{q,\delta=0} C_2^2 + 2 \frac{\partial f}{\partial \bar{\chi}}\Big|_{q,\delta=0} C_5 + \frac{\partial^2 f}{\partial \delta^2}\Big|_{q,\delta=0} \right] \delta^2 + \\
&\quad \left[2 \frac{\partial^2 f}{\partial \delta \partial \bar{\chi}}\Big|_{q,\delta=0} C_1 + \frac{\partial^2 f}{\partial \bar{\chi}^2}\Big|_{q,\delta=0} C_2 C_1 + \frac{\partial f}{\partial \bar{\chi}}\Big|_{q,\delta=0} C_3 + \frac{\partial^2 f}{\partial q \partial \delta}\Big|_{q,\delta=0} \right] q\delta. \tag{5.61}
\end{aligned}$$

Os coeficientes C_0, C_1, C_2, C_3 e C_4 já estão determinados em (5.57) e isso permite escrever (5.61):

$$\begin{aligned}
f &= f(0, 0, \bar{\chi}_0) + \left[-\frac{\partial f}{\partial \bar{\chi}}\Big|_{q,\delta=0} + \frac{\partial f}{\partial q}\Big|_{q,\delta=0} \right] q + \frac{\partial f}{\partial \delta}\Big|_{q,\delta=0} \delta + \\
&\quad \frac{1}{2} \left[-2 \frac{\partial^2 f}{\partial q \partial \bar{\chi}}\Big|_{q,\delta=0} + \frac{\partial^2 f}{\partial \bar{\chi}^2}\Big|_{q,\delta=0} - 4\zeta \frac{\partial f}{\partial \bar{\chi}}\Big|_{q,\delta=0} + \frac{\partial^2 f}{\partial q^2}\Big|_{q,\delta=0} \right] q^2 + \\
&\quad \frac{1}{2} \left[4\zeta (m-1) \frac{\partial f}{\partial \bar{\chi}}\Big|_{q,\delta=0} + \frac{\partial^2 f}{\partial \delta^2}\Big|_{q,\delta=0} \right] \delta^2 + \\
&\quad \left[-2 \frac{\partial^2 f}{\partial \delta \partial \bar{\chi}}\Big|_{q,\delta=0} + 4\zeta (m-1) \frac{\partial f}{\partial \bar{\chi}}\Big|_{q,\delta=0} + \frac{\partial^2 f}{\partial q \partial \delta}\Big|_{q,\delta=0} \right] q\delta. \tag{5.62}
\end{aligned}$$

O termo de ordem zero:

$$f(0, 0, \bar{\chi}_0) = \frac{1}{2}\beta J^2 \bar{\chi}_0 - \frac{1}{\beta} \ln \phi_{0,2lS}. \quad (5.63)$$

O termo de ordem um para, q :

$$\frac{df}{dq} = \left[-\frac{\partial f}{\partial \bar{\chi}} \Big|_{q,\delta=0} + \frac{\partial f}{\partial q} \Big|_{q,\delta=0} \right] = \left[-\beta J^2 \left[\bar{\chi}_o - \frac{\phi_2}{\phi_{0,2lS}} \right] + -\beta J^2 \left[\bar{\chi}_o - \frac{\phi_2}{\phi_{0,2lS}} \right] \right] = 0. \quad (5.64)$$

O termo de ordem um, δ :

$$\frac{df}{d\delta} \Big|_{q,\delta=0} = 0. \quad (5.65)$$

O termo de ordem dois, q^2 :

$$\frac{1}{2} \frac{d^2 f}{dq^2} \Big|_{q,\delta=0} = \frac{1}{2} \beta J^2 \left[-1 + 2\beta^2 J^2 \frac{\phi_2}{\phi_{0,2lS}} - 4\zeta \left[\bar{\chi}_o - \frac{\phi_2}{\phi_{0,2lS}} \right] \right]. \quad (5.66)$$

O termo de ordem dois, δ^2 e $q\delta$:

$$\frac{1}{2} \frac{d^2 f}{d\delta^2} \Big| = \frac{1}{2} (m-1) \beta J^2 \left[4\zeta \left[\bar{\chi}_o - \frac{\phi_2}{\phi_{0,2lS}} \right] + 1 - 2\beta^2 J^2 \frac{\phi_2^2}{\phi_{0,2lS}^2} \right], \quad (5.67)$$

$$\frac{d^2 f}{d\delta dq} = (m-1) \beta J^2 \left[1 - 2\beta^2 J^2 \frac{\phi_2^2}{\phi_{0,2lS}^2} + 4\zeta \left[\bar{\chi}_o - \frac{\phi_2}{\phi_{0,2lS}} \right] \right]. \quad (5.68)$$

mas o termo $4\zeta \left[\bar{\chi}_o - \frac{\phi_2}{\phi_{0,2lS}} \right]$ que está nas equações (5.66), (5.67) e (5.68), é igual a zero por causa da solução do ponto de sela $\frac{\partial f}{\partial \bar{\chi}} = 0$.

Usando (5.63)-(5.68) para escrever a expansão da energia livre (5.59):

$$f = \frac{1}{2}\beta J^2 \bar{\chi}_0 - \frac{1}{\beta} \ln \phi_{0,2lS} - \frac{1}{2} D q^2 + \frac{1}{2} D (m-1) \delta^2 + D (m-1) \delta q \quad (5.69)$$

ou

$$f = f_0 - \frac{1}{2} D m q^2 + \frac{1}{2} (q + \delta)^2 (m-1) D, \quad (5.70)$$

onde

$$D = \beta J^2 \left(1 - 2\beta^2 J^2 \frac{\phi_2^2}{\phi_{0,2lS}^2} \right)$$

e

$$f_0 = \frac{1}{2} \beta J^2 \bar{\chi}_0 - \frac{1}{\beta} \ln \phi_{0,2lS}.$$

5.5 Apêndice E

5.5.1 Cálculo detalhado na determinação da temperatura crítica para $\Gamma = 0$ para o modelo de dois estados (2S) e o modelo de quatro estados (4S).

Primeiro vamos determinar as temperaturas críticas para os dois modelos com $\Gamma = 0$. Para isso vamos procurar escrever ϕ_0 e ϕ_1 de forma mais conveniente, introduzindo:

$$I_n = \int D z_3 z_3^{2n} \cosh \sqrt{\Delta_o} \quad (5.71)$$

Agora queremos relacionar I_0 e I_1 com $\frac{\phi_2}{\phi_{0,2lS}}$. Então vamos começar a relacionar o I_0 com $\phi_{0,2lS}$:

$$\phi_{0,2lS} = (-1)^l + 1 + 2I_0 = 2L + 2I_0 \quad (5.72)$$

onde

$$L = 0 \quad \text{para modelo 2S,}$$

$$L = 1 \quad \text{para modelo 4S}$$

e I_0 é dado por:

$$I_0 = \int D z_3 \cosh \sqrt{\Delta_o}. \quad (5.73)$$

Agora falta relacionar I_1 com ϕ_0 e ϕ_2 :

$$I_1 = \int D z_3 z_3^2 \cosh \sqrt{\Delta_o}$$

integrando-se por partes, teremos,

$$I_1 = 2 \int Dz_3 \left\{ \cosh \sqrt{\Delta_o} \frac{\gamma^2}{\Delta_o} + \frac{\beta^2 \Gamma^2}{\Delta_o^{3/2}} \sinh \sqrt{\Delta_o} \right\} \beta^2 J^2 \bar{\chi} + \int Dz_3 \cosh \sqrt{\Delta_o}$$

é igual a

$$I_1 = 2r_2 \beta^2 J^2 \bar{\chi} + I_0.$$

Resolvendo para ϕ_2 :

$$\phi_2 = \frac{I_1 - I_0}{2\beta^2 J^2 \bar{\chi}}$$

Agora precisamos relacionar ϕ_0 e ϕ_2 e I_0 e I_1 :

$$\frac{\phi_2}{\phi_{0,2IS}} = \frac{I_1 - I_0}{2\beta^2 J^2 \bar{\chi} (I_0 + L)} = \frac{(I_1 + L) - (I_0 + L)}{2\beta^2 J^2 \bar{\chi} (I_0 + L)} = \frac{1}{2\beta^2 J^2 \bar{\chi}} (P_L - 1)$$

onde

$$P_L = \frac{I_1 + L}{I_0 + L},$$

Observando-se a equação (2.36), podemos escrever

$$\bar{\chi}_c = \frac{1}{\beta J \sqrt{2}} \sqrt{P_L - 1}, \quad (5.74)$$

introduzimos (5.74) em (2.37), temos

$$2 = P_L$$

ou

$$2 = \frac{I_1 + L}{I_0 + L}. \quad (5.75)$$

Finalmente vamos calcular β_c para $L = 0$ e $L = 1$ no $\Gamma = 0$. Para isso começamos pelo I_0 em (5.73):

$$I_0 = \int Dz_3 \cosh \sqrt{2\beta^2 J^2 z_3^2 \bar{\chi} + \beta^2 \Gamma^2}$$

agora se substitui β pelo β_c e colocando o $\Gamma = 0$:

$$I_0 = \int Dz_3 \cosh \sqrt{2\beta_c^2 J^2 z_3^2 \bar{\chi}} \quad (5.76)$$

mas $\bar{\chi} = \bar{\chi}_c$ quando $\beta = \beta_c$ então usamos (2.37) para substituir $\bar{\chi}$ na integral acima:

$$\begin{aligned} I_0 &= \int Dz_3 \cosh \sqrt{\sqrt{2}\beta_c J z_3^2} \\ I_0 &= \exp \left[\frac{\sqrt{2}}{2} \beta_c J \right] \end{aligned} \quad (5.77)$$

Agora temos que integrar I_1 :

$$\begin{aligned} I_1 \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \int dz_3 z_3^2 \exp \left[-\frac{1}{2} z_3^2 + \sqrt{\sqrt{2}\beta_c J z_3^2} \right] + \exp \left[-\frac{1}{2} z_3^2 - \sqrt{\sqrt{2}\beta_c J z_3^2} \right] \\ I_1 = \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{2\pi}} \frac{d}{dB} \left(B e^{-B^2/A} \right) \end{aligned}$$

onde $A = \frac{1}{2}$ e $2B = \sqrt{\beta J \sqrt{2}}$ então:

$$I_1 = e^{B^2/A} (1 + 2B^2/A) = e^{\beta_c J \sqrt{2}/2} \left(1 + \sqrt{2}\beta_c J \right) \quad (5.78)$$

Substituímos I_1 da (5.78) e I_0 da (5.77) em (5.75):

$$2 \exp \left[\frac{\sqrt{2}}{2} \beta_c J \right] (1 + L) = \exp \left[\frac{\sqrt{2}}{2} \beta_c J \right] \left(1 + \sqrt{2}\beta_c J \right) + L \quad (5.79)$$

A equação acima determina β_c em ambos os modelos de dois e quatro estados. Então vamos determinar β_c no modelo de dois estados, para isso temos $L = 0$:

$$\begin{aligned} 2 \exp \left[\frac{\sqrt{2}}{2} \beta_c J \right] &= \exp \left[\frac{\sqrt{2}}{2} \beta_c J \right] \left(1 + \sqrt{2}\beta_c J \right) \\ 1 &= \sqrt{2}\beta_c J \\ \beta_c &= \frac{1}{J\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (5.80)$$

Agora, vamos determinar β_c no modelo de quatro estados, com $L = 1$:

$$4 \exp \left[\frac{\sqrt{2}}{2} \beta_c J \right] = \exp \left[\frac{\sqrt{2}}{2} \beta_c J \right] \left(1 + \sqrt{2} \beta_c J \right) + 1$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}J} \left(3 \exp \left[\frac{\sqrt{2}}{2} \beta_c J \right] - 1 \right) = \exp \left[\frac{\sqrt{2}}{2} \beta_c J \right] \beta_c$$

fazendo $\beta J = x$:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(3 - e^{-x/\sqrt{2}} \right) = x$$

aqui temos uma solução numérica onde $x=1,04$, portanto:

$$\beta_c = \frac{1,04}{J} \quad (5.81)$$

5.5.2 Cálculo detalhado na determinação do campo crítico Γ_c e uma relação $T_c(\Gamma)$ perto do campo crítico.

Agora devemos calcular o campo crítico Γ_c para $T_c = 0$, isto implica $\beta_c = \infty$, então de I_0 :

$$\begin{aligned} I_0 &= \int Dz_3 \cosh \sqrt{\sqrt{2} \beta_c J z_3^2 + \beta_c^2 \Gamma^2} \\ I_0 &= \int Dz_3 \cosh \left(\beta_c \Gamma \sqrt{\frac{\sqrt{2} \beta_c J z_3^2}{\beta^2 \Gamma^2} + 1} \right) \\ I_0 &\simeq \int Dz_3 \cosh \left(\beta_c \Gamma \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\sqrt{2} \beta_c J z_3^2}{\beta^2 \Gamma^2} \right) \right) \\ I_0 &\simeq \int Dz_3 \cosh \left(\beta_c \Gamma + \frac{\sqrt{2} \beta_c J z_3^2}{2 \beta \Gamma} \right) \\ I_0 &= \frac{e^{\beta_c \Gamma}}{2\sqrt{2\pi}} \int dz_3 e^{-\frac{1}{2} z_3^2 \left(1 - \frac{\sqrt{2} J}{\Gamma} \right)} + \frac{e^{-\beta_c \Gamma}}{2\sqrt{2\pi}} \int dz_3 e^{-\frac{1}{2} z_3^2 \left(1 - \frac{\sqrt{2} J}{\Gamma} \right)} \end{aligned}$$

despreza-se o último termo da equação acima, isto fica:

$$I_0 = \frac{e^{\beta \Gamma}}{2} \sqrt{\frac{1}{1 - \frac{\sqrt{2} J}{\Gamma}}} \quad (5.82)$$

Adotamos o mesmo procedimento para I_1 :

$$I_1 = e^{\beta\Gamma} \sqrt{\frac{1}{1 - \frac{\sqrt{2}J}{\Gamma}}} \frac{1}{1 - \frac{\sqrt{2}J}{\Gamma}}. \quad (5.83)$$

Introduzem-se (5.83) e (5.82) em (5.75):

$$2 = \frac{\frac{e^{\beta_c\Gamma}}{2} \sqrt{\frac{1}{1 - \frac{\sqrt{2}J}{\Gamma}}} \frac{1}{1 - \frac{\sqrt{2}J}{\Gamma}} + L}{\frac{e^{\beta_c\Gamma}}{2} \sqrt{\frac{1}{1 - \frac{\sqrt{2}J}{\Gamma}}} + L}. \quad (5.84)$$

Notando que L é desprezível comparado com $e^{\beta\Gamma}$ então:

$$2e^{\beta_c\Gamma} \sqrt{\frac{1}{1 - \frac{\sqrt{2}J}{\Gamma}}} \frac{1}{1 - \frac{\sqrt{2}J}{\Gamma}} = e^{\beta_c\Gamma} \sqrt{\frac{1}{1 - \frac{\sqrt{2}J}{\Gamma}}}$$

Simplificando-se e resolvendo-se a equação acima encontramos:

$$\Gamma_c = 2\sqrt{2}J \quad (5.85)$$

Agora nós queremos encontrar a relação $T_c \propto (\Gamma - \Gamma_c)$ limite $\beta \rightarrow \infty$, para isso precisamos expandir série de potência de mais uma ordem para I_0 , usando a série para $\sqrt{1+x}$:

$$\sqrt{1+x} \simeq 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2$$

através dessa receita podemos escrever:

$$I_0 = \int Dz_3 \cosh \beta_c \Gamma \left(1 + z_3^2 \frac{J\sqrt{2}}{2\beta_c \Gamma^2} - \frac{z_3^4}{4} \frac{J^2}{\beta_c^2 \Gamma^4} \right)$$

Mas o termo relevante é:

$$\begin{aligned} I_0 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz_3 \exp \left(-\frac{z_3^2}{2} \left(1 - \frac{J\sqrt{2}}{\Gamma} \right) - \frac{z_3^4 J^2}{4\beta_c \Gamma^3} \right) \\ I_0 &\simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz_3 e^{\left(-\frac{z_3^2}{2} \left(1 - \frac{J\sqrt{2}}{\Gamma} \right) \right)} \left(1 - \frac{z_3^4 J^2}{4\beta_c \Gamma^3} \right) \\ I_0 &= e^{\beta_c \Gamma} \sqrt{\frac{1}{1 - \frac{J\sqrt{2}}{\Gamma}}} \left(1 - \frac{3J^2}{4\beta_c \Gamma^3 \left(1 - \frac{\sqrt{2}J}{\Gamma} \right)^2} \right) \end{aligned} \quad (5.86)$$

Fazendo a mesma aproximação para I_1 :

$$I_1 = e^{\beta_c \Gamma} \frac{1}{\left(1 - \frac{J\sqrt{2}}{\Gamma}\right)^{3/2}} \left(1 - \frac{15J^2}{4\beta_c \Gamma^3 \left(1 - \frac{\sqrt{2}J}{\Gamma}\right)^2}\right) \quad (5.87)$$

Usando (5.87) (5.86) para escrever (5.75):

$$\begin{aligned} \frac{2e^{\beta\Gamma}}{\sqrt{1 - \frac{\sqrt{2}J}{\Gamma}}} \left(1 - \frac{3J^2}{4\beta_c \Gamma^3 \left(1 - \frac{J\sqrt{2}}{\Gamma}\right)^2}\right) &= \frac{e^{\beta\Gamma}}{\left(1 - \frac{J\sqrt{2}}{\Gamma}\right)^{1/2}} \left(\frac{1}{\left(1 - \frac{J\sqrt{2}}{\Gamma}\right)} - \frac{15J^2}{4\beta_c \Gamma^3 \left(1 - \frac{J\sqrt{2}}{\Gamma}\right)^3}\right) \\ 2 - \frac{3J^2}{2\beta_c \Gamma^3 \left(1 - \frac{J\sqrt{2}}{\Gamma}\right)^2} &= \left(\frac{1}{\left(1 - \frac{J\sqrt{2}}{\Gamma}\right)} - \frac{15J^2}{4\beta_c \Gamma^3 \left(1 - \frac{J\sqrt{2}}{\Gamma}\right)^3}\right) \\ 2 - \frac{3J^2}{2\beta_c \Gamma^3 \left(1 - \frac{J\sqrt{2}}{\Gamma}\right)^2} - \frac{1}{\left(1 - \frac{J\sqrt{2}}{\Gamma}\right)} + \frac{15J^2}{4\beta_c \Gamma^3 \left(1 - \frac{J\sqrt{2}}{\Gamma}\right)^3} &= 0 \\ 2 - \frac{1}{\left(1 - \frac{J\sqrt{2}}{\Gamma}\right)} - \frac{3J^2}{2\beta_c \Gamma^3 \left(1 - \frac{J\sqrt{2}}{\Gamma}\right)^2} \left[1 - \frac{5}{2\left(1 - \frac{J\sqrt{2}}{\Gamma}\right)}\right] &= 0 \quad (5.88) \end{aligned}$$

Agora precisamos expressar isso em termos de campo crítico:

$$1 - \frac{\sqrt{2}J}{\Gamma} = \frac{\Gamma - \sqrt{2}J}{\Gamma} = \frac{\Gamma - \Gamma_c + \Gamma_c - \sqrt{2}J}{\Gamma} = \frac{\tau J\sqrt{2} + J\sqrt{2}}{2\sqrt{2}J} = \frac{\tau + 1}{2} \quad (5.89)$$

introduz-se (5.89) em (5.88) encontraremos:

$$T_c \approx \frac{2}{3} (\Gamma_c - \Gamma) \quad (5.90)$$

5.6 Apêndice F

5.6.1 Cálculo da média da função de partição.

A média da função de partição é dada por:

$$\langle Z_{2lS}^n \rangle_{J_{ij}} = \int \prod_{(i,j)} dJ_{ij} P(J_{ij}) Z_{2lS}^n$$

Então,

$$\begin{aligned} \langle Z_{2lS}^n \rangle_{J_{ij}} &= \prod_{i=1}^N \prod_{k=1}^p \prod_{\alpha=0}^n \int D[\psi_{i,k,\alpha}^*(\omega), \psi_{i,k,\alpha}(\omega)] \\ &\int_0^{2\pi} \frac{dx_{i,k,\alpha} e^{-\xi_{i,k,\alpha} + A\Gamma}}{2\pi} \int \prod_{(i,j)} dJ_{ij} P(J_{ij}) e^{2D_{i,j,k,\alpha}(J_{ij})}. \end{aligned}$$

Calculando-se a integral, temos:

$$\begin{aligned} \langle Z_{2lS}^n \rangle_{J_{ij}} &= \prod_{i=1}^N \prod_{k=1}^p \prod_{\alpha=0}^n \int D[\psi_{i,k,\alpha}^*(\omega), \psi_{i,k,\alpha}(\omega)] \\ &\int_0^{2\pi} \frac{dx_{i,k,\alpha}}{2\pi} \exp \left[-\xi_{i,k,\alpha} + B_{i,k,\alpha} + \frac{16\beta^2 J^2}{N} \sum_{i,j} \sum_{(\alpha\beta)} \sum_{k,k'} S_{i,k,\alpha}^z S_{j,k,\alpha}^z S_{i,k',\beta}^z S_{j,k',\beta}^z \right]. \end{aligned} \quad (5.91)$$

Agora separa-se as somas:

$$I = \sum_{k,k'} \sum_{i,j} \sum_{(\alpha\beta)} S_{i,k,\alpha}^z S_{j,k,\alpha}^z S_{i,k',\beta}^z S_{j,k',\beta}^z = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left\{ \sum_{k \neq k'} \sum_{\alpha=\beta} \dots + \sum_{k=k'} \sum_{\alpha \neq \beta} \dots + \sum_{k=k'} \sum_{\alpha=\beta} \dots \sum_{k \neq k'} \sum_{\alpha \neq \beta} \dots \right\}$$

portanto,

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{2} \left\{ \sum_{\alpha} \sum_{k \neq k'} \left(\sum_i S_{i,k,\alpha}^z S_{i,k',\alpha}^z \right)^2 + \sum_k \sum_{\alpha \neq \beta} \left(\sum_i S_{i,k,\alpha}^z S_{i,k,\beta}^z \right)^2 + \sum_{k \neq k'} \sum_{\alpha \neq \beta} \left(\sum_i S_{i,k,\alpha}^z S_{i,k',\beta}^z \right)^2 \right\} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_k \sum_{\alpha} \left(\sum_i (S_{i,k,\alpha}^z)^2 \right)^2 \end{aligned}$$

Introduzimos I na equação (5.91), teremos $\langle Z_{2lS}^n \rangle_{J_{ij}}$ escrito na forma quadrática. É necessário linearizar estas expressões: $\left(\sum_i S_{i,k,\alpha}^z S_{i,k',\alpha}^z \right)^2$,

$\left(\sum_i S_{i,k,\alpha}^z S_{i,k,\beta}^z\right)^2$, $\left(\sum_i S_{i,k,\alpha}^z S_{i,k',\beta}^z\right)^2$ e $\left(\sum_i (S_{i,k,\alpha}^z)^2\right)^2$ usando integral Gaussiana (1.9) com a variável para linearização $q_{\alpha,k,k'}$, $r_{\alpha,\beta,k}$, $r_{\alpha,\beta,k,k'}$ e $X_{\alpha,k}$ respectivamente.

Portanto escrevemos $\langle Z_{2lS}^n \rangle_{J_{ij}}$ na forma linear:

$$\langle Z_{2lS}^n \rangle_{J_{ij}} = \prod_{i=1}^N \prod_{k=1}^p \prod_{\alpha=0}^n \int D [\psi_{i,k,\alpha}^*(\omega), \psi_{i,k,\alpha}(\omega)] \int_0^{2\pi} \frac{dx_{i,k,\alpha}}{2\pi} \exp[-\xi_{i,k,\alpha} + A_\Gamma] \times$$

$$\int \prod_{\alpha,\beta,k,k'} dq_{\alpha,k,k'} dr_{\alpha,\beta,k} dr_{\alpha,\beta,k,k'} dX_{\alpha,k} e^{\left[-\frac{\beta^2 J^2 N}{2} \sum_{\alpha,\beta,k,k'} \left\{ q_{\alpha,k,k'}^2 + r_{\alpha,\beta,k}^2 + r_{\alpha,\beta,k,k'}^2 + X_{\alpha,k}^2 \right\} \right]} \times$$

$$e^{4\beta^2 J^2 \sum_{\alpha,\beta,k,k'} \sum \left\{ S_{i,\alpha,k}^z S_{i,\alpha,k}^z q_{\alpha,k,k'} + S_{i,\alpha,k}^z S_{i,\beta,k}^z r_{\alpha,\beta,k} + S_{i,\alpha,k}^z S_{i,\beta,k}^z r_{\alpha,\beta,k,k'} + (S_{i,\alpha,k}^z)^2 X_{\alpha,k} \right\}}$$

Mas $q_{\alpha,k,k'}$, $r_{\alpha,\beta,k}$, $r_{\alpha,\beta,k,k'}$, $X_{\alpha,k}$ não dependem de $\psi_{i,k,\alpha}^*(\omega)$ e $\psi_{i,k,\alpha}(\omega)$, portanto podemos escrever na forma separada:

$$\langle Z_{2lS}^n \rangle_{J_{ij}} = \int \prod_{\alpha,\beta,k,k'} dq_{\alpha,k,k'} dr_{\alpha,\beta,k} dr_{\alpha,\beta,k,k'} dX_{\alpha,k} \times$$

$$\exp \left[-\frac{\beta^2 J^2 N}{2} \sum_{\alpha,\beta,k,k'} \left\{ q_{\alpha,k,k'}^2 + r_{\alpha,\beta,k}^2 + r_{\alpha,\beta,k,k'}^2 + X_{\alpha,k}^2 \right\} + \sum_i \ln \Lambda_i \right]$$

com

$$\Lambda_i = \prod_{k=1}^p \prod_{\alpha=0}^n \int D [\psi_{i,k,\alpha}^*(\omega), \psi_{i,k,\alpha}(\omega)] \int_0^{2\pi} \frac{dx_{i,k,\alpha}}{2\pi} \exp(-\xi_{i,k,\alpha} + A_\Gamma) \times$$

$$e^{4\beta^2 J^2 \sum_{\alpha,\beta,k,k'} \sum \left\{ S_{i,\alpha,k}^z S_{i,\alpha,k}^z q_{\alpha,k,k'} + S_{i,\alpha,k}^z S_{i,\beta,k}^z r_{\alpha,\beta,k} + S_{i,\alpha,k}^z S_{i,\beta,k}^z r_{\alpha,\beta,k,k'} + (S_{i,\alpha,k}^z)^2 X_{\alpha,k} \right\}}$$

mas a integral funcional independe de i , isto é, todos Λ_i possuem o mesmo valor, portanto:

$$\langle Z_{2IS}^n \rangle_{J_{ij}} = \int \prod_{\alpha,\beta,k,k'} dq_{\alpha,k,k'} dr_{\alpha,\beta,k} dr_{\alpha,\beta,k,k'} dX_{\alpha,k} \times \quad (5.92)$$

$$\exp \left[-\frac{\beta^2 J^2 N}{2} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{k,k'} \left\{ q_{\alpha,k,k'}^2 + r_{\alpha,\beta,k}^2 + r_{\alpha,\beta,k,k'}^2 + X_{\alpha,k}^2 \right\} + N \ln \Lambda \right]$$

onde:

$$\Lambda = \prod_{k=1}^p \prod_{\alpha=0}^n \int D [\psi_{k,\alpha}^*(\omega), \psi_{k,\alpha}(\omega)] \int_0^{2\pi} \frac{dx_{k,\alpha}}{2\pi} \exp [-\xi_{k,\alpha} + A_\Gamma] \times$$

$$\exp \left[4\beta^2 J^2 \sum_{\alpha,\beta} \sum_{k,k'} \left\{ S_{\alpha,k}^z S_{\alpha,k'}^z q_{\alpha,k,k'} + S_{\alpha,k}^z S_{\beta,k}^z r_{\alpha,\beta,k} + S_{\alpha,k}^z S_{\beta,k'}^z r_{\alpha,\beta,k,k'} + (S_{\alpha,k}^z)^2 X_{\alpha,k} \right\} \right] \quad (5.93)$$

5.6.2 Cálculo detalhado da introdução das soluções do ponto de sela na média da função de partição.

Introduzimos (3.16)-(3.13) em (3.12) e obtemos um resultado aproximado da integral:

$$\langle Z_{2IS}^m \rangle_{J_{ij}} \simeq \exp \left[-\frac{N\beta^2 J^2}{2} \left\{ \sum_{\alpha,k,k'} q^2 + \sum_{\alpha,\beta,k} r^2 + \sum_{\alpha,\beta,k,k'} r^2 + \sum_{\alpha,k} (\bar{\chi} + q)^2 \right\} + N \ln \Lambda \right] \quad (5.94)$$

onde:

$$\Lambda = \prod_{k=1}^p \prod_{\alpha=0}^n \int D [\psi_{k,\alpha}^*(\omega), \psi_{k,\alpha}(\omega)] \int_0^{2\pi} \frac{dx_{k,\alpha}}{2\pi} \exp [-\xi_{k,\alpha} + A_\Gamma] \times$$

$$\exp \left[4\beta^2 J^2 \sum_{\alpha,\beta} \sum_{k,k'} \left\{ S_{\alpha,k}^z S_{\alpha,k'}^z q + \left(S_{\alpha,k}^z S_{\beta,k}^z + S_{\alpha,k}^z S_{\beta,k'}^z \right) r + (S_{\alpha,k}^z)^2 (\bar{\chi} + q) \right\} \right]$$

e lembrando que

$$\sum_{\alpha,k,k'} S_{\alpha,k}^z S_{\alpha,k'}^z = \sum_{\alpha} \left(\sum_k S_{\alpha,k}^z \right)^2 - \sum_{\alpha,k} (S_{\alpha,k}^z)^2, \quad (5.95)$$

$$\sum_{\alpha,\beta,k} S_{\alpha,k}^z S_{\beta,k}^z = \sum_k \left(\sum_{\alpha} S_{\alpha,k}^z \right)^2 - \sum_{\alpha,k} (S_{\alpha,k}^z)^2, \quad (5.96)$$

e

$$\sum_{\alpha,\beta,k,k'} S_{\alpha,k}^z S_{\beta,k'}^z = \left(\sum_{\alpha,k} S_{\alpha,k}^z \right)^2 - \sum_{\alpha} \left(\sum_k S_{\alpha,k}^z \right)^2 - \sum_k \left(\sum_{\alpha} S_{\alpha,k}^z \right)^2 + \sum_{\alpha,k} (S_{\alpha,k}^z)^2 \quad (5.97)$$

Introduz as equações (5.97)-(5.95) em (5.94):

$$\langle Z_{2lS}^m \rangle_{J_{ij}} \simeq e^{-\frac{Nmp\beta^2 J^2}{2} \{ (p-1)q^2 + (m-1)r^2 + (m-1)(p-1)r^2 + (\bar{\chi}+q)^2 \}} + N \ln \Lambda$$

onde

$$\Lambda = \prod_{k=1}^p \prod_{\alpha=0}^n \int D [\psi_{k,\alpha}^*(\omega), \psi_{k,\alpha}(\omega)] \int_0^{2\pi} \frac{dx_{k,\alpha}}{2\pi} \exp [-\xi_{k,\alpha} + B_{k,\alpha}] \times \\ \exp \left[4\beta^2 J^2 \left\{ (q-r) \sum_{\alpha} \left(\sum_k S_{\alpha,k}^z \right)^2 + r \left(\sum_{\alpha,k} S_{\alpha,k}^z \right)^2 + (\bar{\chi}-q) \sum_{\alpha,k} (S_{\alpha,k}^z)^2 \right\} \right].$$

Linearizamos a expressão acima com auxílio de variáveis de campo x , y_{α} e $z_{\alpha,k}$:

$$\langle Z_{2lS}^m \rangle_{J_{ij}} \simeq \exp \left[-\frac{Nmp\beta^2 J^2}{2} \{ (p-1)q^2 + (m-1)r^2 + (m-1)(p-1)r^2 + X^2 \} + N \ln \Lambda \right] \quad (5.98)$$

$$\Lambda = \prod_{k=1}^p \prod_{\alpha=0}^n \int D [\psi_{k,\alpha}^*(\omega), \psi_{k,\alpha}(\omega)] \int_0^{2\pi} \frac{dx_{k,\alpha}}{2\pi} \exp [-\xi_{k,\alpha} + A_{\Gamma}] \times \\ \int Dx \int Dy_{\alpha} \int Dz_{\alpha,k} \exp \left[2\beta J \sum_{\alpha} \sum_k \left\{ \sqrt{2(q-r)} y_{\alpha} + \sqrt{2r} x + \sqrt{2\bar{\chi}} z_{\alpha,k} \right\} S_{\alpha,k}^z \right]$$

Mas procuramos escrever:

$$\Lambda = \int Dx \int Dy_{\alpha} \int Dz_{\alpha,k} \prod_{k=1}^p \prod_{\alpha=0}^n \int_0^{2\pi} \frac{dx_{k,\alpha}}{2\pi} \int D [\underline{\psi}_{k,\alpha}^{\top}(\omega), \underline{\psi}_{k,\alpha}(\omega)] e^{\underline{\psi}_{k,\alpha}^{\top}(\omega) \underline{\mathbf{G}}_{k,\alpha}^{-1}(\omega) \underline{\psi}_{k,\alpha}(\omega)} \quad (5.99)$$

onde $\underline{\psi}_{k,\alpha}^\top(\omega)$ e $\underline{\psi}_{k,\alpha}(\omega)$ são definidos na equação (5.14) e $\underline{\mathbf{G}}_{k,\alpha}^{-1}(\omega)$ é a inversa da função de Green:

$$\underline{\mathbf{G}}_{\alpha,k}^{-1}(\omega) = h_{\alpha,k} \underline{\boldsymbol{\sigma}}^z + \lambda_{\alpha,k}(\omega) \underline{\mathbf{I}} + \beta \Gamma \underline{\boldsymbol{\sigma}}^x \quad (5.100)$$

com

$$\lambda_{\alpha,k}(\omega) = i\beta\omega + \xi_{\alpha,k} \quad (5.101)$$

onde as matrizes de Pauli $\underline{\boldsymbol{\sigma}}^z$ e $\underline{\boldsymbol{\sigma}}^x$ e a matriz $\underline{\mathbf{I}}$ são definidas em (5.15). Agora calculamos I com auxílio do resultado do apêndice C na equação (5.31):

$$I = \prod_{\alpha=0}^n \int D \left[\underline{\psi}_{k,\alpha}^\top(\omega), \underline{\psi}_{k,\alpha}(\omega) \right] e^{\underline{\psi}_{k,\alpha}^\top(\omega) \underline{\mathbf{G}}_{k,\alpha}^{-1}(\omega) \underline{\psi}_{k,\alpha}(\omega)} = \prod_{\alpha=0}^n \left\{ 1 + e^{2\xi_{i\alpha}} + 2e^{\xi_{i\alpha}} \cosh \sqrt{\Delta_{i\alpha}} \right\} \quad (5.102)$$

introduzimos o resultado (5.102) em (5.99) e (5.98) e obtemos o seguinte resultado:

$$\langle Z_{2lS}^m \rangle_{J_{ij}} = e^{-\frac{\beta^2 J^2 N m p}{2} \{ (p-1)q^2 - r^2 + (\chi+q)^2 \} + N m \int D x \ln \int D y [\int D z (1 + (-1)^l + 2 \cosh \sqrt{\Xi})]}$$

5.7 Apêndice G

5.7.1 Cálculo das médias.

Para calcular as médias, devemos seguir a definição:

$$\langle S_{j\alpha}^z(0) \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\partial \langle Z^n \rangle}{\partial H_i^\alpha} \Big|_{H_i^\alpha=0} \quad (5.103)$$

Então usamos (2.2) e (2.8) para escrever de uma forma conveniente:

$$\langle Z^n \rangle_{J_{ij}} \simeq e^{-\frac{\beta^2 J^2 N n}{2} \left[(\bar{\chi}+q)^2 - (\delta+q)^2 + m(\delta^2 + 2\delta q) + \sum_i^N \ln \Lambda_i(q, \delta, \bar{\chi}) \right]}$$

$$\Lambda_i(q, \delta, \bar{\chi}) = \prod_{\alpha=0}^n \int D z_1 \prod_{K=1}^{n/m} \int D z_{2,K} \int D z_{3,\alpha} \int_0^{2\pi} \frac{dx_{i,\alpha,K}}{2\pi} \left\{ 1 + e^{2\xi_{i,\alpha,K}} + 2e^{\xi_{i,\alpha,K}} \cosh \sqrt{\Delta_{i,\alpha,K}} \right\}$$

mas podemos escrever na forma mais compacta:

$$\langle Z_{2lS}^n \rangle = \mathfrak{F} \prod_{j=1}^N \int D z_1 \prod_{K=1}^{n/m} \int D z_{2,K} \prod_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} \int D z_{3,\alpha} \left(1 + e^{2\xi_{j,\alpha}} + 2e^{\xi_{j,\alpha}} \cosh \sqrt{\Delta_{j,\alpha}(H_j^\alpha)} \right) \Big|_{H_i^\alpha=0} \quad (5.104)$$

onde $\Delta_{j,\alpha}(H_j^\alpha) = \Delta_{j,\alpha} + 2H_j^\alpha$ e

$$\begin{aligned} \mathfrak{F} &= \mathfrak{F}(q, \delta, \bar{\chi}) = e^{-\frac{\beta^2 J^2 N n}{2} [(\bar{\chi}+q)^2 - (\delta+q)^2 + m(\delta^2 + 2\delta q)]} \\ &= \frac{\partial \langle Z^n \rangle}{\partial H_i^\alpha} = \\ &= F \prod_{j=1 \neq i}^{N-1} \int D z_1 \prod_{K=1}^{n/m} \int D z_{2,K} \prod_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} \int D z_{3,\alpha} \left(1 + e^{2\xi_{j,\alpha}} + 2e^{\xi_{j,\alpha}} \cosh \sqrt{\Delta_{j,\alpha}(H_j^\alpha)} \right) \times \\ &= \int D z_1 \prod_{K \neq K'=1}^{n/m-1} \int D z_{2,K} \prod_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} \int D z_{3,\alpha} \left(1 + e^{2\xi_{j,\alpha}} + 2e^{\xi_{j,\alpha}} \cosh \sqrt{\Delta_{j,\alpha}(H_j^\alpha)} \right) \times \\ &= \int D z_{2,K} \prod_{\alpha=(K-1)m+1 \neq \alpha'}^{Km-1} \int D z_{3,\alpha} \left(1 + e^{2\xi_{j,\alpha}} + 2e^{\xi_{j,\alpha}} \cosh \sqrt{\Delta_{j,\alpha}(H_j^\alpha)} \right) \\ &= \int D z_{3,\alpha} \left(2e^{\xi_{i,\alpha'}} \sinh \sqrt{\Delta_{i,\alpha',K'}}(H_i^{\alpha'}) \frac{h_{i\alpha'K'}}{\sqrt{\Delta_{i\alpha'K'}}} \right) \Big|_{H_i^{\alpha'}=0} \end{aligned}$$

A integral independe de k, α', α e j

$$\begin{aligned} &= \frac{\partial \langle Z^n \rangle}{\partial H_i^\alpha} \Big|_{H_i^\alpha=0} = \\ &= F \left[\int D z_1 \left(\int D z_2 \left(\int D z_3 \left(1 + e^{2\xi} + 2e^\xi \cosh \sqrt{\Delta} \right) \right)^m \right)^{n/m} \times \right. \\ &= \int D z_1 \left(\int D z_{2,K} \left(\int D z_3 \left(1 + e^{2\xi} + 2e^\xi \cosh \sqrt{\Delta} \right) \right)^m \right)^{n/m-1} \times \\ &= \left. \int D z_{2,k} \left(\int D z_{3,K} \left(1 + e^{2\xi} + 2e^\xi \cosh \sqrt{\Delta} \right) \right)^{m-1} \int D z_3 \left(2e^\xi \sinh \sqrt{\Delta} \frac{h}{\sqrt{\Delta}} \right) \right]^{N-1} \end{aligned}$$

Agora, tomamos o limite $n \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} &= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\partial \langle Z^n \rangle}{\partial H_i^\alpha} \Big|_{H_i^\alpha=0} = \\ &= \lim_{n \rightarrow 0} F \left[\int D z_1 \left(\int D z_2 \left(\int D z_3 \left(1 + e^{2\xi} + 2e^\xi \cosh \sqrt{\Delta} \right) \right)^m \right)^{n/m} \times \right. \\ &= \left. \int D z_1 \left(\int D z_{2,k} \left(\int D z_3 \left(1 + e^{2\xi} + 2e^\xi \cosh \sqrt{\Delta} \right) \right)^m \right)^{n/m-1} \times \right. \end{aligned}$$

$$\int Dz_{2,k} \left(\int Dz_{3,\alpha} \left(1 + e^{2\xi} + 2e^\xi \cosh \sqrt{\Delta} \right) \right)^{m-1} \int Dz_3 \left(2e^\xi \sinh \sqrt{\Delta} \frac{h}{\sqrt{\Delta}} \right)]^{N-1}$$

e fazemos a seguinte aproximação $x^{n/m} \simeq 1 + \frac{n}{m} \ln x$ e $F(q, \delta, \bar{\chi}) = 1$ e para compactar as integrais acima usamos a seguinte notação:

$$\begin{aligned} \Phi_0 &= \int Dz_3 \left(1 + e^{2\xi} + 2e^\xi \cosh \sqrt{\Delta} \right) \\ \Phi_1 &= \int Dz_3 \left(2e^\xi \sinh \sqrt{\Delta} \frac{h}{\sqrt{\Delta}} \right) \end{aligned}$$

então:

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\partial \langle Z^n \rangle}{\partial H_i^\alpha} &= \lim_{n \rightarrow 0} \left(\int Dz_1 \left(1 + \frac{n}{m} \int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^m \right) \right)^{N-1} \times \\ &\quad \int Dz_1 \frac{\left(1 + \frac{n}{m} \int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^m \right) \int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^{m-1} R_1}{\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^m} \end{aligned}$$

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{\partial \langle Z^n \rangle}{\partial H_i^\alpha} = \int Dz_1 \frac{\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^{m-1} \Phi_1}{\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^m}$$

e inserindo a equação acima na definição (5.103), temos:

$$\langle S_j^\alpha(0) \rangle = \int Dz_1 \frac{\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^{m-1} \Phi_1}{\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^m} \quad (5.105)$$

Tendo uma idéia de como se calcula a média $\langle S_{j,\alpha}^z(0) \rangle$. A seguir, vamos calcular a média de $\langle S_{j,\alpha}^z(0) S_{j,\beta}^z(0) S_{j,\gamma}^z(0) S_{j,\delta}^z(0) \rangle$ seguindo a definição:

$$\langle S_{j,\alpha}^z(0) S_{j,\beta}^z(0) S_{j,\gamma}^z(0) S_{j,\delta}^z(0) \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\partial^4 \langle Z^n \rangle}{\partial H_i^\alpha \partial H_i^\beta \partial H_i^\gamma \partial H_i^\delta} \Big|_{H_i^\alpha = H_i^{\beta'} = H_i^{\gamma'} = H_i^{\delta'} = 0} \quad (5.106)$$

Então,

$$\frac{\partial^4 \langle Z^n \rangle}{\partial H_i^\alpha \partial H_i^\beta \partial H_i^\gamma \partial H_i^\delta} \Big|_{H_i^\alpha = H_i^{\beta'} = H_i^{\gamma'} = H_i^{\delta'} = 0}$$

$$F(q, \delta, \bar{\chi}) \times$$

$$\begin{aligned}
& \prod_{j=1 \neq i \neq p}^{N-4} \int Dz_1 \prod_{K=1}^{n/m} \int Dz_{2,K} \prod_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} \int Dz_{3,\alpha} \left(1 + e^{2\xi_{j,\alpha}} + 2e^{\xi_{j,\alpha}} \cosh \sqrt{\Delta_{j,\alpha}(H_j^\alpha)} \right) \times \\
& \int Dz_1 \prod_{K=1}^{n/m-1} \int Dz_{2,k} \prod_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} \int Dz_{3,\alpha} \left(1 + e^{2\xi_{j,\alpha}} + 2e^{\xi_{j,\alpha}} \cosh \sqrt{\Delta_{j,\alpha}(H_j^\alpha)} \right) \times \\
& \int Dz_{2,k} \prod_{\alpha=(K-1)m+1 \neq \alpha'}^{Km-1} \int Dz_{3,\alpha} \left(1 + e^{2\xi_{j,\alpha}} + 2e^{\xi_{j,\alpha}} \cosh \sqrt{\Delta_{j,\alpha}(H_j^\alpha)} \right) \times \\
& \int Dz_{3,\alpha'} \left(2e^{\xi_{i,\alpha'}} \sinh \sqrt{\Delta_{i,\alpha',K'}(H_i^{\alpha'})} \frac{h_{i\alpha'K'}}{\sqrt{\Delta_{i\alpha'K'}}} \right) \Big|_{H_i^{\alpha'}=0} \times \\
& \int Dz_1 \prod_{K \neq K'=1}^{n/m-1} \int Dz_{2,k} \prod_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} \int Dz_{3,\alpha} \left(1 + e^{2\xi_{j,\alpha}} + 2e^{\xi_{j,\alpha}} \cosh \sqrt{\Delta_{j,\alpha}(H_j^\alpha)} \right) \times \\
& \int Dz_{2,k'} \prod_{\alpha=(K'-1)m+1 \neq \beta'}^{K'm-1} \int Dz_{3,\alpha} \left(1 + e^{2\xi_{j,\alpha}} + 2e^{\xi_{j,\alpha}} \cosh \sqrt{\Delta_{j,\alpha}(H_j^\alpha)} \right) \times \\
& \int Dz_{3,\beta'} \left(2e^{\xi_{i\beta'}} \sinh \sqrt{\Delta_{i\beta'K'}(H_i^{\beta'})} \frac{h_{i\beta'K'}}{\sqrt{\Delta_{i\beta'K'}}} \right) \Big|_{H_i^{\beta'}=0} \times \\
& \int Dz_1 \prod_{K \neq K'=1}^{n/m-1} \int Dz_{2,K} \prod_{\alpha=(K-1)m+1}^{km} \int Dz_{3,\alpha} \left(1 + e^{2\xi_{j,\alpha}} + 2e^{\xi_{j,\alpha}} \cosh \sqrt{\Delta_{j,\alpha}(H_j^\alpha)} \right) \times \\
& \int Dz_{2,k'} \prod_{\alpha=(K'-1)m+1 \neq \gamma'}^{K'm-1} \int Dz_{3,\alpha} \left(1 + e^{2\xi_{j,\alpha}} + 2e^{\xi_{j,\alpha}} \cosh \sqrt{\Delta_{j,\alpha}(H_j^\alpha)} \right) \times \\
& \int Dz_{3,\beta'} \left(2e^{\xi_{i\gamma'}} \sinh \sqrt{\Delta_{i\gamma'k'}(H_i^{\gamma'})} \frac{h_{i\gamma'k'}}{\sqrt{\Delta_{i\gamma'k'}}} \right) \Big|_{H_i^{\gamma'}=0} \times \\
& \int Dz_1 \prod_{K \neq K'=1}^{n/m-1} \int Dz_{2,K} \prod_{\alpha=(K-1)m+1}^{Km} \int Dz_{3,\alpha} \left(1 + e^{2\xi_{j,\alpha}} + 2e^{\xi_{j,\alpha}} \cosh \sqrt{\Delta_{j,\alpha}(H_j^\alpha)} \right) \times \\
& \int Dz_{2,k'} \prod_{\alpha=(K'-1)m+1 \neq \delta'}^{K'm-1} \int Dz_{3,\alpha} \left(1 + e^{2\xi_{j,\alpha}} + 2e^{\xi_{j,\alpha}} \cosh \sqrt{\Delta_{j,\alpha}(H_j^\alpha)} \right) \times \\
& \int Dz_{3,\beta'} \left(2e^{\xi_{i\delta'}} \sinh \sqrt{\Delta_{i\delta'K'}(H_i^{\delta'})} \frac{h_{i\delta'K'}}{\sqrt{\Delta_{i\delta'K'}}} \right) \Big|_{H_i^{\delta'}=0}
\end{aligned} \tag{5.107}$$

Introduz-se esta equação (5.107) em (5.106) obtemos o seguinte resultado:

$$\langle S_j^\alpha(0) S_j^\beta(0) S_j^\gamma(0) S_j^\delta(0) \rangle = \frac{1}{4} \int Dz_1 \left(\frac{\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^{m-2} \Phi_1}{\Phi_{0,2lS}^m} \right)^4 \quad (5.108)$$

A mesma coisa para calcular as médias:

$$\left\langle \left[S_j^\alpha(0) S_j^\beta(0) \right]^2 \right\rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\partial^4 \langle Z^n \rangle}{\partial^2 H_i^\alpha \partial^2 H_i^\beta} \Big|_{H_i^\alpha = H_i^{\beta'} = 0} = \frac{1}{16} \int Dz_1 \left(\frac{\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^{m-1} \Phi_2}{\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^m} \right)^2, \quad (5.109)$$

$$\begin{aligned} \left\langle \left[S_{j,\alpha}^z(0) \right]^2 S_{j,\gamma}^z(0) S_{j,\delta}^z(0) \right\rangle &= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\partial^4 \langle Z^n \rangle}{\partial^2 H_i^\alpha \partial H_i^\gamma \partial H_i^\delta} \Big|_{H_i^\alpha = H_i^{\gamma'} = H_i^{\delta'} = 0} = \\ &= \frac{1}{16} \int Dz_1 \frac{\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^{m-1} \Phi_2 \left(\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^{m-1} \Phi_1 \right)^2}{\left(\int Dz_2 \Phi_{0,2lS}^m \right)^3} \quad (5.110) \end{aligned}$$

Referências Bibliográficas

- [1] SHERRINGTON, D.; KIRKPATRICK, S. Infinite-ranged models of spin glasses. *Phys. Rev. B*, New York, v. 17, n. 11, p. 4384-4403, June 1978.
- [2] PARISI, G. Toward a mean field theory for spin glasses. *Phys. Lett. A*, Amsterdam, v. 73, n. 3, p. 203-205, Sept. 1979.
- [3] THEUMANN, A.; SCHMIDT, A. A.; MAGALHÃES S. G. The Ising spin glass in a tranverse field revisited. Results of two fermionic models. *Physica A*, Amsterdam, v. 311, n. 314, p. 498-506, Jan. 2002.
- [4] GOLDSHMIDT, Y. Y.; PIK Y. L. Ising spin glass in a tranverse field: replica-symmetry-breaking solution. *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 64, n. 21, p. 2467-2470, May 1990.
- [5] DOMINICIS, C. de; GAREL, T. A solution of Sherrington Kirkpatrick model for Ising spin glass with physically acceptable entropy. *J. Phys.Lett.* Les Ulis, v. 40, n. 22, p. L575-L578, nov. 1979.
- [6] CANNELLA, V.; MYDOSH, J. A. Magnetic ordering in gold-iron alloys. *Phys. Rev. B*, New York, v. 6, n. 11, p. 4220-4236, Dec. 1972.
- [7] EDWARDS, S. F. ; ANDERSON, P. W. Theory of spin glasses *J. Phys. F: Metal Phys.*, Bristol, v. 5, n. 5, p. 965-974, May 1975.
- [8] ALMEIDA, J. R. L.; THOULESS, D. J. Solvable model of a spin glass. *J. Phys. A: Math. Gen.*, Bristol, v. 11, n. 5, p. 983-990, May 1978.
- [9] MOORE, M. A.; BRAY, A. J. Broken replica symmetry and metaestable states in spin glasses, *J. Phys. C: Solid St. Phy.* London, v. 13, n. 31, p. L907-L912, Nov. 1980.
- [10] BLANDIN, A. Theories versus experiments in the spin glass systems. *J. Phys. Colloq.* Les Ulis, v. 39, n. C-6, p. 1499-1516, août 1978.

- [11] BLANDIN, A.; GABAY, M.; GAREL, T. On the mean-field theory of spin glasses. *J.Phys. C: Solid St. Phys.*, Bristol, v. 13, n. 3, p. 403-418, Jan. 1979.
- [12] PARISI, G. A sequence of approximated solutions to the S-K model for spin glasses. *J. Phys. A: Math. Gen.*, Bristol, v. 13, n. 4, p. L115-L121, Apr. 1980.
- PARISI, G. The order parameter for spin glasses: A function on the interval 0-1. *J. Phys. A: Math Gen.*, Bristol, v. 13, n. 3, p. 1101-1112, Mar. 1980.
- PARISI, G. Magnetic properties of the spin glasses in a new mean field theory. *J. Phys. A: Math. Gen.* Bristol, v. 13, n. 5, p. 1887-1895, May 1980.
- [13] BRAY, A. J.; MOORE, M. A. Replica theory of quantum spin glass. *J. Phys. C: Solid St. Phys.*, Bristol, v. 13, n. 24, p. L655-L680, Aug. 1980.
- [14] THEUMANN, A.; GUSMÃO, M. V. Quantum Ising spin glass. *Phys. Lett. A*, Amsterdam, v. 105, n. 6, p. 311-314, Oct. 1984.
- [15] NEGELE, J. W.; ORLAND, H. *Quantum many-particle systems*. Reading: Perseus Books, 1998.
- [16] WENHAO, W.; ELLMAN, B.; ROSENBAUM, T. F. From classical to quantum glass. *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 67, n. 15, p. 2076-2079, Oct. 1991.
- [17] WU, W.; BITKO, D.; ROSENBAUM T. F.; AEPPLI, G. Quenching of the nonlinear susceptibility at a T=0 spin glass Transition. *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 71, n. 12, p. 1919-1922, Sept. 1993.
- [18] ISHII, H.; YAMAMOTO, T. Effect of a transverse field on the spin glass freezing in the Sherrington-Kirkpatrick model. *J. Phys. C: Solid State Phys.* Bristol, v. 18, n.33, p. 6225-6237, Nov. 1985.
- [19] THOULESS, D. J.; ANDERSON, P. W.; PALMER, R. G. Solution of 'solvable model of a spin glass'. *Philos. Mag.*, London, v. 35, n. 3, p. 593-601, Mar. 1977.
- [20] THIRUMALAI, D.; QIANG, L.; KIRKPATRICK, T.R. Infinite-range Ising spin glass in a tranverse field. *Phys. A: Math. Gen.*, Bristol, v. 22, n. 16, p. 3339-3349, Aug. 1989.

- [21] SUZUKI, M. Relationship between d-dimensional quantal spin systems and (d+1)-dimensional Ising systems. *Prog. Teor. Phys.* Kyoto, v. 56, n. 5, p. 1454-1469, Nov. 1976.
- [22] BÜTTNER, G.; USADEL, D.; Stability analysis of Ising spin glass with transverse field. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 41, n. 1, p. 428-431, Jan. 1990.
- [23] WIETHEGE, W.; SHERRINGTON, D. The transverse Ising model: fermionic representation and functional integral approach. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, Bristol, v. 19, n. 35 p. 6983-6991, Dec. 1986.
- [24] NAGATO, S.; KEESON, P. H.; HARRISON, H. R. Low d-c field susceptibility of CuMn spin glass. *Phys. Rev. B*, New York, v. 19, n. 3 , p. 1633-1638, Feb.1979.
- [25] MALETA, H.; CONVERT, P. Onset of ferromagnetism in $\text{Eu}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}$ near $x=0.5$. *Phys. Rev. Lett.*, New York, v. 42, n. 2, p. 108-111, Jan. 1979.
- [26] PUREUR NETO, P. *Estado sólido*. Porto Alegre: Instituto de Física UFRGS, 2001.
- [27] KITTEL, C. *Introduction solid state physics*. New York: Jonh Wiley, 1996.
- [28] FISHER, K. H.; HERTZ, J. A. *Spin glasses*. Cambrigde: Cambridge University Press, 1993.
- [29] SALINAS, S. R. *Introdução à física estatística*. São Paulo: Editora USP, 1997.
- [30] MÉZARD, M. ; PARISI, G.; VIRASORO, M. A. *Spin glass theory and beyond*. Singapore: World Scientific, 1987
- [31] YOUNG A. P.; BINDER, K. Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions. *Rev. Mod. Phys.*, Woodbury, v. 58, n. 4, p. 801-976, Oct. 1986.
- [32] THEUMANN, A. Quantum spin glass: a replica-symmetric theory with positive entropy. *Phys. Rev. B*, Woodburg, v. 33 n. 1, p. 559-566, Jan. 1986.

- [33] LUTTINGER J. M.; WARD, J. C. Ground-state energy of a many-fermion system II. *Phys. Rev.*, New York, v. 118, n. 5, p. 1417-1427, June 1960.
- [34] SCHRIEFFER, J. R. *Theory of superconductivity*. New York: Benjamin, 1965.
- [35] SACHDEV, S. Spin glass enter quantum regime. *Physics World*, Bristol, v. 7, n. 10, p. 25-30, Oct. 1994.
- [36] THEUMANN, A. Weak instability of frustated fermionic models. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 56, n. 9, p. 5500-5503, Sept. 1997.
- [37] KIM, D.; KIM, J. J. Infinite-range Ising spin glass with a transverse field under the static approximation. *Phys. Rev. B*, Melville, v. 66, n. 054432 18p., Aug. 2002.