

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Instituto de Física

**Modelo Esférico Quântico de Vidro de Spin na
Aproximação de Recozimento[†]**

Pedro Castro Menezes Xavier de Mello e Silva

*Dissertação realizada sob a orientação da profes-
sora Alba Theumann, apresentada ao Instituto de
Física da UFRGS em preenchimento parcial dos
requisitos para a obtenção do grau de Mestre em
Física.*

Porto Alegre, Junho de 2005.

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

Agradecimentos

A todos aqueles que de alguma forma colaboraram com a realização desse trabalho, seja por meio de dicas computacionais, dicas experimentais ou suporte afetivo ou psicológico.

Agradeço a toda comunidade da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, pois sem ela eu não poderia ter conhecido pessoas tão diferenciais em minha vida como meus colegas de trabalho e professores.

Agradeço também à comunidade linux, que com seus ideais e paixão me forneceram ferramentas fundamentais para a realização desse trabalho.

A minha orientadora, professora A. Theumann, que com firmeza conseguiu conduzir-me brilhantemente durante a realização dessa difícil tarefa.

Aos meus novos companheiros de quarto, que embora não falem, não façam barulho e ocupem muito pouco espaço, me fizeram companhia nesses últimos meses de dissertação.

Agradeço, também, aos amigos cogumelistas, com quem passei muitas noites em claro em prol da Física: Rafael Bán Jacobsen, Rodrigo Nemmen da Silva e Emmanuel Gräve de Oliveira.

Sumário

Resumo

Abstract

1	Introdução	p. 1
2	Fundamentação	p. 4
2.1	Sistemas Temperados vs Sistemas Recozidos	p. 4
2.1.1	Sistemas Temperados e réplicas	p. 5
2.1.2	Sistemas Recozidos	p. 6
2.2	Formalismo de Feynman	p. 6
2.2.1	Conceito e desenvolvimento	p. 6
2.2.2	Tempo imaginário e função de partição	p. 9
2.3	O Modelo de Ising	p. 11
2.4	O Modelo Esférico	p. 12
3	Modelos conhecidos de Vidros de Spin	p. 14
3.1	Modelos Clássicos	p. 14
3.1.1	O Modelo SK com interações de Longo Alcance	p. 14
3.1.2	Super Álgebra e o Modelo Esférico de um Vidro de Spin	p. 16
3.2	Modelo Quântico	p. 20
3.2.1	O Modelo Esférico Quântico de Vidro de Spin	p. 21
3.2.2	O Modelo M-vetorial de Rotores Quânticos: Cálculo no limite $M \rightarrow \infty$	p. 23

4	Modelo Esférico Quântico na aproximação de Recozimento	p. 24
4.1	Introdução	p. 24
4.2	O cálculo	p. 25
5	Conclusão	p. 31
6	Apêndices	p. 32
	Apêndice A: Cálculo explícito de \mathcal{Z} e $\langle \mathcal{Z} \rangle_{ca}$	p. 32
	Apêndice B: Condição esférica	p. 41
	Apêndice C: Energia livre	p. 45
	Apêndice D: Programas	p. 49
	Referências	p. 58

Resumo

Apresentamos aqui o modelo esférico quântico de vidro de spin usando a aproximação de recozimento. São calculadas a energia livre, bem como a temperatura crítica em função do momentum de inércia e a entropia. São consideradas interações aleatórias de longo alcance (campo médio) com distribuição normal de média zero, e a energia cinética de cada spin. O cálculo é feito utilizando o formalismo funcional de Feynman de integrais de caminhos. O limite clássico é apresentado e coincide com o limite conhecido de teorias anteriores.

Abstract

We introduce here the quantum spherical model of a spin glass using the annealed approach. We compute the free energy, as well as the critical temperature as a function of the momentum of inertia, and the entropy. We consider long range random interaction (mean field) with a normal distribution with zero mean, and the kinetic energy per spin. The explicit calculation is done using Feynman's path integrals formalism. The classical limit is shown and agree with the known classical theories.

1 *Introdução*

Os vidros de spin despertaram um grande interesse na comunidade científica desde sua descoberta nos anos 70 [1], quando medidas experimentais da susceptibilidade em uma liga metálica com impurezas magnéticas apresentaram uma quina a uma certa temperatura. Desde então, os físicos vem buscando uma teoria que explique esse comportamento, sempre obtendo apenas parcial sucesso.

Essa quina na susceptibilidade acontece também em sistemas antiferromagnéticos, o que sugere que há uma transição de fase de segunda ordem. Entretanto, não se trata de um sistema antiferromagnético, pois observa-se que a magnetização local é diferente de zero, sendo apenas a magnetização global igual a zero. Essas ilhas de magnetização são formadas graças às interações entre os spins e às impurezas, interações essas que são aleatórias em sinal. Isto significa que as interações entre os spins estão competindo entre si, gerando assim um fenômeno conhecido como frustração.

A frustração ocorre quando um spin recebe “ordens” antagônicas de dois outros spins, por exemplo. Olhando para a *Figura 1*, observamos que o spin localizado no topo do triângulo não conseguirá satisfazer ambas as ordens vinda dos dois outros spins, estando esse então frustrado.

Classificamos, então, os vidros de spin como um sistema desordenado, pois ele possui os dois ingredientes essenciais para tal sistema: aleatoriedade e frustração. Ingredientes

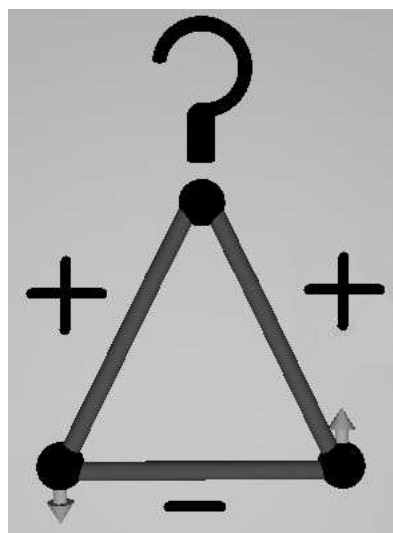


Figura 1: Quando dois spins mandam ordens diferentes a um terceiro spin, este fica frustrado.

que geram muitas complicações no tratamento matemático dos modelos presentes.

A maior dificuldade está em calcular o estado fundamental dessa nova classe de sistemas. Como calcular a energia livre de equilíbrio, se não sabemos exatamente como se comportam as interações entre os spins?

O que se propõe é que conhecemos uma distribuição de probabilidades para os valores de interação entre os spins. Dessa distribuição, definimos uma média sobre todas as configurações, a *média configuracional*, que é dada por

$$\langle \dots \rangle_{CA} = \int \prod_{J_{ij}} dJ_{ij} \mathcal{P}(J_{ij}) (\dots).$$

Essa é a média configuracional da quantidade “...” dada a distribuição de probabilidades $\mathcal{P}(J_{ij})$ para os valores de J_{ij} . Como as impurezas são consideradas fixas (isto é, não flutuam com a temperatura), devemos primeiro calcular a energia livre para um dado conjunto de variáveis aleatórias, e depois tomar a média das energias livres para cada configuração, isto é, a energia livre do sistema será dada por $\beta\mathcal{F} = -\langle \ln \mathcal{Z} \rangle_{CA}$, onde \mathcal{Z} é a função de partição definida por

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

β é o inverso da temperatura e \mathcal{H} é o hamiltoniano do sistema a ser considerado, obtendo assim o que se acredita ser o estado fundamental do vidro de spin (do inglês quenched, aqui referido como temperado). Dessa forma, consideramos que o sistema não entra em equilíbrio para cada temperatura, isto é, elevamos a sua temperatura, depois o resfriamos rapidamente. Esse tipo de sistema é chamado de *temperado* (em inglês *quenched*). Este é um problema muito difícil de se tratar matematicamente, pois as aleatoriedades do sistema se encontram em uma função não linear (logaritmo), sendo preciso recorrer a métodos como o “método das réplicas” introduzido por S. F. Edwards e P. W. Anderson [2], onde usa-se a identidade matemática

$$\ln(x) = \lim_{n \rightarrow 0} \left(\frac{x^n - 1}{n} \right)$$

substituindo x^n , sendo x uma variável matemática genérica, por \mathcal{Z}^n , que é interpretado como sendo n réplicas do sistema em questão, e se obtém a energia livre do sistema fazendo o limite para o número de réplicas indo a zero.

O problema é muito complexo, e somente os resultados para a teoria de campo médio, isto é, considerando que a interação entre os spins é de longo alcance, são bem conhecidos.

Este trabalho vai se focar no caso de campo médio. Também trataremos o modelo como se as variáveis aleatórias flutuassem com a temperatura, obtendo assim um valor de equilíbrio para cada uma, e para isso usaremos o tratamento de *recozimento* (*annealed*), o que a priori leva à física errada do problema.

O fato de usarmos uma técnica que, a princípio, não leva a resultados aceitáveis, é devido a um trabalho anterior de A. Theumann[3]. A. Theumann mostra, usando super álgebra [4], que podemos tratar o modelo esférico de um vidro de spin das duas formas equivalentemente: usando a média temperada ou a recozida.

A proposta deste trabalho é aplicar a média recozida a um modelo esférico de vidro de spins quânticos, e mostrar que, de fato, pode ser usado tal tratamento. Usaremos o Hamiltoniano introduzido por Shukla e Singh [5] e resolveremos o modelo usando a técnica das integrais funcionais de Feynman [6, 7]. Obtemos a energia livre, a entropia e o diagrama de fases, mostrando que o tratamento recozido é válido também no caso quântico de vidros de spins esféricos.

Encontramos também uma divergência nos resultados originais, que é justificada pela má normalização da função de partição. Com a normalização correta, obtemos os limites clássicos corretos.

O trabalho está dividido em 3 capítulos:

- No primeiro capítulo mostramos a fundamentação teórica, mostrando o que é o tratamento temperado e o que é o tratamento de recozimento; fazemos uma breve apresentação do formalismo de Feynman para uma e para muitas partículas (mecânica estatística); dissertamos brevemente sobre o modelo de Ising; mostramos, a título ilustrativo, o modelo esférico original de Berlin e Kac [8].
- No segundo capítulo apresentamos os modelos conhecidos de vidros de spin, passando por dois modelos clássicos (O modelo SK [9] e o tratamento por super álgebra no modelo esférico [3]) e dois modelos quânticos.
- No terceiro capítulo modelamos o problema proposto, e o resolvemos apresentando os resultados para a energia livre, para a temperatura crítica dependente do inverso do momentum de inércia e a entropia.

Na conclusão, discutimos o que aprendemos com o modelo apresentado.

Nos apêndices temos os cálculos feitos para resolver o modelo, bem como os programas usados para o cálculo numérico de algumas integrais necessárias à obtenção dos resultados.

2 *Fundamentação*

Neste capítulo apresentamos os conceitos físicos das abordagens temperada e recozida, bem como uma breve introdução de como devemos tratá-las matematicamente; o formalismo de Feynman é apresentado de forma detalhada para que seja possível acompanhar todos os cálculos feitos no desenvolvimento do modelo (cálculos apresentados nos apêndices *a*, *b* e *c*; uma breve apresentação ao modelo de Ising, de caráter apenas introdutório e ilustrativo, para deixar firmado o que queremos dizer com modelos do tipo Ising; uma breve discussão sobre o modelo esférico, mostrando suas semelhanças e diferenças com o modelo de Ising.

2.1 Sistemas Temperados vs Sistemas Recozidos

“Quenched”, ou em português “temperado”, é o tratamento onde, por exemplo, tomamos uma amostra de metal, aquecemos e subitamente diminuimos sua temperatura, de modo que o sistema não passe por diversas etapas de equilíbrio.

“Annealed”, ou em português “recozido”, é o tratamento onde tomamos, por exemplo, uma amostra metálica, aquecemos e diminuimos lentamente sua temperatura, fazendo assim que o sistema passe por diversas fases de equilíbrio.

Matematicamente, uma média temperada deve ser feita sobre a energia livre, pois, no caso dos vidros de spin, por exemplo, devemos considerar as impurezas congeladas, ou seja, considerar cada configuração

$$\beta f = -\ln \text{Tr} (e^{-\beta \mathcal{H}})$$

onde \mathcal{H} é o Hamiltoniano do sistema, que depende da configuração aleatória das interações entre os spins, e $\beta = \frac{1}{k_B T}$, para depois fazer a média sobre as impurezas, ou seja

$$\beta \mathcal{F}_T = \langle \beta f \rangle_{ca} = -\langle \ln [\text{Tr} (e^{-\beta \mathcal{H}})] \rangle_{ca}$$

onde $\beta\mathcal{F}_T$ é a energia livre resultante da média configuracional de βf , significando que as impurezas não estão flutuando com a temperatura ($\langle \dots \rangle_{ca}$ é a média configuracional introduzida anteriormente). O sub-índice “T” indica que a média é temperada.

Uma média recozida é feita diretamente sobre a função de partição, que é definida como

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

e sua média configuracional é

$$\beta\mathcal{F}_A = -\ln \langle \text{Tr} (e^{-\beta\mathcal{H}}) \rangle_{ca}.$$

Fisicamente, estamos permitindo que as aleatoriedades do sistema flutuem com a temperatura, e entrem em equilíbrio para cada temperatura T . O sub-índice “A” indica que a média é recozida.

No caso dos vidros de spin, a média annealed em geral leva à física errada do sistema, pois devemos considerar as impurezas fixas, isto é, elas não flutuam com a temperatura. Entretanto, o modelo esférico permite ambas as abordagens (temperada ou recozida), apresentando os mesmos resultados, como mostrou A. Theumann [3]. Nosso objetivo é mostrar que esse tratamento se estende também para um modelo quântico.

2.1.1 Sistemas Temperados e réplicas

A complicação matemática de fazer uma média temperada está em fazer a média sobre variáveis aleatórias que estão no interior de uma função não linear: o logaritmo. Para contornar esse problema, Edwards e Anderson apresentaram um método conhecido como “o método das réplicas”, que consiste em fazer n réplicas do sistema a ser tratado, e depois tomar o limite para o número de réplicas tendendo a zero, na seguinte igualdade matemática

$$\ln x = \lim_{n \rightarrow 0} \left(\frac{x^n - 1}{n} \right)$$

onde x é um número qualquer. O sistema entra em forma de réplicas substituindo x pela função de partição \mathcal{Z} . Deste modo, a média temperada se torna

$$\langle \beta\mathcal{F} \rangle_{ca} = -\lim_{n \rightarrow 0} \left(\frac{\langle \mathcal{Z}^n \rangle - 1}{n} \right)$$

onde devemos tomar o cuidado de primeiro tomar o limite das réplicas e depois o limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$. Esse método mostrou-se muito eficiente no cálculo das propri-

idades dos modelos onde se aplica, embora exista uma discussão sobre qual limite deva ser tomado primeiro (o limite das réplicas ou o termodinâmico). No entanto, acredita-se que essa ordem não cria problemas [1, 10].

2.1.2 Sistemas Recozidos

Se consideramos que as variáveis de interação aleatórias podem flutuar com a temperatura como as variáveis de spin, podemos considerar que, a cada temperatura uma configuração de equilíbrio é estabelecida. Deste modo, consideramos matematicamente

$$\beta\mathcal{F} = -\ln \langle \mathcal{Z} \rangle_{ca}$$

o que é mais simples do que a média anteriormente apresentada.

No caso dos vidros de spin, esse tratamento nos leva a física do sistema errada, pois devemos considerar que as interações aleatórias são fixas, independentes de temperatura. Sabemos ([1]) que a energia livre obtida por esse método é maior ou igual a energia livre obtida pelo cálculo usando a média temperada. Por outro lado, sabemos também que o modelo esférico permite o uso da abordagem de recozimento [3].

2.2 Formalismo de Feynman

Nesta seção apresentamos o Formalismo de Feynman com suas principais características e o modo que devemos lidar com ele. Na primeira parte apresentamos o formalismo para uma partícula mostrando um exemplo (a partícula livre), e na segunda parte mostramos o propagador para muitas partículas e a conexão com a mecânica estatística. Aqui, não exemplificamos, pois usamos tal formalismo para o cálculo do modelo. Desta forma, o próprio modelo serve de exemplo para o desenvolvimento de sistemas estatísticos usando o formalismo [6, 7].

2.2.1 Conceito e desenvolvimento

Feynman queria desenvolver um formalismo para a mecânica quântica que fizesse uso de idéias e funções clássicas, tais como o Lagrangeano ou mais especificamente, a ação \mathcal{S} , que é a integral indefinida do Lagrangeano. Dirac, em um de seus trabalhos, sugeriu que há uma conexão entre uma função de onda a um tempo, digamos, t_0 , com a função de onda a um tempo posterior t_ε que seria dada por uma função transformação (o que

chamaremos de propagador) proporcional a exponencial do Lagrangeano \mathcal{L} multiplicada pelo imaginário puro i e o intervalo de tempo ε , isto é

$$|\psi(t_\varepsilon)\rangle \propto e^{-i\varepsilon\mathcal{L}}|\psi(t_0)\rangle.$$

Partindo dessa observação, Feynman iniciou seus estudos para descobrir se era ou não possível fazer com que a equação acima se tornasse uma igualdade. De fato, observou-se que essa função exponencial poderia ser usada diretamente dessa maneira, para ε pequeno.

Trabalhando mais um pouco para desenvolver o formalismo para intervalos de tempo finitos (não tão pequenos quanto ε), descobriu-se que para tempos macroscópicos, deveria-se levar em conta a integral no tempo do Lagrangeano no expoente,

$$\mathcal{S} = \int_{t_a}^{t_b} \mathcal{L} dt, \quad \mathcal{L} = \frac{1}{2}m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x)$$

mas devendo ser feita a integral sobre todas as variáveis de espaço a cada instante de tempo. Surgiu, então, a idéia de *integrais de caminho*, que são essas integrais sobre todos os valores de espaço para cada tempo infinitesimal.

- Caminhos

O princípio da mínima ação, em mecânica clássica, determina qual o caminho que a partícula seguirá dadas as interações que ela sofre. Entretanto, em mecânica quântica, a determinação de caminho se torna muito difícil, pois devido as incertezas intrínsecas desses sistemas, não podemos dizer qual caminho a partícula percorreu ao ser medida em um ponto, digamos, x . Para resolver isso e dar uma interpretação intuitiva a nova teoria, Feynman explica que uma partícula quântica percorre todos os caminhos possíveis para sair de um lugar x_0 no tempo t_0 , e chegar ao seu destino (isto é, onde ela foi medida) x_f no tempo t_f . Para cada caminho se define uma amplitude parcial, ou o propagador pelo caminho $x(t)$ dado por

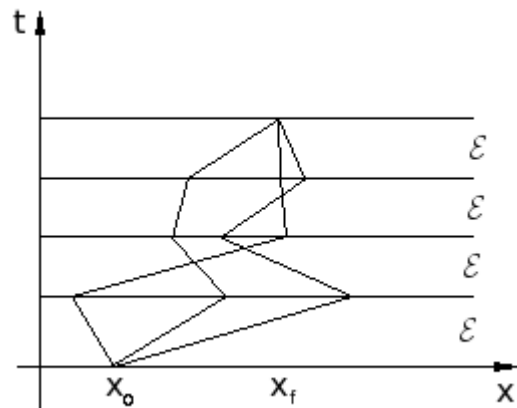


Figura 2: Alguns dos caminhos que são levados em conta no formalismo

$$\phi[x(t)] = \mathcal{C} e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}[x(t)]}$$

onde \mathcal{C} é uma constante escolhida de modo a normalizar o propagador total

$$\mathcal{U}(b, a) = \sum_{a \rightarrow b} \phi[x(t)]$$

onde \mathcal{U} é o propagador para tempo finito a ser calculado, b são as coordenadas (espaço e tempo) de onde a partícula foi medida, a é de onde a partícula saiu, e a soma indica a soma sobre todos os caminhos possíveis entre a e b .

Como fazemos para seguir todos os caminhos, e somá-los?

Devemos dividir o espaço em M fatias no tempo, como mostra a *Figura 2*, de tamanho ε , depois tomar o limite $M \rightarrow \infty$ e $\varepsilon \rightarrow 0$, obtendo assim uma integral. Matematicamente

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(b, a) &= \langle x_f | \left(e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}} \right)^M | x_0 \rangle = \int \prod_{k=1}^{M-1} dx_k \langle x_f | e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}} | x_{M-1} \rangle \langle x_{M-1} | e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}} | x_{M-2} \rangle \times \\ &\times \langle x_{M-2} | e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}} | x_{M-3} \rangle \dots \langle x_1 | e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}} | x_0 \rangle \end{aligned} \quad (2.1)$$

onde foram usadas $M - 1$ identidades do tipo $\int |x_i\rangle \langle x_i| dx_i = 1$. O próximo passo é calcular cada elemento infinitesimal desse operador

$$\langle x_n | e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}} | x_{n-1} \rangle = \int d^3 p_n \langle x_n | p_n \rangle \langle p_n | e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}} | x_{n-1} \rangle. \quad (2.2)$$

Queremos uma aproximação para este elemento que nos reproduza exatamente a evolução da função de onda no limite $\varepsilon \rightarrow 0$, e também nos gere um resultado aceitável quando atuar nos autovetores de posição e momentum. Para isso, aproximamos o operador entre os autovetores de momentum e posição por sua ordem normal.

Para operadores expressos em termos de \hat{x} e \hat{p} , a ordem normal é definida quando todos os \hat{p} 's estão à esquerda, e os \hat{x} 's à direita. Por exemplo

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad (2.3)$$

está em ordem normal, e

$$: e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}} := \sum_{n=0}^{\infty} \left(-i\frac{\varepsilon}{\hbar} \right)^n \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!(n-k)!} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} \right)^k (V(\hat{x}))^{n-k}.$$

O operador completo, entretanto, não é diretamente igual a sua ordem normal. Mais precisamente

$$e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}} = : e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}} : - \left(\frac{\varepsilon}{\hbar} \right)^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(-i\frac{\varepsilon}{\hbar} \right)^n}{(n+2)!} \left[\hat{\mathcal{H}}^{n+2} - : \hat{\mathcal{H}}^{n+2} : \right].$$

Note que o termo de correção é da ordem de ε^2 , de modo que para o operador infinitesimal, no limite $\varepsilon \rightarrow 0$, a ordem normal nos leva ao resultado correto para o propagador. Deste modo, o elemento infinitesimal se torna

$$\begin{aligned} \langle x_n | e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}} | x_{n-1} \rangle &= \int d^3 p_n \langle x_n | p_n \rangle \langle p_n | e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}} | x_{n-1} \rangle \approx \\ &\approx \int d^3 p_n \langle x_n | p_n \rangle \langle p_n | : e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}} : | x_{n-1} \rangle = \\ &= \int d^3 p_n \langle x_n | p_n \rangle \langle p_n | e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}\mathcal{H}(p, x_{n-1})} | x_{n-1} \rangle = \\ &= \int \frac{d^3 p_n}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\frac{p_n}{\hbar}(x_n - x_{n-1})} e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}\mathcal{H}(p, x_{n-1})} \end{aligned}$$

onde $\mathcal{H}(p, x_{n-1})$ é uma função, e não um operador e foram usadas as auto funções do operador momentum no espaço de coordenadas $\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx}$. Voltando para o propagador completo, e usando o Hamiltoniano dado em (2.3), temos

$$\mathcal{U}(b, a) = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^{M-1} dx_k \left(\frac{m}{2\pi i \varepsilon \hbar} \right)^{\frac{3M}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon \sum_{k=1}^M \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\varepsilon} \right)^2 - V(x_{k-1}) \right]}.$$

O conjunto dos pontos $\{x_0 \dots x_M\}$ definem uma trajetória. No limite $M \rightarrow \infty$, usamos a notação

$$\mathcal{U}(b, a) = \int_a^b \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x) \right]} = \int_a^b \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]}$$

onde

$$\int_a^b \mathcal{D}[x(t)] = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^{M-1} dx_k \left(\frac{m}{2\pi i \varepsilon \hbar} \right)^{\frac{3M}{2}}$$

representa a soma sobre todas as trajetórias possíveis começando em $a = (x_0, t_0)$ e terminando em $b = (x_f, t_f)$.

2.2.2 Tempo imaginário e função de partição

A função de partição para uma partícula deve ser escrita da seguinte forma

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} = \int dx \langle x | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} | x \rangle \quad (2.4)$$

e pode ser pensada como a soma dos elementos diagonais da matriz do propagador a tempo imaginário

$$\mathcal{U}(b, a) = \langle x_f | e^{-(\tau_f - \tau_0) \frac{\hat{\mathcal{H}}}{\hbar}} | x_0 \rangle$$

calculado para o intervalo $\tau_f - \tau_i = \beta\hbar$, $\beta = \frac{1}{k_B T}$. Aqui, a representa o ponto x_0 ao tempo imaginário τ_0 , e b representa o ponto x_f ao tempo imaginário τ_f . Fazendo a substituição

$$t = i\tau$$

temos então que

$$\frac{dx}{d\tau} = \frac{dt}{d\tau} \frac{dx}{dt} = -i \frac{dx}{dt}$$

nos dando a ação

$$\begin{aligned} S &= \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x(t)) \right] = -\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_0}^{\tau_f} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + V(x(\tau)) \right] d\tau \\ &= -\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_0}^{\tau_f} \mathcal{H} \left(\frac{dx(\tau)}{d\tau}, x(\tau) \right) d\tau \end{aligned}$$

e, substituindo isso nas equações (2.2) e (2.1), obtemos, fazendo os mesmos passos anteriores

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(b, a) &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^{M-1} d^3 x_k \left(\frac{m}{2\pi\epsilon\hbar} \right)^{\frac{3M}{2}} e^{-\frac{\epsilon}{\hbar} \sum_{k=1}^M \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon} \right)^2 + V(x_{k-1}) \right]} \\ &= \int_a^b \mathcal{D}[x(\tau)] e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_0}^{\tau_f} \mathcal{H} d\tau} \end{aligned}$$

onde $\epsilon = \frac{1}{M}(\tau_f - \tau_0)$. Note que a exponencial da ação ficou levemente modificada, nos dando a exponencial da integral do Hamiltoniano, ao invés do Lagrangeano. Voltando agora a (2.4), temos que

$$\mathcal{Z} = \int dx \int_{x(0)=x}^{x(\beta\hbar)=x} \mathcal{D}[x(\tau)] e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{H} d\tau} \equiv \int_{x(\beta\hbar)=x(0)} \mathcal{D}[x(\tau)] e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{H} d\tau}$$

Agora, temos tudo pronto para um sistema de muitas partículas. Devemos seguir os mesmos passos anteriores, mas devemos introduzir as relações de clausura para muitas partículas

$$\begin{aligned} \sum_{x_1, x_2, \dots} |x_1 x_2 \dots x_n\rangle \langle x_1 x_2 \dots x_N| &= 1 \\ \sum_{x_1, x_2, \dots} |p_1 p_2 \dots p_n\rangle \langle p_1 p_2 \dots p_N| &= 1 \end{aligned}$$

onde os vetores representados acima são simplesmente o produto tensorial

$$|x_1 x_2 \dots x_N\rangle = |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes \dots \otimes |x_N\rangle .$$

Para um Hamiltoniano de muitas partículas dado por

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v(\hat{x}_i - \hat{x}_j)$$

a função de partição deve ser escrita como

$$\mathcal{Z} = \int_{x(\beta\hbar)=x_i(0)} \mathcal{D}[x_1(\tau)] \dots \mathcal{D}[x_N(\tau)] e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[\sum_{i=1}^N \frac{m}{2} \left(\frac{dx_i(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v(x_i(\tau) - x_j(\tau)) \right]}$$

que é o que usamos no desenvolvimento do presente trabalho.

2.3 O Modelo de Ising

O modelo de Ising (ver por exemplo [11]) foi proposto como uma teoria microscópica de transição de fase para ferromagnetos. Trata-se de uma rede cristalina com sítios ocupados por spins σ_j que interagem apenas entre seus vizinhos mais próximos, que podem assumir os valores ± 1 . O Hamiltoniano do modelo é dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(ij)} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

onde a primeira soma é entre primeiros vizinhos, e representa a energia de interação entre um spin e seu vizinho próximo; o segundo termo é a interação entre os spins e um campo externo H . O número de vizinhos será determinado pela dimensionalidade da rede, isto é, para uma rede unidimensional tem-se 2 vizinhos; bidimensional quadrada, 4 vizinhos; etc.

Note que fica em aberto a interpretação desses spins. Uma vez que podem tomar 2 valores apenas, podemos considerar que são componentes do spin dos átomos, que podem apontar para cima (+1) ou para baixo (-1), podem indicar dois tipos de materiais diferentes interagindo, isto é, um sítio i ocupado por um elemento A e outro sítio J por um elemento B , de modo que $AB = -1$ contribui com uma energia positiva J no Hamiltoniano, e $AA = BB = 1$ contribui com uma energia $-J$, ou como um gás de rede, onde 0 e 1 indicam desocupado e ocupado.

Sabemos que para o modelo unidimensional de Ising não há transição de fase, e que para os modelos bi e tridimensional há transição. As soluções para uma e duas dimensões são conhecidas exatamente, mas não há até o momento nenhuma solução exata para o modelo tridimensional, apenas soluções aproximadas.

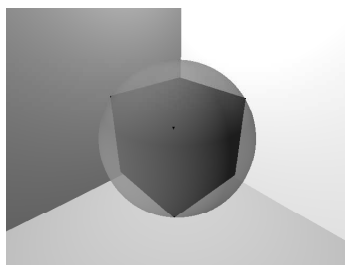
2.4 O Modelo Esférico

O modelo esférico para um ferromagneto foi proposto por T. H. Berlin e M. Kac [8] para estudar fenômenos de transição de fase em sistemas com ordem ferromagnética. O modelo é exatamente solúvel à três dimensões.

O modelo esférico considera uma rede regular com N sítios, todos ocupados por spins contínuos ϵ_i e energia de interação entre primeiros vizinhos dada por $-J\epsilon_i\epsilon_j$. Os spins podem assumir quaisquer valores, desde que

$$\sum_i \epsilon_i^2 = N \quad , \quad \langle \epsilon_i^2 \rangle = 1,$$

que é a condição esférica. Para termos uma visualização geométrica do que seria o modelo esférico proposto, vamos imaginar um espaço cartesiano N dimensional. Considere que cada dimensão desse espaço construído é um spin. Agora, um ponto P qualquer dado por $P\{\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_N\}$ será uma possível configuração para o modelo de Ising se todos os ϵ_j forem iguais a $+1$ ou -1 . Note que essa configuração representará um vértice do hipercubo N -dimensional definido por todas as configurações possíveis tendo $\epsilon_j = \pm 1$. Se inscrevermos uma hipersfera nesse hipercubo, os pontos desse novo objeto serão dados pela equação $\sum_i \epsilon_i^2 = N$, ou seja, pela condição esférica. O modelo esférico, então, admite todos os pontos na superfície dessa hipersfera, sendo cada um deles uma configuração.



Cubo inscrito em uma esfera. Os vértices do cubo representam possíveis configurações do modelo de Ising com 3 sítios, enquanto a esfera representa as configurações possíveis para o modelo esférico.

Embora o modelo esférico tenha características não físicas, ele é exatamente solúvel, portanto, através deste modelo podemos ter um conhecimento, ou uma idéia do comportamento de sistemas mais realísticos na transição de fase. Ainda, com toda a “não física” do modelo, ele apresenta resultados que se aproximam razoavelmente bem aos do modelo de Ising.

Sobre o número extra de configurações que o modelo esférico permite além das configurações de Ising, podemos pensar que o comportamento obtido pelo modelo apresenta tais características (como transição de fase) devido a configurações com vários spins de módulo grande, e poucos spins pequenos. Berlin e Kac [8] mostram calculando a corre-

lação entre os spins, que esse tipo de configuração não é responsável pelo comportamento do modelo, de fato, a condição esférica implica que as flutuações no módulo dos spins são baixas.

Não é nosso objetivo recalcular o modelo esférico detalhadamente. Para maiores detalhes sobre o cálculo deve-se consultar o artigo original [8]. Apresentamos aqui apenas considerações sobre o modelo.

No cálculo do modelo, encontra-se no caso tridimensional uma singularidade no cálculo do ponto de sela que nos fornecerá a energia livre do sistema. Para temperaturas abaixo de T_c (onde ocorre tal singularidade), a energia livre deixa de ser real. Berlin e Kac, fazendo a continuação analítica para a equação do ponto de sela, e observam que existem sim pontos de sela para temperaturas menores que T_c , e que estes se mantêm constantes. Chega-se a conclusão que T_c é a temperatura de transição, ou temperatura crítica do modelo.

No presente trabalho usamos o modelo esférico médio, onde a condição esférica

$$\sum s_i^2 = N$$

é substituída por

$$\langle \sum s_i^2 \rangle = N .$$

3 Modelos conhecidos de Vidros de Spin

3.1 Modelos Clássicos

Mostramos aqui dois exemplos de trabalhos em vidros de spin clássicos. Apresentamos o modelo e sua solução, passando pelo cálculo sem detalhá-lo.

3.1.1 O Modelo SK com interações de Longo Alcance

D. Sherrington e S. Kirkpatrick (SK) desenvolveram um modelo com interações de longo alcance para vidros de spin usando spins de Ising [9]. SK resolvem o modelo usando o método das réplicas, que consiste em usar a identidade matemática

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

substituindo x^n por \mathcal{Z}^n , onde \mathcal{Z} é a função de partição do sistema. A interpretação física dada foi que são consideradas n réplicas do sistema, e depois se faz o limite para o número de réplicas igual a zero. Assim é possível calcular a média configuracional da energia livre

$$\langle \beta F \rangle_{ca} = - \langle \ln \mathcal{Z} \rangle_{ca} = - \lim_{n \rightarrow 0} \left(\frac{\langle \mathcal{Z}^n \rangle_{ca} - 1}{n} \right). \quad (3.1)$$

O modelo considera o Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{(ij)} \mathcal{J}_{ij} s_i s_j - H \sum_i s_i$$

onde \mathcal{J}_{ij} é a energia de interação aleatória entre os spins e H é um campo auxiliar. Considera-se que \mathcal{J}_{ij} tem uma distribuição normal de média J_0 e desvio quadrático médio J , isto é,

$$\mathcal{P}(\mathcal{J}_{ij}) = \frac{e^{-\frac{1}{2J^2}(\mathcal{J}_{ij}-J_0)^2}}{\sqrt{2\pi J^2}}.$$

São consideradas interações de longo alcance (campo médio). Não é objetivo do trabalho mostrar os cálculos detalhados do modelo SK, então, apresentamos apenas alguns passos importantes para a obtenção da solução do modelo. Por solução entendemos a energia livre, a magnetização e o parâmetro de ordem de Edwards-Anderson.

A média configuracional de n réplicas da função de partição é calculada

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{Z}^n \rangle_{ca} &= e^{\frac{\beta^2 \tilde{J}^2}{4N} [nN^2 - n^2 N]} \sum_{\{s_\alpha\}} e^{\beta H \sum_\alpha \sum_i s_i^\alpha} \int \prod_\alpha \frac{e^{-\frac{1}{2}x_\alpha^2 + \left(\frac{\beta \tilde{J}_0}{N}\right)^{\frac{1}{2}} x_\alpha \sum_i s_i^\alpha} dx_\alpha}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}} \times \\ &\times \int \prod_{(\alpha\gamma)} e^{-\frac{1}{2}y_{\alpha\gamma}^2 + \frac{\beta \tilde{J}}{\sqrt{N}} y_{\alpha\gamma} \sum_i s_i^\alpha s_i^\gamma} \end{aligned}$$

onde J e J_0 foram respectivamente substituídos por $\frac{\tilde{J}}{\sqrt{N}}$ e $\frac{\tilde{J}_0}{N}$, x e y são campos auxiliares provenientes de duas transformações de Hubbard-Stratonovich¹ e α e γ são índices de réplica. Agora, introduzimos $\langle \mathcal{Z}^n \rangle_{ca}$ em (3.1) para obtermos a energia livre do sistema

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &= -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{nN} \left\{ e^{\frac{(\beta \tilde{J})^2}{4} nN} \int \int \left[\prod_\alpha \sqrt{\frac{N}{2\pi}} dx_\alpha \right] \left[\prod_{\alpha\gamma} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} dy_{\alpha\gamma} \right] \times \right. \\ &\times e^{-N \left\{ \sum_\alpha \frac{x_\alpha^2}{2} + \sum_{\alpha\gamma} \frac{y_{\alpha\gamma}^2}{2} - \ln \left[\sum_{\{s_\alpha\}} e^{\beta H \sum_\alpha s_\alpha + \sqrt{\beta \tilde{J}_0} \sum_\alpha x_\alpha s_\alpha + \beta \tilde{J} \sum_{\alpha\gamma} y_{\alpha\gamma} s_\alpha s_\gamma} \right] \right\} - 1 \left. \right\} \end{aligned}$$

e, considerando a solução de simetria de réplicas, isto é, $x_\alpha \equiv \sqrt{N}x$ para qualquer α e $y_{\alpha\gamma} \equiv \sqrt{N}y$ para todo α e γ , ficamos com

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &= -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{nN} \left\{ e^{\frac{(\beta \tilde{J})^2 nN}{4}} \int \int \left(\frac{N}{2\pi} \right)^{\frac{n}{2}} d^n x \left[\int \int \prod_{\alpha\gamma} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} dy_{\alpha\gamma} \right] e^{-N \left\{ \frac{n}{2} x^2 + \frac{1}{4} n(n-1) y^2 + \frac{n\beta \tilde{J}}{2} y \right\}} \times \right. \\ &\times e^{-N \left\{ -\ln \left[\int \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}z^2} \left(2 \cosh(\beta H + \sqrt{\beta \tilde{J}_0} x + \sqrt{\beta \tilde{J}} y z) \right)^n \right] \right\} - 1 \left. \right\} \end{aligned}$$

onde z vem de outra transformação de Hubbard-Stratonovich. Calculamos a integral usando o método do ponto de sela, definimos

$$m = \frac{\bar{x}}{\sqrt{\beta \tilde{J}_0}}, \text{ e } q = \frac{\bar{y}}{\beta \tilde{J}}$$

onde \bar{x} e \bar{y} são as soluções para as equações de ponto de sela. Obtemos para a energia

¹ $e^{\lambda a^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-\frac{1}{2}w^2 + \sqrt{2\lambda}aw} dw$

livre, a magnetização e o parâmetro de ordem de Edwards-Anderson

$$\mathcal{F} = \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{\tilde{J}_0 \beta m^2}{2} - \frac{(\beta \tilde{J})^2}{4} (1 - q)^2 - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dz e^{-\frac{1}{2}z^2} \ln [2 \cosh \Xi] \right\}$$

$$m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dz e^{-\frac{1}{2}z^2} \tanh \Xi$$

$$q = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dz e^{-\frac{1}{2}z^2} \tanh^2 \Xi$$

com

$$\Xi = \beta \left(\tilde{J}_0 m + \tilde{J} \sqrt{q} z + H \right)$$

3.1.2 Super Álgebra e o Modelo Esférico de um Vidro de Spin

Para obtermos um melhor entendimento da super matemática [4], A. Theumann [3] aplicou essa técnica no modelo de resultados bem conhecidos apresentado anteriormente: o modelo esférico de um vidro de spin. Além de mostrar o uso, A. Theumann mostrou que o modelo esférico tem uma característica “patológica” de que, nesse modelo, o resultado do tratamento recozido é igual ao resultado obtido pelo tratamento temperado.

A partir da função de partição do modelo esférico, com interações aleatórias J_{ij} com distribuição normal de média zero e variancia $\frac{J^2}{N}$

$$Q(\mu) = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i \frac{d\sigma_i}{\sqrt{\pi}} \exp \left(\frac{1}{2} \sum_{i,j} K_{ij} \sigma_i \sigma_j - \mu \sum \sigma_i^2 \right) = \frac{1}{(|\Gamma|)^{\frac{1}{2}}} \quad (3.2)$$

onde Γ_{ij} é uma matriz $N \times N$ de elementos

$$\Gamma_{ij} = \mu \delta_{ij} - \frac{1}{2} K_{ij}$$

$$K_{ij} = \beta J_{ij} \quad , \quad K_{ii} = 0$$

e $\beta = (k_B T)^{-1}$, cuja condição esférica é dada pela equação

$$-\frac{\partial}{\partial \mu} \langle \ln Q(\mu) \rangle_{CA} = \sum_i \langle \langle \sigma_i^2 \rangle_{TA} \rangle_{CA} = N$$

sendo

$$\langle \dots \rangle_{TA} = \frac{1}{Q(\mu)} \int \prod_i \frac{d\sigma_i}{\sqrt{\pi}} \exp \left(- \sum_{i,j} \Gamma_{ij} \sigma_i \sigma_j \right) (\dots)$$

a média térmica convencional e

$$\langle \dots \rangle_{CA} = \int \prod_{(ij)} \frac{\sqrt{N}}{J} \frac{dJ_{ij}}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{NJ_{ij}^2}{2J^2}} (\dots)$$

é a média configuracional sobre os J_{ij} aleatórios, cria-se um funcional

$$Z(\{h\}) = \left\langle \frac{Q(\mu; \{h_1\})Q(\mu; \{h_2\})}{Q^2(\mu)} \right\rangle_{CA}$$

onde $Q(\mu)$ é (3.2) e

$$Q(\mu; \{h_\alpha\}) = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i \frac{d\sigma_i}{\sqrt{\pi}} \exp \left(- \sum_{i,j} \Gamma_{ij} \sigma_i \sigma_j + \sum_i h_{i\alpha} \sigma_i \right)$$

para $h_{i\alpha}$ um conjunto de dois campos auxiliares nos sítios i com $\alpha = 1$ ou 2 . Notamos que esse funcional tem as seguintes características:

$$Z(0) \equiv 1$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2 Z}{\partial h_{i\alpha}^2} \right)_{\{h\}=0} &= \left\langle \left(\frac{1}{Q} \frac{\partial^2 Q(\mu; \{h_\alpha\})}{\partial h_{i\alpha}^2} \right)_{\{h\}=0} \right\rangle_{CA} = \langle \langle \sigma_i^2 \rangle_{TA} \rangle_{CA} \\ \left(\frac{\partial^2 Z}{\partial h_{i1} \partial h_{i2}} \right)_{\{h\}=0} &= \left\langle \left(\frac{1}{Q} \frac{\partial Q(\mu; \{h_\alpha\})}{\partial h_i} \right)_{\{h\}=0}^2 \right\rangle_{CA} = \langle \langle \sigma_i \rangle_{TA}^2 \rangle_{CA}, \end{aligned}$$

e o grande potencial termodinâmico deve satisfazer a seguinte condição:

$$\frac{\partial}{\partial \mu} (\beta \Omega(\mu)) = \frac{1}{N} \sum_i \langle \langle \sigma_i^2 \rangle_{TA} \rangle_{CA}$$

com a condição

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} [\beta \Omega(\mu)] = \frac{1}{2} \ln [\mu].$$

Podemos obter todas as informações do sistema a partir do funcional $Z(\{h\})$.

Para calcular $Z(\{h\})$, A. Theumann introduziu a super matemática da seguinte forma²: Sejam χ_i variáveis anti-comutantes (variáveis de Grassmann) tais que

$$\begin{aligned} \{\chi_i, \chi_j\} &= \{\chi_i^*, \chi_j^*\} = 0 & \chi_i^2 &= 0 \\ \int d\chi_i \chi_j &= \int d\chi_i^* \chi_j^* = \delta_{ij} & \int d\chi_i &= \int d\chi_i^* = 0. \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$\int \prod_i d\chi_i d\chi_j \exp \left(- \sum_{ij} \Gamma_{ij} \chi_i^* \chi_j \right) = |\Gamma|$$

²Não é um objetivo do trabalho fazer uma revisão de super matemática e suas propriedades. O leitor interessado deve recorrer a referência [4] para um melhor esclarecimento da técnica.

Reescrevemos o funcional $Z(\{h\})$ da seguinte maneira:

$$Z(\{h\}) = \langle |\Gamma| Q(\mu; \{h_1\}) Q(\mu; \{h_2\}) \rangle_{CA}$$

e, usando (3.3)

$$Z(\{h\}) = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{i,\alpha} \frac{d\sigma_{i\alpha}}{\pi^N} \int \prod_i d\chi_i^* d\chi_i \left\langle \exp \left[- \sum_{i,j} \Gamma_{ij} \left(\chi_i^* \chi_j + \sum_{\alpha=1}^2 \sigma_{i\alpha} \sigma_{j\alpha} \right) + \sum_{i,\alpha} h_{i\alpha} \sigma_{i\alpha} \right] \right\rangle_{CA}.$$

Podemos calcular a média configuracional usando a distribuição de probabilidades para os valores de J_{ij} dada por

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} e^{-\frac{NJ_{ij}^2}{2J^2}}$$

que resulta

$$Z(\{h\}) = \frac{1}{\pi^N} \left[\int \prod_i \chi_i^* \chi_i \right] \left[\int \prod_{i\alpha} d\sigma_{i\alpha} \right] \left[e^{\sum_{i\alpha} h_{i\alpha} \sigma_{i\alpha} - \mu \sum_i (\chi_i^* \chi_i + \sum_{\alpha} \sigma_{i\alpha} \sigma_{i\alpha})} \times \right. \\ \left. \times e^{\frac{J^2 \beta^2}{2N} \sum_{(ij)} \left(\frac{\chi_i^* \chi_j}{2} + \frac{\chi_j \chi_i^*}{2} + \sum_{\alpha} \sigma_{i\alpha} \sigma_{j\alpha} \right)^2} \right].$$

Trabalhando um pouco no expoente, reorganizando os termos comuns e fazendo algumas transformações de Hubbard-Stratonovich³ para linearizar a exponencial, chegamos a expressão

$$Z(\{h\}) = \left[\int \int \frac{N}{2\pi} dx_1 dx_2 \right] \left[\int \int \frac{N}{2\pi} dq ds \right] \left[\int \int \frac{d\theta_1^* d\theta_1 d\theta_2^* d\theta_2}{N^2} \right] \times \\ \times e^{-N \left(\frac{x_1^2 + x_2^2}{2} + q^2 + s^2 + \theta_1^* \theta_1 + \theta_2^* \theta_2 - \Lambda \right)}$$

onde

$$e^{N\Lambda} = \int \prod_i d\chi_i^* d\chi_i \frac{d\sigma_{i1} d\sigma_{i2}}{\pi} e^{\sum_{\alpha} h_{i\alpha} \sigma_{i\alpha} - \mu (\chi_i^* \chi_i + \sum_{\alpha} \sigma_{i\alpha} \sigma_{i\alpha}) + \frac{J\beta}{\sqrt{2}} \sum_{\alpha} x_{\alpha} \sigma_{i\alpha}^2} \times \\ \times e^{\sqrt{2} J \beta q \sigma_{i1} \sigma_{i2} + \frac{iJ\beta}{\sqrt{2}} s \chi_i^* \chi_i - \frac{J\beta}{\sqrt{2}} \sum_{\alpha} (\theta_{\alpha}^* \chi_i \sigma_{i\alpha} + \chi_i^* \sigma_{i\alpha} \theta_{\alpha})}.$$

Então, fazendo uso de super matrizes para calcular $e^{N\Lambda}$, negligenciando os termos termodinamicamente inexpressivos e lembrando que as integrais nas variáveis de Grassmann são não nulas apenas se possuem termos do tipo $\phi \phi^*$ ou $\phi^* \phi^4$, ficamos com a expressão

³ Transformação usando variáveis de Grassmann: $e^{\frac{\eta^* \eta}{N}} = \int \frac{d\theta^* d\theta}{N} e^{-(N\theta^* \theta + \theta^* \eta + \eta^* \theta)}$

⁴ ver [4]

$$\begin{aligned}
Z(\{h\}) &= \int \int \int \int \int \int \frac{dx_1 dx_2 dq ds d\theta_1^* d\theta_1 d\theta_2^* d\theta_2}{2\pi^2} e^{-N \left\{ \frac{x_1^2 + x_2^2}{2} + q^2 + s^2 + \theta_1^* \theta_1 + \theta_2^* \theta_2 \right\}} \times \\
&\times e^{-N \left\{ -\frac{\sqrt{2}}{4\beta J N} \sum_i \tilde{h}_i^\dagger \tilde{W}^{-1} \tilde{h}_i - \frac{1}{2} \ln(2) + \frac{1}{2} \ln(|\tilde{M}|) - \ln(A_s) \right\}} \times \\
&\times e^{-N \left\{ \frac{1}{2} \ln \left[1 + \frac{3}{2} \frac{\theta_1^* \theta_1 \theta_2^* \theta_2}{|\tilde{M}| A_s^2} - \frac{q}{|\tilde{M}| A_s^2} (\theta_1^* \theta_2 + \theta_2^* \theta_1) - \frac{A_1 \theta_2^* \theta_2}{|\tilde{M}| A_s^2} - \frac{A_2 \theta_1^* \theta_1}{|\tilde{M}| A_s^2} \right] \right\}}
\end{aligned}$$

com

$$\begin{aligned}
A_\alpha &= \frac{\sqrt{2}}{J\beta} \mu - x_\alpha = z - x_\alpha \quad \alpha = 1, 2 \\
A_s &= \frac{\sqrt{2}}{J\beta} \mu - is = z - is \\
\tilde{M} &= \begin{bmatrix} A_2 & -q \\ -q & A_1 \end{bmatrix} \\
\tilde{W} &= \begin{bmatrix} A_1 - \frac{1}{A_s} \theta_1^* \theta_2 & -q - \frac{\theta_1^* \theta_2}{2A_s} - \frac{\theta_2^* \theta_1}{2A_s} \\ -q - \frac{\theta_1^* \theta_2}{2A_s} - \frac{\theta_2^* \theta_1}{2A_s} & A_2 - \frac{1}{A_s} \theta_2^* \theta_2 \end{bmatrix} \\
\tilde{h}_i &= \begin{bmatrix} h_{i1} \\ h_{i2} \end{bmatrix}.
\end{aligned}$$

Integrando nas variáveis θ_1 , θ_1^* , θ_2 e θ_2^* obtemos

$$Z(\{h\}) = \int \int \int \int dx_1 dx_2 dq ds \frac{N^2}{2\pi^2} \left| 1 - \frac{\tilde{M}^{-1}}{2A_s} \right| e^{-NG + \frac{\sqrt{2}}{4\beta J} \sum_i \tilde{h}_i^\dagger \tilde{M} \tilde{h}_i}$$

com

$$\mathcal{G} = \frac{x_1^2 + x_2^2}{2} + q^2 + s^2 - \frac{1}{2} \ln(2) + \frac{1}{2} \ln \left[|\tilde{M}| \right] - \ln(A_s).$$

Não é possível calcular essa integral exatamente, então utilizamos o método do ponto de sela para calcular um valor aproximado, que no limite termodinâmico é o valor exato. As soluções de ponto de sela são

$$\begin{aligned}
\bar{x}_1 &= \frac{1}{2 \left| \tilde{M} \right| + 1} z \\
\bar{x}_2 &= \bar{x}_1 \\
\bar{q} &= \frac{\bar{q}}{2 \left| \tilde{M} \right|} \\
i\bar{s} &= \frac{z}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{z^2 - 2}.
\end{aligned}$$

De $i\bar{s}$ obtemos $z_c = \sqrt{2}$, que dá o valor crítico de μ para qual a condição esférica vale. Para

valores de temperatura menores que J , z permanece constante e igual a $\sqrt{2}$, deixando assim de valer a condição esférica.

Notamos que a única solução para \bar{q} é $\bar{q} = 0$. Esse fato faz com que as réplicas $\alpha = 1, 2$ se desacoplem. Para a condição esférica, obtemos

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\beta J + \frac{1}{\beta J} \right] \quad z = \frac{\sqrt{2}}{\beta J} \mu$$

e para a energia livre

$$\beta F = \begin{cases} -\frac{1}{4}\beta J^2 - \frac{1}{2}[1 + \ln(2)] & T > T_c \\ -\beta J + \frac{1}{2} \ln\left(\frac{\beta J}{2}\right) + \frac{1}{4} & T < T_c \end{cases}$$

que leva a uma entropia logicamente divergente a baixas temperaturas dada por

$$S(T) \approx -k_B \ln\left(\frac{J}{2k_B T}\right)$$

e susceptibilidade

$$\chi = \frac{\sqrt{2}}{J} (\bar{x} - \bar{q}) = \begin{cases} \beta & T > T_c \\ \frac{1}{J} & T < T_c \end{cases}$$

onde acreditamos haver um erro de grafia na energia livre no artigo de Kosterlitz *et al* [12], pois apenas na forma apresentada acima encontramos uma entropia logicamente divergente a baixas temperaturas.

O fato de $\bar{q} = 0$ desacoplar as réplicas leva-nos a uma característica muito interessante do modelo esférico. $Z(\{h\})$ reduz-se a função de partição para apenas duas replicas desacopladas para todas as temperaturas, isto é, poderíamos ter feito o cálculo do modelo usando a aproximação recozida

$$\beta F = -\ln \langle Q(\mu) \rangle_{CA} - \mu$$

ao invés do usual tratamento temperado

$$\beta F = -\langle \ln[Q(\mu)] \rangle_{CA} - \mu.$$

3.2 Modelo Quântico

Apresentamos aqui dois trabalhos anteriores em vidros de spin quântico [5, 13]. Devemos prestar especial atenção ao sistema tratado, e aos resultados obtidos, pois esses são parâmetros de comparação direta com nosso trabalho apresentado posteriormente.

3.2.1 O Modelo Esférico Quântico de Vidro de Spin

Na falta de vidros de spin que não apresentam características não físicas, como entropia negativa, Shukla e Singh [5] introduziram esse modelo mostrando que seus resultados apresentam características físicas aceitáveis (em especial, uma entropia que vai a zero, quando a temperatura cai a zero, um dos principais problemas na teoria clássica de vidros de spin).

O trabalho consiste em considerar uma coleção de spins esféricos [8], com interações de longo alcance, cujo Hamiltoniano é dado por

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2I} - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \mathcal{J}_{ij} s_i s_j + \mu \sum_i s_i^2$$

onde I é o “momentum de inércia” dos spins, \mathcal{J}_{ij} é a matriz de elementos aleatórios com distribuição gaussiana de média zero, μ é o potencial químico. Os operadores de spin s_i são todos na direção de quantização, de modo que eles todos comutam entre si, e o caráter quântico do sistema se dá pela álgebra dos operadores p com os s , dada pela relação de comutação

$$[s_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}.$$

Shukla e Singh resolvem o modelo usando as conhecidas propriedades das matrizes aleatórias. Primeiro, diagonaliza-se a matriz \mathcal{J}_{ij} pela transformação

$$\sum_i \mathcal{J}_{ij} \phi_\lambda(i) = J_\lambda \phi_\lambda(i)$$

e usando também

$$\begin{aligned} \sum_i s_i \phi_\lambda(i) &= s_\lambda \phi_\lambda(i) \\ \sum_i p_i \phi_\lambda(i) &= p_\lambda \phi_\lambda(i) \end{aligned}$$

obtém-se o Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \sum_\lambda \frac{p_\lambda^2}{2I} + \sum_\lambda \left(\mu - \frac{1}{2} J_\lambda \right) s_\lambda^2$$

que é um Hamiltoniano de oscilador harmônico, de frequência $\omega_\lambda = \sqrt{\frac{2\mu - J_\lambda}{I}}$, podendo ser escrito na forma diagonal

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_\lambda \left(\hat{n}_\lambda + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_\lambda$$

onde \hat{n} é o operador número de ocupação, cujos autovalores são dados, na representação de n pela equação de autovalores

$$\hat{n} |n\rangle = n |n\rangle, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Deste modo, é fácil calcular exatamente a função de partição

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} e^{\beta \left\{ \sum_{\lambda} (n_{\lambda} + \frac{1}{2}) \hbar \omega_{\lambda} \right\}}$$

e a energia livre por spin

$$\mathcal{F} = \frac{1}{N\beta} \sum_{\lambda} \ln \left[2 \sinh \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_{\lambda} \right) \right]$$

com $\beta = \frac{1}{k_B T}$, e a soma pode ser trocada por uma integral usando a distribuição para os auto-valores da matriz aleatória, que é dada por [14, 15]

$$P(J_{\lambda}) = \frac{N}{2\pi\sigma^2} \sqrt{(2\sigma)^2 - J_{\lambda}^2} M.$$

A condição esférica obtida por eles é

$$\sum_{\lambda} \left(\frac{\hbar}{I\omega_{\lambda}} \right) \left\{ \frac{1}{2} + [e^{\beta \hbar \omega_{\lambda}} - 1]^{-1} \right\} = N.$$

Shukla e Singh mostram que, para $\frac{4}{3\pi} \sqrt{\frac{\hbar^2}{I\mu}} = 1$, isto é, $\sqrt{\frac{\hbar^2}{I\mu}} = \frac{3\pi}{4} \approx 2.356$ para $\hbar = 1$ e $\mu = 1$, temos um valor crítico para $\frac{1}{T} \approx 5.55$ onde a transição de fase ocorre a temperatura zero, ou seja, não há transição de fase para valores de $\frac{1}{T}$ maiores que 5.55. Também calculam a entropia

$$\mathcal{S} = \frac{1}{N} k_B \sum_{\lambda} \left\{ \frac{1}{2} \beta \hbar \omega_{\lambda} \coth \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_{\lambda} \right) - \ln \left[2 \sinh \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_{\lambda} \right) \right] \right\}$$

que, expandindo para baixas temperaturas obtém-se

$$\mathcal{S} \approx \frac{8}{45} k_B \left(\frac{\pi k_B T}{\mu} \sqrt{\frac{I\mu}{\hbar^2}} \right)^3 + \dots$$

que mostra um resultado de entropia igual a zero, para temperatura nula.

3.2.2 O Modelo M-vetorial de Rotores Quânticos: Cálculo no limite $M \rightarrow \infty$

J. Ye, S. Sachdev e N. Read introduziram mais tarde o modelo M -vetorial quântico para o vidro de spin [13]. O modelo consiste em tratar uma coleção de spins M -vetoriais, com interações de longo alcance, descritos pelo Hamiltoniano

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{g}{2M} \sum_i \hat{L}_i^2 + \frac{M}{\sqrt{N}} \sum_{i < j} \mathcal{J}_{ij} \hat{n}_i \cdot \hat{n}_j, \quad \hat{n}_i^2 = 1$$

onde $n_{i\mu}$ são as M componentes de um rotor unitário \hat{n}_i no sítio i , $L_{i\mu\nu}$ ($\mu < \nu$, $\mu, \nu = 1, \dots, M$) são as $M(M-1)/2$ componentes do gerador de momentum angular \hat{L}_i no espaço de rotores, e \mathcal{J}_{ij} é a matriz com elementos aleatórios, cuja distribuição de probabilidades para cada elemento é dada por $P(\mathcal{J}_{ij}) \sim e^{-\frac{\mathcal{J}_{ij}^2}{2J^2}}$. O caráter quântico do sistema é dado pela relação de comutação

$$[L_{i\mu\nu}, n_{j\sigma}] = i\delta_{ij} (\delta_{\mu\sigma} n_{j\nu} - \delta_{\nu\sigma} n_{j\mu})$$

e $L_{i\mu\nu}$ satisfaz a relação de comutação do operador momentum angular em M dimensões.

Ye *et al* calculam as propriedades do sistema usando o método das réplicas no limite esférico ($M \rightarrow \infty$ [16]), e obtém um valor crítico para $g \approx 5,55$ em $T = 0$. Também mostram em seu artigo [13] o diagrama de fase, ou seja, o gráfico de T em função de g .

Note que a relação entre g e I nos trabalhos [13] e [5] é dada pela simples equação $g = \frac{1}{I}$, com $\hbar = k_B = 1$.

4 *Modelo Esférico Quântico na aproximação de Recozimento*

Neste capítulo, apresentamos uma solução para o problema do modelo esférico quântico de um vidro de spin usando a propriedade do modelo esférico de Berlin e Kac [8] descoberta em um trabalho anterior de A. Theumann [3], e discutida anteriormente em 3.1.2. Mostramos que o modelo apresenta a transição de fase usual no limite clássico, e uma transição puramente quântica a temperatura zero, onde as flutuações quânticas jogam o papel das flutuações térmicas na fase paramagnética.

Este capítulo está dividido em 2 partes:

- Introdução: fazemos breve introdução sobre o método usado para o cálculo do modelo e uma discussão sobre o modelo quântico de vidros de spin.
- O cálculo: apresentamos as principais etapas para a solução do modelo proposto.

Para tornar a leitura do capítulo mais fluida, os passos intermediários dos cálculos analíticos foram postos a parte em 3 apêndices (A, B e C), os programas de computador utilizados para o cálculo numérico das expressões para a energia livre, a temperatura crítica, o potencial químico e a entropia estão no apêndice D.

4.1 Introdução

Como já vimos nos capítulos anteriores, tratar um vidro de spin como um sistema recozido nos leva a física errada, pois devemos considerar que as impurezas não flutuam com a temperatura.

Mostramos também o trabalho de A. Theumann [3], onde aprendemos, usando super álgebra [4] que, ao tratarmos o vidro de spin esférico usando essa técnica, a função de partição se desacopla em duas réplicas idênticas da própria função, o que significa

que para esse sistema podemos fazer uma abordagem recozida, isto é, calcular a média configuracional da função de partição e depois tomar seu logaritmo para obter a energia livre.

É importante ressaltar que a utilização da média recozida, a princípio, é válida apenas no modelo esférico de campo médio, e que apresentamos ela, aqui, baseada no trabalho citado anteriormente.

Os vidros de spin quânticos são interessantes pois notamos uma transição puramente quântica para um valor crítico do momento de inércia I introduzido no Hamiltoniano, onde a transição ocorre com temperatura crítica igual a zero. Nesse regime, o que rege o caráter paramagnético do sistema são as flutuações quânticas, e não mais as flutuações térmicas. Para $I \rightarrow \infty$ recuperamos exatamente o modelo clássico de Kosterlitz *et al* [12].

No modelo, consideramos uma coleção de rotores quânticos [5, 13] sujeitos a condição esférica, que interagem de forma aleatória uns com os outros. Consideramos ainda que essa interação é de longo alcance (campo médio). O campo externo é introduzido no Hamiltoniano, e os cálculos para a temperatura crítica, a condição esférica, a energia livre e a entropia são feitos para campo nulo.

4.2 O cálculo

Partindo do Hamiltoniano

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2I} - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \mathcal{J}_{ij} \hat{s}_i \hat{s}_j - \sum_{i=1}^N H_i \hat{s}_i + \mu \sum_{i=1}^N \hat{s}_i^2$$

onde \hat{p}_i é o operador momentum $-i\hbar \frac{\partial}{\partial s}$, I é o momento de inércia da partícula, \mathcal{J}_{ij} é uma matriz simétrica de elementos aleatórios distribuídos de acordo com a distribuição de probabilidades

$$P(\mathcal{J}_{ij}) = \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} e^{-\frac{N}{2J^2} \mathcal{J}_{ij}^2} \quad (4.1)$$

que representa a interação entre os spins i e j , \hat{s} é o operador de posição do rotor, H_i é um campo auxiliar aplicado ao sítio i e μ é o potencial químico. A álgebra que define o caráter quântico do sistema é

$$[\hat{s}_i, \hat{p}_j] = -i\hbar \delta_{ij}.$$

É importante lembrar que os operadores de spin aqui são todos da direção de quantização, isto é, o índice indica o sítio do spin, de modo que a relação de comutação entre

dois “operadores de spin” em sítios diferentes é dada por

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = 0.$$

Com o Hamiltoniano, construímos a função de partição no ensemble grande canônico

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \int \prod_{i=1}^N ds_i(s_1 \dots s_N | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} | s_1 \dots s_N) \\ &= \int \prod_{i=1}^N ds_i(s_1 \dots s_N | e^{-\beta \left[\sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2I} - \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathcal{J}_{ij} \hat{s}_i \hat{s}_j - \sum_i H_i \hat{s}_i + \mu \sum_i \hat{s}_i^2 \right]} | s_1 \dots s_N). \end{aligned}$$

Usando o método de Feynman apresentado no capítulo 1, chegamos na seguinte expressão, após fazermos os cálculos que estão apresentados no *Apêndice A*

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \int_{s_i(0)=s_i(\beta\hbar)} \mathcal{D}[s_1(\tau) s_2(\tau) \dots s_N(\tau)] e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[\sum_i \frac{I}{2} \left(\frac{ds_i(\tau)}{d\tau} \right)^2 - \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathcal{J}_{ij} s_i(\tau) s_j(\tau) \right]} \times \\ &\quad \times e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_0}^{\tau_f} d\tau \left[-\sum_i H_i s_i(\tau) + \mu \sum_i s_i^2(\tau) \right]}. \end{aligned}$$

Agora calculamos a média configuracional dessa função, já que estamos considerando um sistema recozido. Usando a distribuição para as variáveis aleatórias de interação dada por (4.1), calculamos a média recozida

$$\langle \mathcal{Z} \rangle_{ca} = \int \prod_{(ij)} d\mathcal{J}_{ij} \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} e^{-\frac{N}{2J^2} \mathcal{J}_{ij}^2} \mathcal{Z}$$

que, fazendo os cálculos apresentados no *Apêndice A*, com $\hbar = k_B = 1$, resulta em

$$\langle \mathcal{Z} \rangle_{ca} = \prod_{n=0}^{\infty} \mathcal{N} \int dQ(\omega_n) e^{-N \left\{ Q(\omega_n)^2 - \frac{\beta H^*(\omega_n) H(\omega_n)}{I\omega_n^2 + 2\mu - 2JQ(\omega_n)} + \ln[\beta(I\omega_n^2 + 2\mu - 2JQ(\omega_n))] \right\}}.$$

Essa integral não pode ser calculada analiticamente, por isso usamos o método do ponto de sela para calcular o valor aproximado da integral. É importante lembrar que, no limite termodinâmico, esse método dá o valor exato da integral. Definindo

$$\mathcal{M} = \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ Q(\omega_n)^2 - \frac{\beta H^*(\omega_n) H(\omega_n)}{I\omega_n^2 + 2\mu - 2JQ(\omega_n)} + \ln[\beta(I\omega_n^2 + 2\mu - 2JQ(\omega_n))] \right\}$$

e fazendo os campos auxiliares H_i iguais a zero, teremos as equações de ponto de sela

$$\frac{\delta \mathcal{M}}{\delta Q(\omega_n)} = 2Q(\omega_n) - \frac{2\beta J}{\beta [I\omega_n^2 + 2\mu - 2JQ(\omega_n)]} = 0$$

cujas soluções, que estão detalhadamente desenvolvidas no *Apêndice A*, são dadas por

$$Q(\omega_n) = \frac{1}{4J} (I\omega_n^2 + 2\mu) + \frac{1}{4J} \sqrt{(I\omega_n^2 + 2\mu)^2 - 8J^2}.$$

Antes de calcular a energia livre, faça o cálculo da condição esférica

$$-\frac{\partial}{\partial \beta \mu} (\beta \Omega) = N$$

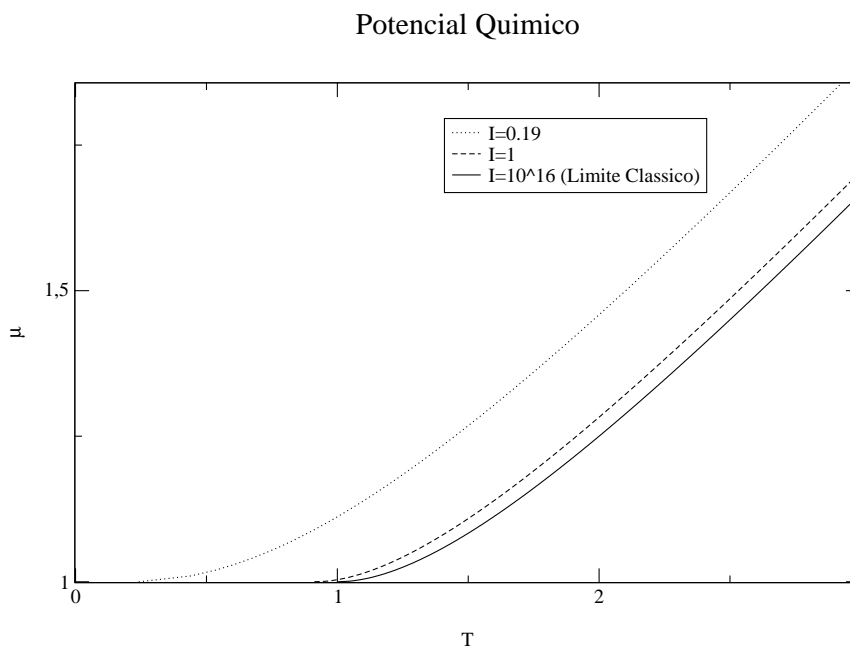
pois é ela que nos dirá a temperatura crítica para cada valor de I . Note que primeiro calculamos o grande potencial termodinâmico Ω , para depois fazer

$$\beta \mathcal{F} = \beta \Omega - \beta N \mu.$$

Fazendo o cálculo apresentado no *Apêndice B*, obtemos para a condição esférica (eq. (6.14))

$$\frac{1}{4\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \coth\left(\frac{\beta x}{2}\right) \sqrt{8J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} = 1 \quad (4.2)$$

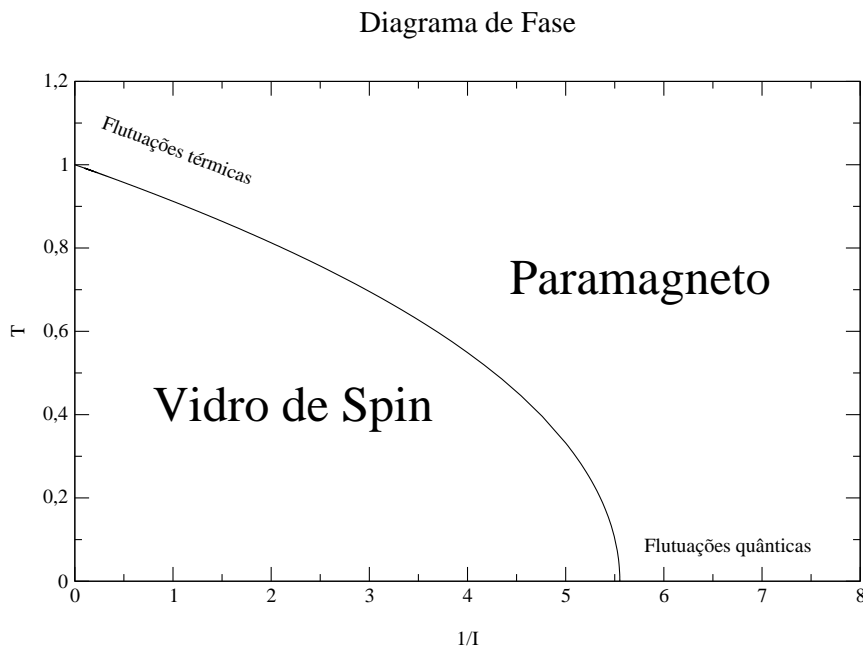
com $L_+ = \sqrt{2\mu + 2\sqrt{2}J}$ e $L_- = \sqrt{2\mu - 2\sqrt{2}J}$. O gráfico abaixo mostra o comportamento da função $\mu(T)$ para alguns valores do parâmetro I indicados no próprio gráfico, entre eles $I = 10^{16}$, que reproduz o limite clássico. O gráfico foi obtido fazendo $J = \frac{1}{\sqrt{2}}$, através do programa apresentado no *Apêndice D*.



Note que, para $\mu = \sqrt{2}J$, o limite inferior da integral (4.2) é zero. Se $\mu < \sqrt{2}J$, a

integral (4.2) deixa de ser real, o que torna o sistema não físico. A temperatura para esse valor de μ é a de transição (temperatura crítica), e para valores menores, μ se mantém constante e igual a $\sqrt{2}J$ [8]. Note que o valor de μ na transição é único, isto é, igual para qualquer I . Entretanto, o valor para a temperatura crítica vai ficando menor quanto menor o valor de I .

Fazendo $J = \frac{1}{\sqrt{2}}$ (isto é, $\mu_c = \sqrt{2}J = 1$), e μ fixo em seu valor crítico, varremos os valores de temperatura e I , obtemos o seguinte gráfico para o diagrama de fase. Escolhemos esse valor para J para obtermos o limite clássico correto para $I \rightarrow \infty$.



O gráfico mostra a fronteira entre a fase de vidro de spin com a fase paramagnética. A linha $1/I = 0$ representa o limite clássico do vidro de spin. Note que para um valor crítico de $I \approx 5.5 \dots$ (que concorda com os resultados apresentados anteriormente [5, 13], devemos tomar cuidado que, em [13] $g = \frac{1}{I}$), a temperatura crítica para a transição é zero. Nessa região temos uma transição de fase puramente quântica, pois ela ocorre devido a competição entre as interações e flutuações quânticas, e não entre as flutuações térmicas e as interações. O diagrama de fase apresentado aqui está de acordo com os resultados conhecidos, cuja obtenção foi feita usando o método de réplicas em um sistema temperado [13].

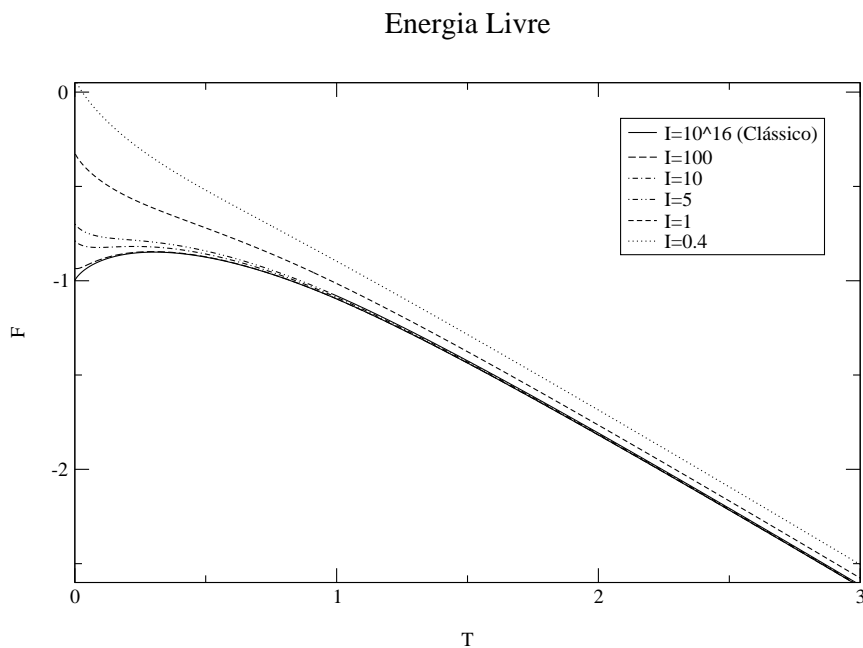
Para o cálculo da energia livre, devemos fazer a soma

$$\beta\Omega = \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ Q(\omega_n)^2 - \frac{\beta H^*(\omega_n)H(\omega_n)}{I\omega_n^2 + 2\mu - 2JQ(\omega_n)} + \ln [\beta (I\omega_n^2 + 2\mu - 2JQ(\omega_n))] \right\}$$

onde $Q(\omega_n)$ deve ser substituído por seus valores no ponto de sela calculado anteriormente. Usamos o procedimento de Poisson, que consiste em levar a soma ao plano complexo, em forma de uma integral em um contorno (apresentado no *Apêndice C*). Obtemos a seguinte expressão para a energia livre (eq. (6.20) *Apêndice C*)

$$\beta\mathcal{F} = \frac{1}{2\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \ln \left[\sinh \left(\frac{\beta x}{2} \right) \right] \sqrt{8J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} I dx - \ln \left(\frac{2\beta}{I} \right) - \mu.$$

Graficamente



Aqui obtemos, para $I = 10^{16}$ o limite clássico para a energia livre, apresentados em [3, 12].

Com a energia livre, podemos calcular a entropia do sistema, que é dada por

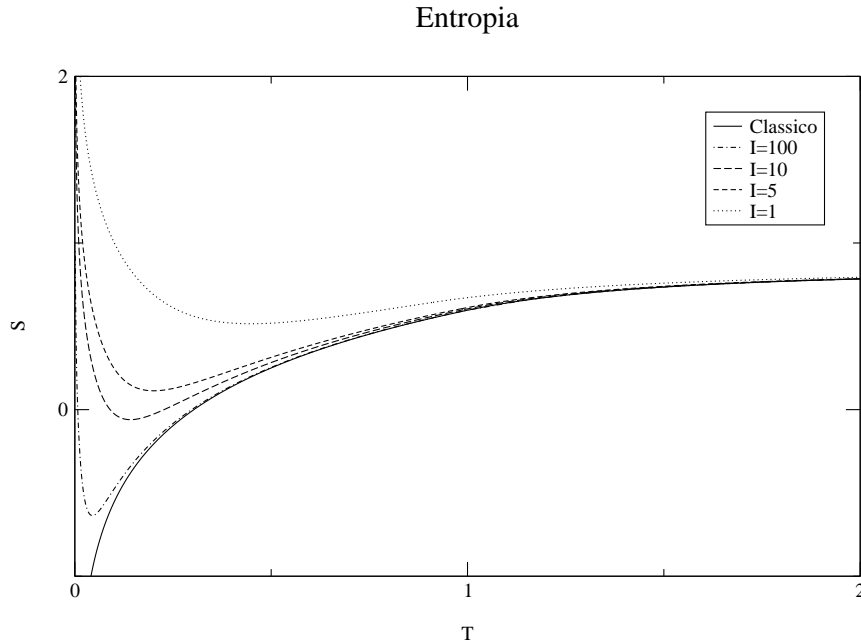
$$\mathcal{S} = -\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial T}$$

resultando, após um cálculo rápido e simples

$$\begin{aligned} \mathcal{S} = & \frac{1}{2\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} Ix \sqrt{8J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} \left\{ \frac{\beta x}{2} \coth \left(\frac{\beta x}{2} \right) - \ln \left[\sinh \left(\frac{\beta x}{2} \right) \right] \right\} dx + \\ & + \frac{1}{2} \ln \left(\frac{2\beta}{I} \right) - \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Note a divergência para $+\infty$ quando $T \rightarrow 0$. Isso é esperado, pois o modelo esfê-

rico apresenta essa patologia [3, 8, 12]. Esse resultado bate de frente com os resultados apresentados por Shukla e Singh ([5]), que apresentam uma entropia que vai a zero, em $T = 0$.



Acreditamos que nosso resultado é correto, pois quando trabalhamos com o modelo esférico esperamos que este mantenha sua patologia na entropia a baixas temperaturas [3, 8, 12]. Além disso, descobrimos que, ao calcular a energia livre, Shukla e Sing não levaram em conta um importante termo: o termo de normalização da função de partição. Como a entropia depende da derivada parcial da energia livre em relação a temperatura, o termo de normalização entra com uma contribuição importante tanto para energia livre quanto para a entropia, pois ele depende da temperatura. Quando calculamos a constante de normalização corretamente, os limites clássicos bem conhecidos são reobtidos, porém a entropia se torna divergente a baixas temperaturas.

5 Conclusão

No estudo do modelo esférico quântico recozido observamos que de fato o modelo esférico permite tal abordagem, podendo ser extraídas as mesmas informações.

A transição de fase se dá para um valor constante de $\mu = \sqrt{2}J$ para qualquer I , e a temperatura crítica diminui quando diminuimos I . No limite clássico obtemos para a temperatura crítica $T = \sqrt{2}J \equiv J_{cl}$, onde J_{cl} representa o valor de J nas teorias clássicas apresentadas em [3, 9, 12].

No cálculo do diagrama de fase, obtemos os mesmos resultados apresentados em [13], onde eles usam o método das réplicas e consideram um sistema temperado. Obtemos o mesmo valor crítico para I de ambas as publicações ([5, 13]) para a qual a transição de fase é puramente quântica, pois ela ocorre a temperatura zero. Nesta região, a transição acontece devido a competição entre as flutuações quânticas (dadas pelo parâmetro I , ao invés de flutuações térmicas dadas por $k_B T$) e as interações entre os spins.

Quando calculamos a energia livre, obtemos no limite $I \rightarrow \infty$ exatamente a energia livre conhecida de teorias clássicas para vidros de spin esféricos [3, 12].

No cálculo da entropia, obtivemos divergência para baixas temperaturas ($\mathcal{S} \rightarrow \infty$ quando $T \rightarrow 0$), o que é esperado, já que essa patologia é bem conhecida para o modelo esférico [3, 8, 12], em desacordo com o resultado anterior apresentado por Shukla e Singh [5], onde eles obtêm uma entropia mais física, isto é, entropia zero a temperatura zero.

À primeira vista a obtenção de uma entropia divergente a baixas temperaturas seria um erro grande frente ao resultado anteriormente obtido por Shukla e Singh. Ocorre que, no trabalho anterior, os autores não levaram em conta o termo de normalização da função de partição. Essa constante contribui significativamente no comportamento da energia livre e da entropia, pois ela depende da temperatura. Calculando-a corretamente, reobtemos os limites clássicos corretos, porém divergência na entropia a temperatura zero no caso quântico. Embora seja divergente, obtemos a entropia estritamente positiva para valores de I menores que 10.

6 Apêndices

Apêndice A: Cálculo explícito de \mathcal{Z} e $\langle \mathcal{Z} \rangle_{ca}$

Este apêndice tem por objetivo mostrar o cálculo explícito da função de partição \mathcal{Z} , bem como sua média annealed $\langle \mathcal{Z} \rangle_{ca}$. É importante ressaltar que essa parte foi escrita baseada nos textos manuscritos originais, por isso, talvez seja preciso um pouco de atenção do leitor para acompanhar o raciocínio e assim acompanhar os cálculos.

O Hamiltoniano do sistema tratado é dado por

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2I} - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \mathcal{J}_{ij} \hat{s}_i \hat{s}_j - \sum_{i=1}^N H_i \hat{s}_i + \mu \sum_{i=1}^N \hat{s}_i^2$$

onde \hat{p}_i é o operador momentum $-i\hbar \frac{\partial}{\partial s}$, I é o momentum de inércia da partícula, \mathcal{J}_{ij} é uma matriz simétrica de elementos aleatórios com elementos -1 ou 1 representando a interação entre as partículas i e j , \hat{s} é o operador de spin, H_i é um campo auxiliar aplicado ao sítio i e μ é o potencial químico. A álgebra que define o caráter quântico do sistema é dada por

$$[\hat{s}_i, \hat{p}_j] = -i\hbar \delta_{ij}, \text{ e } [\hat{s}_i, \hat{s}_j] = 0.$$

Agora, escrevemos explicitamente a função de partição \mathcal{Z} que desejamos calcular

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \int \prod_{i=1}^N ds_i (s_1 \dots s_N | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} | s_1 \dots s_N) \\ &= \int \prod_{i=1}^N ds_i (s_1 \dots s_N | e^{-\beta \left[\sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2I} - \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathcal{J}_{ij} \hat{s}_i \hat{s}_j - \sum_i H_i \hat{s}_i + \mu \sum \hat{s}_i^2 \right]} | s_1 \dots s_N). \end{aligned}$$

Seguindo o espírito de Feynman [6, 7] mostrado no capítulo um, isto é, subdividindo o sistema em tempos pequenos, cálculo o propagador

$$\mathcal{U}_{n,n-1} = \langle s_{1\tau_n} | \langle s_{2\tau_n} | \dots \langle s_{N\tau_n} | e^{-\frac{\epsilon}{\hbar} \left[\sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2I} - \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathcal{J}_{ij} \hat{s}_i \hat{s}_j - \sum_i H_i \hat{s}_i + \mu \sum \hat{s}_i^2 \right]} | s_{1\tau_{n-1}} \rangle | s_{2\tau_{n-1}} \rangle \dots | s_{N\tau_{n-1}} \rangle$$

introduzo a identidade

$$\int \prod_{i=1}^N dp_i |p_{1\tau_n} \dots p_{N\tau_n}\rangle \langle p_{1\tau_n} \dots p_{N\tau_n}| = 1$$

a esquerda do operador exponencial, e se considerarmos o parâmetro ε muito pequeno, podemos substituir o operador exponencial por sua ordem normal [7], isto é

$$e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} \left[\sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2I} - \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathcal{J}_{ij} \hat{s}_i \hat{s}_j - \sum_i H_i \hat{s}_i + \mu \sum_i \hat{s}_i^2 \right]} \longrightarrow e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2I}} e^{\frac{1}{2} \frac{\varepsilon}{\hbar} \sum_{ij} \mathcal{J}_{ij} \hat{s}_i \hat{s}_j} e^{\frac{\varepsilon}{\hbar} \sum_i H_i \hat{s}_i} e^{-\frac{\varepsilon \mu}{\hbar} \sum_i \hat{s}_i^2}$$

então

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{n,n-1} &= \int \prod_{\alpha=1}^N dp_\alpha \langle s_{1\tau_n} | p_{1\tau_n} \rangle \dots \langle s_{N\tau_n} | p_{N\tau_n} \rangle \times \\ &\quad \times (p_{1\tau_n} \dots p_{N\tau_n} | e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2I}} e^{\frac{1}{2} \frac{\varepsilon}{\hbar} \sum_{ij} \mathcal{J}_{ij} \hat{s}_i \hat{s}_j} e^{\frac{\varepsilon}{\hbar} \sum_i H_i \hat{s}_i} e^{-\frac{\varepsilon \mu}{\hbar} \sum_i \hat{s}_i^2} | s_{1\tau_{n-1}} \dots s_{N\tau_{n-1}}) \\ &= \int \prod_{\alpha=1}^N \frac{dp_\alpha}{(2\pi\hbar)} e^{\frac{i}{\hbar} \sum_i [(s_{i\tau_n} - s_{i\tau_{n-1}}) \cdot p_{i\tau_n}] - \frac{\varepsilon}{\hbar} \left\{ \sum_i \frac{\hat{p}_{i\tau_n}^2}{2I} - \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathcal{J}_{ij} s_{i\tau_{n-1}} s_{j\tau_{n-1}} - \sum_i H_i s_{i\tau_{n-1}} \right\}} \times \\ &\quad \times e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} \mu \sum_i s_{i\tau_{n-1}}^2}. \end{aligned}$$

Posso calcular a integral em p :

$$\begin{aligned} \prod_{\alpha=1}^N \int \frac{dp_{\alpha\tau_n}}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} (s_{\alpha\tau_n} - s_{\alpha\tau_{n-1}}) \cdot p_{\alpha\tau_n} - \frac{\varepsilon}{\hbar} \frac{p_{\alpha\tau_n}^2}{2I}} &= \prod_{\alpha=1}^N \int \frac{dp_{\alpha\tau_n}}{2\pi\hbar} e^{-\frac{1}{\hbar} \left[\sqrt{\frac{\varepsilon}{2I}} p_{\alpha\tau_n} - \frac{i}{2} \sqrt{\frac{2I}{\varepsilon}} (s_{\alpha\tau_n} - s_{\alpha\tau_{n-1}}) \right]^2} \times \\ &\quad \times e^{-\frac{I}{2\varepsilon} (s_{\alpha\tau_n} - s_{\alpha\tau_{n-1}})^2} \\ &= \left(\frac{I}{2\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} e^{-\frac{I}{2\varepsilon} (s_{\alpha\tau_n} - s_{\alpha\tau_{n-1}})^2}. \end{aligned}$$

Colocando esse resultado no nosso elemento de matriz

$$\mathcal{U}_{n,n-1} = \left(\frac{I}{2\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} \left[\frac{I}{2} \sum_i \left(\frac{s_{i\tau_n} - s_{i\tau_{n-1}}}{\varepsilon} \right)^2 - \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathcal{J}_{ij} s_{i\tau_{n-1}} s_{j\tau_{n-1}} - \sum_i H_i s_{i\tau_{n-1}} + \mu \sum_i s_{i\tau_{n-1}}^2 \right]}.$$

O propagador para um tempo imaginário macroscópico será dado pelo produto dos propagadores acima calculado, isto é

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(s_1 \dots s_N, \tau_0; s_1 \dots s_N, \tau_f) &= (s_{1\tau_0} \dots s_{N\tau_0} | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} | s_{1\tau_f} \dots s_{N\tau_f}) \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{\alpha=1}^N \prod_{\lambda=1}^{M-1} dx_{\alpha\tau_\lambda} \left(\frac{I}{2\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \times \\ &\quad \times e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} \left\{ \frac{I}{2} \sum_i \sum_{\gamma=1}^M \left(\frac{s_{i\tau_\gamma} - s_{i\tau_{\gamma-1}}}{\varepsilon} \right)^2 - \frac{1}{2} \sum_{ij} \sum_{\gamma=1}^M \mathcal{J}_{ij} s_{i\tau_{\gamma-1}} s_{j\tau_{\gamma-1}} \right\}} \times \\ &\quad \times e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} \left\{ -\sum_i \sum_{\gamma=1}^M H_i s_{i\tau_{\gamma-1}} + \mu \sum_i \sum_{\gamma=1}^M s_{i\tau_{\gamma-1}}^2 \right\}} \end{aligned}$$

ou, na notação do formalismo

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(s_1 \dots s_N, \tau_0; s_1 \dots s_N, \tau_f) &= \int_{s(\tau_0)}^{s(\tau_f)} \mathcal{D}[s_1(\tau) s_2(\tau) \dots s_N(\tau)] e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_0}^{\tau_f} d\tau \left[\sum_i \frac{1}{2} \left(\frac{ds_i(\tau)}{d\tau} \right)^2 \right]} \times \\ &\times e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_0}^{\tau_f} d\tau \left[-\frac{1}{2} \sum_{ij} \mathcal{J}_{ij} s_i(\tau) s_j(\tau) - \sum_i H_i s_i(\tau) + \mu \sum_i s_i^2(\tau) \right]}. \end{aligned}$$

A função de partição é definida a ser [7]

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \int_{s_i(0)=s_i(\beta\hbar)} \mathcal{D}[s_1(\tau) s_2(\tau) \dots s_N(\tau)] e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[\sum_i \frac{1}{2} \left(\frac{ds_i(\tau)}{d\tau} \right)^2 - \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathcal{J}_{ij} s_i(\tau) s_j(\tau) \right]} \times \\ &\times e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[-\sum_i H_i s_i(\tau) + \mu \sum_i s_i^2(\tau) \right]}. \end{aligned}$$

Agora que calculamos a função de partição \mathcal{Z} , calculamos $\langle \mathcal{Z} \rangle_{ca}$, onde o sub-índice indica a média configuracional (média sobre os valores de \mathcal{J}_{ij}). Nisso consiste o tratamento annealed (ao invés de $\beta\mathcal{F} = \langle \ln \mathcal{Z} \rangle_{ca}$, que seria o tratamento quenched). Para fazer tal cálculo, considero \mathcal{J}_{ij} distribuído segundo a seguinte função

$$P(\mathcal{J}_{ij}) = \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} e^{-\frac{N}{2J^2} \mathcal{J}_{ij}^2}$$

onde $P(\mathcal{J}_{ij})$ é a distribuição de probabilidade para valores de \mathcal{J}_{ij} , J é uma constante. Então

$$\langle \mathcal{Z} \rangle_{ca} = \int \prod_{(ij)} d\mathcal{J}_{ij} \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} e^{-\frac{N}{2J^2} \mathcal{J}_{ij}^2} \mathcal{Z}$$

onde (ij) indica apenas vizinhos (isto é, conta apenas uma vez o par ij , descontando o par ji). Escrevendo explicitamente

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{Z} \rangle_{ca} &= \int_{s_i(0)=s_i(\beta\hbar)} \mathcal{D}[s_1(\tau) s_2(\tau) \dots s_N(\tau)] e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[\sum_i \frac{1}{2} \left(\frac{ds_i(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \mu \sum_i s_i^2(\tau) - \sum_i H_i s_i(\tau) \right]} \times \\ &\times \int \left[\prod_{(ij)} d\mathcal{J}_{ij} \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} e^{-\frac{N}{2J^2} \mathcal{J}_{ij}^2} \right] e^{\frac{1}{2\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \sum_{ij} s_i(\tau) s_j(\tau)}. \end{aligned}$$

Note que apenas o último termo da equação depende dos valores aleatórios \mathcal{J}_{ij} . Trabalhamos então no último termo dessa equação, que eu vou chamar de $I_{\mathcal{J}}$

$$\begin{aligned} I_{\mathcal{J}} &= \int \left[\prod_{(ij)} d\mathcal{J}_{ij} \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} e^{-\frac{N}{2J^2} \mathcal{J}_{ij}^2} \right] e^{\frac{1}{2\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \sum_{ij} s_i(\tau) s_j(\tau)} = \\ &= \int \prod_{(ij)} d\mathcal{J}_{ij} \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} e^{-\frac{N}{2J^2} \mathcal{J}_{ij}^2} \left[e^{\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \sum_{(ij)} s_i(\tau) s_j(\tau)} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_{\mathcal{J}} &= \int \prod_{(ij)} d\mathcal{J}_{ij} \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} e^{-\frac{N}{2J^2} \mathcal{J}_{ij}^2 + \frac{1}{\hbar} \mathcal{J}_{ij} \int_0^{\beta\hbar} d\tau s_i(\tau) s_j(\tau)} = \\
&= \int \prod_{(ij)} d\mathcal{J}_{ij} \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} e^{-\left[\sqrt{\frac{N}{2}} \frac{\mathcal{J}_{ij}}{J} - \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{1}{2N}} J \int_0^{\beta\hbar} d\tau s_i(\tau) s_j(\tau) \right]^2 + \frac{J^2}{2N\hbar} \left(\int_0^{\beta\hbar} d\tau s_i(\tau) s_j(\tau) \right)} = \\
&= e^{\frac{J^2}{2N\hbar} \sum_{(ij)} \left(\int_0^{\beta\hbar} d\tau s_i(\tau) s_j(\tau) \right)^2}.
\end{aligned}$$

Com isso, tenho

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{Z} \rangle_{ca} &= \int_{s_i(0)=s_i(\beta\hbar)} \mathcal{D} [s_1(\tau) s_2(\tau) \dots s_N(\tau)] e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[\sum_i \frac{I}{2} \left(\frac{ds_i(\tau)}{d\tau} \right) + \mu \sum_i s_i^2(\tau) - \sum_i H_i s_i(\tau) \right]} \times \\
&\times e^{\frac{J^2}{2N\hbar^2} \sum_{(ij)} \left(\int_0^{\beta\hbar} s_i(\tau) s_j(\tau) d\tau \right)^2} \quad (6.1)
\end{aligned}$$

O último termo está, digamos, desconfortável. Vamos ver o que pode ser feito. Primeiro, definimos ele a ser

$$T_d = e^{\frac{J^2}{2N\hbar^2} \sum_{(ij)} \left(\int_0^{\beta\hbar} d\tau s_i(\tau) s_j(\tau) \right)^2} = e^{\frac{J^2}{2N\hbar} \sum_{(ij)} \left(\int_0^{\beta\hbar} d\tau s_i(\tau) s_j(\tau) \int_0^{\beta\hbar} d\tau' s_i(\tau') s_j(\tau') \right)}$$

agora, transformando a soma entre vizinhos em soma nos sítios, ficando com

$$T_d = e^{\frac{J^2}{4N\hbar^2} \left\{ \int_0^{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau d\tau' \left[\sum_i s_i(\tau) s_i(\tau') \right]^2 - \sum_i \left(\int_0^{\beta\hbar} s_i^2(\tau) d\tau \right)^2 \right\}}$$

note que o segundo termo do expoente não contribuirá na termodinâmica do sistema, pois ele será de ordem $\frac{1}{N}$. Então, desprezando a parte termodinamicamente irrelevante, tenho

$$T_d = e^{\frac{J^2}{4N\hbar^2} \int_0^{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau d\tau' \left[\sum_i s_i(\tau) s_i(\tau') \right]^2}.$$

Um passo delicado agora. Transformo as integrais do expoente em limite de somas, ou seja

$$\begin{aligned}
T_d &= e^{\frac{J^2}{4N\hbar^2} \lim_{M \rightarrow \infty} \lim_{D \rightarrow \infty} \sum_{\alpha=0}^M \sum_{\lambda=0}^D \varepsilon_\alpha \varepsilon_\lambda \left[\sum_i s_i(\varepsilon_\alpha) s_i(\varepsilon_\lambda) \right]^2} = \\
&= \lim_{D, M \rightarrow \infty} \prod_{\alpha=0}^M \prod_{\lambda=0}^D e^{\frac{J^2}{4N\hbar^2} \varepsilon_\alpha \varepsilon_\lambda \left[\sum_i s_i(\varepsilon_\alpha) s_i(\varepsilon_\lambda) \right]^2}
\end{aligned}$$

onde ε_γ são intervalos de tempo muito pequenos, que vão a zero quando o número de passos (M ou D) tendem a infinito. Aqui, faço uma transformação de Hubbard-Stratonovich para linearizar o expoente, e fico com

$$\begin{aligned}
T_d &= \lim_{D, M \rightarrow \infty} \prod_{\alpha=0}^M \prod_{\lambda=0}^D \int dy(\varepsilon_\alpha, \varepsilon_\lambda) \sqrt{\frac{N}{\varepsilon_\alpha \varepsilon_\lambda \pi}} e^{-\frac{N}{\varepsilon_\alpha \varepsilon_\lambda} y(\varepsilon_\alpha, \varepsilon_\lambda)^2 + \frac{J}{\hbar} y(\varepsilon_\alpha, \varepsilon_\lambda) \sum_i s_i(\varepsilon_\alpha) s_i(\varepsilon_\lambda)} = \\
&= \lim_{D, M \rightarrow \infty} \prod_{\alpha=0}^M \prod_{\lambda=0}^D \int \frac{dy(\varepsilon_\alpha, \varepsilon_\lambda)}{\varepsilon_\alpha \varepsilon_\lambda} \sqrt{\varepsilon_\alpha \varepsilon_\lambda} \sqrt{\frac{N}{\pi}} e^{-\varepsilon_\alpha \varepsilon_\lambda \left\{ N \left(\frac{y(\varepsilon_\alpha, \varepsilon_\lambda)}{\varepsilon_\alpha \varepsilon_\lambda} \right)^2 - \frac{J}{\hbar} \frac{y(\varepsilon_\alpha, \varepsilon_\lambda)}{\varepsilon_\alpha \varepsilon_\lambda} \sum_i s_i(\varepsilon_\alpha) s_i(\varepsilon_\lambda) \right\}}
\end{aligned}$$

agora, definindo a nova variável $Q(\varepsilon_\alpha, \varepsilon_\lambda) \equiv \frac{y(\varepsilon_\alpha, \varepsilon_\lambda)}{\varepsilon_\alpha \varepsilon_\lambda}$ e tomando os limites, fico com a expressão em forma funcional

$$T_d = \int \mathcal{D}[Q(\tau, \tau')] \sqrt{\frac{N}{\pi}} e^{-\int_0^{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau d\tau' [NQ(\tau, \tau')^2 - \frac{J}{\hbar} Q(\tau, \tau') \sum_i s_i(\tau) s_i(\tau')]}.$$

Substituindo essa expressão em (6.1):

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{Z} \rangle_{ca} &= \int_{s_i(0)=s_i(\beta\hbar)} \mathcal{D}[s_1(\tau) s_2(\tau) \dots s_N(\tau)] \mathcal{D}[Q(\tau, \tau')] \sqrt{\frac{N}{\pi}} e^{-\frac{1}{\hbar} \sum_i \left\{ \int_0^{\beta\hbar} \left[\frac{I}{2} \left(\frac{ds_i(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \mu s_i^2(\tau) \right] d\tau \right\}} \times \\ &\times e^{\frac{1}{\hbar} \sum_i \left\{ \int_0^{\beta\hbar} d\tau H_i s_i(\tau) - \int_0^{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau d\tau' [NQ(\tau, \tau')^2 - JQ(\tau, \tau') s_i(\tau) s_i(\tau')] \right\}} = \\ &= \prod_i \int_{s_i(0)=s_i(\beta\hbar)} \mathcal{D}[s_1(\tau) s_2(\tau) \dots s_N(\tau)] \mathcal{D}[Q(\tau, \tau')] \sqrt{\frac{N}{\pi}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \left[\frac{I}{2} \left(\frac{ds_i(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \mu s_i^2(\tau) \right] d\tau} \times \\ &\times e^{\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau H_i s_i(\tau) - \int_0^{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau d\tau' [NQ(\tau, \tau')^2 - JQ(\tau, \tau') s_i(\tau) s_i(\tau')]} . \end{aligned}$$

Olhando para essa expressão, notamos que temos N integrais iguais, então posso tirar o produtório e elevar a integral a potência N . Com isso e, fazendo $\hbar = 1$ temos

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{Z} \rangle_{ca} &= \int_{s_i(0)=s_i(\beta)} \mathcal{D}[Q(\tau, \tau')] \sqrt{\frac{N}{\pi}} e^{-N \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' Q(\tau, \tau')^2} \times \\ &\times \left\{ \int_{s_i(0)=s_i(\beta)} \mathcal{D}[s(\tau)] e^{-\int_0^\beta \left[\frac{I}{2} \left(\frac{ds(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \mu s^2(\tau) - Hs(\tau) \right] d\tau + \int_0^\beta \int_0^\beta JQ(\tau, \tau') s(\tau) s(\tau') d\tau d\tau'} \right\}^N = \\ &= \int_{s_i(0)=s_i(\beta)} \mathcal{D}[Q(\tau, \tau')] \sqrt{\frac{N}{\pi}} e^{-N \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' Q(\tau, \tau')^2} \times \\ &\times e^{-N \left\{ -\ln \left\{ \int_{s_i(0)=s_i(\beta)} \mathcal{D}[s(\tau)] e^{-\int_0^\beta \left[\frac{I}{2} \left(\frac{ds(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \mu s^2(\tau) - Hs(\tau) \right] d\tau + \int_0^\beta \int_0^\beta JQ(\tau, \tau') s(\tau) s(\tau') d\tau d\tau'} \right\}} \right\}} . \quad (6.2) \end{aligned}$$

Não posso resolver tal integral exatamente, então, uso o método de ponto de sela ¹ na variável $Q(\tau, \tau')$, que no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$) é exato. Definindo o funcional

$$\begin{aligned} g[Q(\tau, \tau')] &= \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' Q(\tau, \tau')^2 - \\ &- \ln \left\{ \int \mathcal{D}[x(\tau)] e^{-\int_0^\beta \left[\frac{I}{2} \left(\frac{dx(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \mu x^2(\tau) - Hx(\tau) \right] d\tau + J \int_0^\beta \int_0^\beta Q(\tau, \tau') x(\tau) x(\tau') d\tau d\tau'} \right\} \end{aligned}$$

posso fazer a equação de ponto de sela pela derivação funcional

$$\frac{\delta g}{\delta Q} = 0$$

¹ $\int e^{-Ng(x)} dx \simeq \frac{1}{\sqrt{\det \frac{\delta^2}{\delta x^2} g(x')}} e^{-\beta Ng(x')}$, no limite $N \rightarrow \infty$ esse resultado é exato e x' é a solução de $\frac{\delta g}{\delta x} = 0$

o que dá a seguinte equação:

$$2Q(\tau, \tau') - \frac{\int \mathcal{D}[x(\tau)] \left\{ e^{-\int_0^\beta \left[\frac{1}{2} \left(\frac{ds(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \mu s(\tau)^2 - Hs(\tau) \right] d\tau + J \int_0^\beta \int_0^\beta Q(\tau, \tau') s(\tau) s(\tau') d\tau d\tau'}{\int \mathcal{D}[x(\tau)] e^{-\int_0^\beta \left[\frac{1}{2} \left(\frac{ds(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \mu s(\tau)^2 - Hs(\tau) \right] d\tau + J \int_0^\beta \int_0^\beta Q(\tau, \tau') s(\tau) s(\tau') d\tau d\tau'} \times \right. \\ \left. \times J s(\tau) s(\tau') \right\} = 0$$

Olhando para a fração, percebemos que há um funcional com a forma de uma função de partição, de modo que posso escrever

$$2Q(\tau, \tau') = J \langle s(\tau) s(\tau') \rangle_A = \\ = \frac{\int \mathcal{D}[s(\tau)] e^{-\int_0^\beta \left[\frac{1}{2} \left(\frac{ds(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \mu s(\tau)^2 - Hs(\tau) \right] d\tau + J \int_0^\beta \int_0^\beta Q(\tau, \tau') s(\tau) s(\tau') d\tau d\tau'}{\int \mathcal{D}[s(\tau)] e^{-\int_0^\beta \left[\frac{1}{2} \left(\frac{ds(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \mu s(\tau)^2 - Hs(\tau) \right] d\tau + J \int_0^\beta \int_0^\beta Q(\tau, \tau') s(\tau) s(\tau') d\tau d\tau'}} J s(\tau) s(\tau') = \\ = \frac{\int \mathcal{D}[s(\tau)] e^A J s(\tau) s(\tau')}{\int \mathcal{D}[s(\tau)] e^A} = \frac{\delta^2}{\delta H(\tau) \delta H(\tau')} \ln \int \mathcal{D}[s(\tau)] e^A$$

onde

$$e^A \equiv e^{-\int_0^\beta \left[\frac{1}{2} \left(\frac{ds(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \mu s(\tau)^2 - H(\tau) s(\tau) \right] d\tau + J \int_0^\beta \int_0^\beta Q(\tau, \tau') s(\tau) s(\tau') d\tau d\tau'} \quad (6.3)$$

e o funcional

$$\mathcal{G} \equiv \int \mathcal{D}[s(\tau)] e^{-\int_0^\beta \left[\frac{1}{2} \left(\frac{ds(\tau)}{d\tau} \right)^2 + \mu s(\tau)^2 - Hs(\tau) \right] d\tau + J \int_0^\beta \int_0^\beta Q(\tau, \tau') s(\tau) s(\tau') d\tau d\tau'}. \quad (6.4)$$

Supondo agora simetria frente a translação temporal, isto é, $Q(\tau, \tau') = Q(\tau - \tau')$ e $s(\tau) = s(\tau + \beta)$, posso então fazer a transformada de Fourier desses campos

$$s(\tau) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau} s(\omega_n)$$

onde $\omega_n = \frac{2\pi n}{\beta}$ são as frequências de Matsubara para bósons. Defino também a transformada inversa

$$s(\omega_l) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_l \tau} s(\tau).$$

Quero que $s(\tau) = s^*(\tau)$ ($s(\tau)$ real)

$$s^*(\omega_l) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau e^{-i\omega_l \tau} s(\tau) = s(-\omega_l)$$

ou seja

$$s^*(\omega_l) = s(-\omega_l) = s(\omega_{-l}).$$

A transformada para $Q(\tau - \tau')$ fica

$$Q(\tau - \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n(\tau-\tau')} Q(\omega_n).$$

Para fazer a inversa, redefino $\tau - \tau' \equiv \sigma$

$$Q(\omega_k) = \int_0^\beta d\sigma e^{i\omega_k\sigma} Q(\sigma).$$

Voltando a (6.3), ficamos com a função já transformada

$$e^A = e^{-\frac{I\beta}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \omega_n^2 s^*(\omega_n)s(\omega_n) - \mu\beta \sum_{n=-\infty}^{\infty} s^*(\omega_n)s(\omega_n) + \beta \sum_{n=-\infty}^{\infty} H^*(\omega_n)s(\omega_n)} \times \\ \times e^{+J\beta \sum_{n=-\infty}^{\infty} s^*(\omega_n)s(\omega_n)} Q(\omega_n)$$

e, substituindo em (6.4) temos

$$\mathcal{G} = \mathcal{K} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{n=0}^{\infty} ds(\omega_n) ds^*(\omega_n) e^{-\beta \sum_{n=0}^{\infty} \{I\omega_n^2 |s(\omega_n)|^2 + 2\mu |s(\omega_n)|^2 - H^*(\omega_n)s(\omega_n) - s^*(\omega_n)H(\omega_n)\}} \times \\ \times e^{-\beta \sum_{n=0}^{\infty} \{-J|s(\omega_n)|^2 [Q^*(\omega_n) + Q^*(\omega_n)]\}} \quad (6.5)$$

onde \mathcal{K} é uma constante. Para resolver essa integral, fazemos as seguintes substituições:

$$s(\omega_n) \equiv u(\omega_n) + iv(\omega_n) \\ ds(\omega_n) ds^*(\omega_n) \equiv du(\omega_n) dv(\omega_n) \\ Q(\omega_n) \equiv q_1(\omega_n) + iq_2(\omega_n) \\ H(\omega_n) \equiv h_1(\omega_n) + ih_2(\omega_n).$$

Substituindo em (6.5)

$$\mathcal{G} = \mathcal{K} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{n=0}^{\infty} du(\omega_n) dv(\omega_n) e^{-\beta \{I\omega_n^2 [u(\omega_n)^2 + v(\omega_n)^2] + 2\mu [u(\omega_n)^2 + v(\omega_n)^2]\}} \times \\ \times e^{-\beta \{-2h_1(\omega_n)u(\omega_n) - 2h_2(\omega_n)v(\omega_n) - J[2q_1(\omega_n)]\}} = \\ = \mathcal{K} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{n=0}^{\infty} \left\{ du(\omega_n) e^{-\beta \{ [I\omega_n^2 + 2\mu - 2Jq_1(\omega_n)] u(\omega_n)^2 - 2h_1 u(\omega_n) \}} \times \right. \\ \left. \times dv(\omega_n) e^{-\beta \{ [I\omega_n^2 + 2\mu - 2Jq_1(\omega_n)] v(\omega_n)^2 - 2h_2 v(\omega_n) \}} \right\}$$

que resolvemos facilmente nas variáveis $u(\omega_n)$ e $v(\omega_n)$, pois se tratam de duas integrais

gaussianas, obtendo o resultado

$$\begin{aligned}\mathcal{G} &= \mathcal{K} \prod_{n=0}^{\infty} \left\{ \frac{\pi e^{\frac{\beta H^*(\omega_n) H(\omega_n)}{I\omega_n^2 + 2\mu - 2Jq_1(\omega_n)}}}{\beta [I\omega_n^2 + 2\mu - 2Jq_1]} \right\} = \\ &= \mathcal{K} \prod_{n=0}^{\infty} \left[\pi e^{\left\{ \frac{\beta H^*(\omega_n) H(\omega_n)}{I\omega_n^2 + 2\mu - 2Jq_1(\omega_n)} - \ln[\beta (I\omega_n^2 + 2\mu - 2Jq_1(\omega_n))] \right\}} \right].\end{aligned}$$

Notamos que sobrou apenas a parte real de $Q(\omega_n)$ ($q_1(\omega_n)$), então redefino $Q(\omega_n) \equiv q_1(\omega_n)$. Substituindo esse resultado em (6.2) temos

$$\langle \mathcal{Z} \rangle_{ca} = \prod_{n=0}^{\infty} \mathcal{N} \int dQ(\omega_n) e^{-N \left\{ Q(\omega_n)^2 - \frac{\beta H^*(\omega_n) H(\omega_n)}{I\omega_n^2 + 2\mu - 2JQ(\omega_n)} + \ln[\beta (I\omega_n^2 + 2\mu - 2JQ(\omega_n))] \right\}} \quad (6.6)$$

onde todas as constantes foram colocadas na constante de normalização \mathcal{N} .

Aparte da constante de normalização \mathcal{N} , devo calcular a integral de (6.6), e fazemos isso pelo método de ponto de sela, já que não sabemos calcular a integral exatamente. Fazendo os campos H iguais a zero, temos como equações de ponto de sela

$$\beta \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta Q(\omega_n)} = 2Q(\omega_n) - \frac{2J}{I\omega_n^2 + 2\mu - 2JQ(\omega_n)} = 0$$

que, com um pouquinho de álgebra bem simples, obtemos

$$Q(\omega_n) = \frac{1}{4J} (I\omega_n^2 + 2\mu) + \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{I\omega_n^2}{2J} + \frac{\mu}{J} \right)^2 - 2}. \quad (6.7)$$

Note que, a rigor, teríamos duas soluções (temos também a solução $Q(\omega_n) = \frac{1}{4J} (I\omega_n^2 + 2\mu) - \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{I\omega_n^2}{2J} + \frac{\mu}{J} \right)^2 - 2}$), mas para manter $Q(\omega_n)$ sempre positivo, e termos então um expoente negativo definido, escolho a solução apresentada em (6.7). Deste modo, fazendo o limite termodinâmico, temos a seguinte expressão para a função de partição

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{Z} \rangle_{ca} &= \prod_{n=0}^{\infty} \left\{ \mathcal{N} e^{-N \left\{ \left[\frac{1}{4J} (I\omega_n^2 + 2\mu) + \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{I\omega_n^2}{2J} + \frac{\mu}{J} \right)^2 - 2} \right]^2 - \frac{\beta H^*(\omega_n) H(\omega_n)}{I\omega_n^2 + 2\mu - 2JQ(\omega_n)} \right\}} \times \right. \\ &\quad \left. \times e^{-N \left\{ \ln \left[\beta \left(I\omega_n^2 + 2\mu - 2J \left(\frac{1}{4J} (I\omega_n^2 + 2\mu) + \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{I\omega_n^2}{2J} + \frac{\mu}{J} \right)^2 - 2} \right) \right] \right\}} \right\}. \quad (6.8)\end{aligned}$$

Calculamos agora a constante \mathcal{N} . Para isso, consideramos os sistemas clássico e quântico sem interação. A função de partição para o modelo esférico clássico sem interação,

para apenas um spin é

$$\mathcal{Z}_{cl} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\beta\mu s^2} ds}{\sqrt{\pi}} = \sqrt{\frac{1}{\beta\mu}}$$

e, para o sistema quântico é

$$\mathcal{Z}_{qn} = \mathcal{N} \text{Tr} e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}$$

onde o Hamiltoniano é

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2I} + \mu\hat{s}^2.$$

Oras, isto é um oscilador harmônico, que diagonalizado fica

$$\hat{\mathcal{H}} = \sqrt{\frac{2\mu}{I}} \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right)$$

nos dando uma função de partição

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_{qn} &= \mathcal{N} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\sqrt{\frac{2\mu}{I}}(n+\frac{1}{2})} = \mathcal{N} e^{-\frac{\beta}{2}\sqrt{\frac{2\mu}{I}}} \sum_{n=0}^{\infty} \left(e^{-\beta\sqrt{\frac{\mu}{2I}}} \right)^n = \\ &= \mathcal{N} \frac{e^{-\frac{\beta}{2}\sqrt{\frac{2\mu}{I}}}}{1 - e^{-\beta\sqrt{\frac{2\mu}{I}}}} = \frac{\mathcal{N}}{2 \sinh\left(\frac{\beta}{2}\sqrt{\frac{2\mu}{I}}\right)}. \end{aligned}$$

No limite clássico, quero

$$\lim_{I \rightarrow \infty} \mathcal{Z}_{qn} = \frac{\mathcal{N}}{\beta\sqrt{\frac{\mu}{2I}}} = \sqrt{\frac{1}{\beta\mu}}$$

nos dando

$$\mathcal{N} = \sqrt{\frac{2\beta}{I}}.$$

Substituindo em (6.8), lembrando que existe uma constante \mathcal{N} para cada partícula do sistema, obtemos finalmente para a função de partição

$$\langle \mathcal{Z} \rangle_{ca} = \prod_{n=0}^{\infty} \left\{ e^{-N \left\{ \left[\frac{1}{4J} (I\omega_n^2 + 2\mu) + \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{I\omega_n^2}{2J} + \frac{\mu}{J} \right)^2 - 2} \right]^2 - \frac{\beta H^*(\omega_n) H(\omega_n)}{I\omega_n^2 + 2\mu - 2JQ(\omega_n)} \right\}} \times \right. \\ \left. \times e^{-N \left\{ \ln \left[\beta \left(I\omega_n^2 + 2\mu - 2J \left(\frac{1}{4J} (I\omega_n^2 + 2\mu) + \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{I\omega_n^2}{2J} + \frac{\mu}{J} \right)^2 - 2} \right) \right) \right] - \frac{1}{2} \ln\left(\frac{2\beta}{I}\right) \right\}} \right\}.$$

Apêndice B: Condição esférica

O objetivo aqui é mostrar explicitamente como foi feito o cálculo da condição esférica. Com ele foi possível obter uma equação cuja solução nos dá a temperatura crítica T_c em função do inverso do momentum de inércia $1/I$.

A condição esférica é dada pela equação

$$\frac{\partial}{\partial \beta \mu} (\beta \mathcal{F}) = N \quad (6.9)$$

com

$$\beta \mathcal{F} = -\ln \langle \mathcal{Z} \rangle_{ca}.$$

Substituindo em (6.9)

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} (-\ln \langle \mathcal{Z} \rangle_{ca}) = \frac{1}{\beta \langle \mathcal{Z} \rangle_{ca}} \frac{\partial}{\partial \mu} \langle \mathcal{Z} \rangle_{ca}. \quad (6.10)$$

Agora, substituindo (6.6) em (6.10), fazendo $H = 0$ e a derivação, temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \beta \mu} (\beta \mathcal{F}) &= \frac{1}{\langle \mathcal{Z} \rangle_{ca}} \prod_{n=0}^{\infty} \mathcal{N} \int dQ(\omega_n) e^{-N \{Q(\omega_n)^2 + \ln[\beta(I\omega_n^2 + 2\mu - 2JQ(\omega_n))]\}} \times \\ &\times \left[\frac{N}{\beta} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{I\omega_n^2 + 2\mu - 2JQ(\omega_n)} \right] = N. \end{aligned}$$

Ora, o funcional a direita da igualdade escrito explicitamente é exatamente a função de partição $\langle \mathcal{Z} \rangle_{ca}$, então, essa condição será satisfeita se

$$\left[\frac{2}{\beta} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{I\omega_n^2 + 2\mu - 2JQ(\omega_n)} \right] = 1.$$

Reescrevendo, e lembrando que o argumento do somatório é $Q(\omega_n)$

$$\begin{aligned} \frac{2}{\beta J} \sum_{n=0}^{\infty} Q(\omega_n) &= 1 \\ \frac{1}{\beta J} \sum_{n=-\infty}^{\infty} Q(\omega_n) &= 1. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Para fazer a soma acima, recorro a um truque que consiste em substituir a frequência ω_n discreta em uma variável contínua imaginária z , construímos uma função de z com pólos exatamente sobre os valores de ω_n e integro no contorno que contorna esses pólos:

$$\omega_n \equiv iz. \quad (6.12)$$

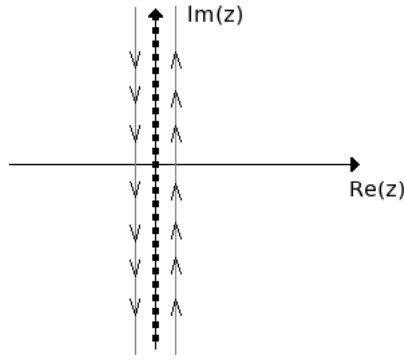


Figura B1: O contorno Γ na soma das frequências.

Inserindo (6.12) em (6.7) e substituindo o resultado na soma da equação (6.11), temos

$$\begin{aligned}
 Q(iz) &= \frac{\beta}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{e^{\eta z}}{e^{\beta z} - 1} \left\{ \frac{\mu}{2J} - \frac{Iz^2}{4J} + \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\mu}{J} - \frac{Iz^2}{2J}\right)^2 - 2} \right\} dz \\
 &= \frac{\beta}{2\pi i} \left\{ \oint_{\Gamma} \frac{e^{\eta z}}{e^{\beta z} - 1} \left(\frac{\mu}{2J} - \frac{Iz^2}{4J}\right) dz + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2} \oint_{\Gamma} \frac{e^{\eta z}}{e^{\beta z} - 1} \sqrt{\left(\frac{\mu}{J} - \frac{Iz^2}{2J}\right)^2 - 2} dz \right\} \tag{6.13}
 \end{aligned}$$

onde Γ é o contorno mostrado na *Figura B1*.

Para fazer a integral, deformamos o contorno de modo a nos livrarmos dos infinitos pólos, e ficar apenas com uma quantidade mensurável de pólos ou com algum corte. A primeira integral em (6.13) tem pólos apenas sobre o eixo imaginário de z , então, se deformarmos o contorno de modo a fugir desses pólos (*Figura B2 (I)*), a integral se torna trivialmente igual a zero. A segunda, portanto, possui cortes no eixo real de z , como mostra a *Figura B2 (II)*.

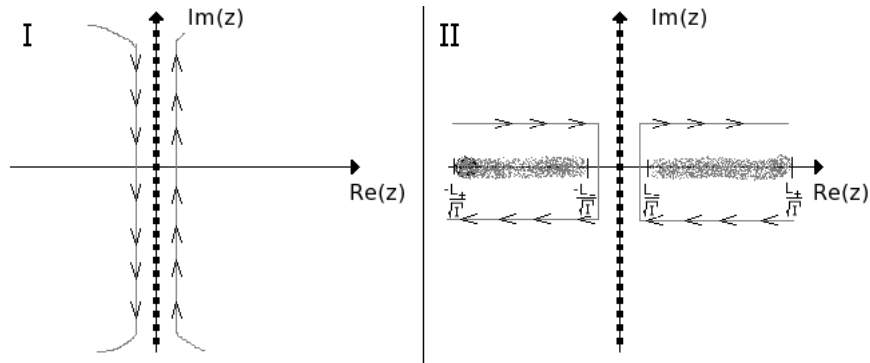


Figura B2: O contorno para (I) a primeira integral e (II) para a segunda integral

Faça agora o cálculo da segunda integral em (6.13)

$$\frac{\beta}{4\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{e^{\eta z}}{e^{\beta z} - 1} \sqrt{\left(\frac{\mu}{J} - \frac{Iz^2}{2J}\right)^2 - 2} dz = \frac{\beta}{8\pi Ji} \oint_{\Gamma} \frac{e^{\eta z}}{e^{\beta z} - 1} \sqrt{(2\mu - Iz^2)^2 - 8J^2} dz.$$

Deformando o contorno Γ como mostrado na *Figura B2 (II)*, notamos que o integrando é real apenas para os valores entre $-\sqrt{\frac{1}{I}(2\mu + 2\sqrt{2}J)} \leq z \leq -\sqrt{\frac{1}{I}(2\mu - 2\sqrt{2}J)}$ na parte negativa do eixo real, e entre $\sqrt{\frac{1}{I}(2\mu - 2\sqrt{2}J)} \leq z \leq \sqrt{\frac{1}{I}(2\mu + 2\sqrt{2}J)}$ (na *Figura B2 (II)*, $L_+ \equiv \sqrt{(2\mu + 2\sqrt{2}J)}$ e $L_- \equiv \sqrt{(2\mu - 2\sqrt{2}J)}$). A integral é então dividida em 4 partes:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_a &= -\frac{\beta}{8\pi J} \int_{-\frac{L_+}{\sqrt{I}}}^{-\frac{L_-}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \sqrt{8J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} \\ \mathcal{I}_b &= \frac{\beta}{8\pi J} \int_{-\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{-\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \sqrt{8J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} \\ \mathcal{I}_c &= \frac{\beta}{8\pi J} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \sqrt{8J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} \\ \mathcal{I}_d &= -\frac{\beta}{8\pi J} \int_{\frac{L_+}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_-}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \sqrt{8J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}. \end{aligned}$$

Em \mathcal{I}_a e \mathcal{I}_b devo fazer a substituição $x \rightarrow -x$, e em \mathcal{I}_a e \mathcal{I}_d devo inverter os limites de integração. Fazendo tudo isso, e somando todas as partes, temos

$$\frac{\beta}{8\pi Ji} \oint_{\Gamma} \frac{e^{\eta z}}{e^{\beta z} - 1} \sqrt{(2\mu - Iz^2)^2 - 8J^2} dz = \frac{\beta}{4\pi J} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \coth\left(\frac{\beta x}{2}\right) \sqrt{8J^2 - (2\mu - Ix^2)^2}$$

substituindo em (6.11)

$$\frac{1}{4\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \coth\left(\frac{\beta x}{2}\right) \sqrt{8J^2 - (2\mu - Ix^2)^2} = 1. \quad (6.14)$$

Dessa equação podemos calcular a temperatura crítica para cada valor de I . O valor crítico de μ é $\sqrt{2}J$, pois se for menor que isso, a integral deixa de ser real. Berlin e Kac explicam que, para manter a integral real, μ gruda nesse valor crítico, onde se obtém a temperatura crítica, e para valores de temperatura μ permanece constante, isto é, a condição esférica não vale mais.

Para mostrar a validade desse resultado, tomamos o limite clássico, isto é, o limite

para $I \rightarrow \infty$. Começo fazendo a substituição

$$y \equiv \sqrt{I}x, \quad dy = \sqrt{I}dx.$$

Substituindo em (6.14)

$$\frac{1}{4\pi J^2} \int_{L_-}^{L_+} \coth\left(\frac{\beta y}{2\sqrt{I}}\right) \sqrt{8J^2 - (2\mu - y^2)^2} \frac{dy}{\sqrt{y}} = 1$$

agora, fazendo $I \rightarrow \infty$, isto é, I muito grande, substituo a cotangente hiperbólica por sua forma assintótica

$$\coth\left(\frac{\beta y}{2\sqrt{I}}\right) \simeq \frac{2\sqrt{I}}{\beta y}$$

ficando com

$$\int_{L_-}^{L_+} \frac{1}{y} dy \sqrt{8J^2 - (2\mu - y^2)^2} = 2\pi\beta J^2.$$

Agora, faço a seguinte substituição

$$y^2 \equiv z$$

o que nos dá

$$\int_{2\mu-2\sqrt{2}J}^{2\mu+2\sqrt{2}J} \frac{dz}{z} \sqrt{(2\mu - z + 2\sqrt{2}J)(z - 2\mu + 2\sqrt{2}J)} = \int_a^b \frac{dz}{z} \sqrt{(b-z)(z-a)} = 4\pi\beta J^2$$

onde fizemos a substituição $8J^2 - (2\mu - y^2)^2 = (2\mu - y^2 + 2\sqrt{2}J)(y^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)$, $a \equiv 2\mu - 2\sqrt{2}J$ e $b \equiv 2\mu + 2\sqrt{2}J$. Faço mais uma substituição

$$w \equiv z - a$$

ficando então com a integral

$$\int_0^{4\sqrt{2}J} \frac{dw}{(w + 2\mu - 2\sqrt{2}J)} \sqrt{w(4\sqrt{2}J - w)}$$

agora sim, recorro a tabela de integrais [17] pagina 287 fórmula 3.197.8 obtendo, depois de uma álgebra simples²

$$\frac{1}{2\mu - 2\sqrt{2}J} F_1^{(2)}\left(1, \frac{3}{2}; 3; \frac{4\sqrt{2}J}{2\mu - 2\sqrt{2}J}\right) = \beta$$

onde $F_1^{(2)}$ é a função hipergeométrica de Gauss. Assim ainda não consigo comparar com

²Existe um termo constante $B\left(\frac{3}{2}; \frac{3}{2}\right) = \frac{\pi}{8}$, onde $B(\alpha; \beta) = \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha+\beta)}$ e $\Gamma(x)$ é a função Gamma

os resultados conhecidos, então fazemos mais um pouco de álgebra. Note que

$$\frac{4\sqrt{2}J}{2\sqrt{2}J - 2\mu} = \frac{2}{1 - c}$$

onde $c \equiv \frac{\mu}{\sqrt{2}J}$. Temos então que

$$F_1^{(2)}\left(1, \frac{3}{2}; 3; \frac{2}{1-c}\right) = 2\beta(\mu - \sqrt{2}J) = 2\sqrt{2}\beta J(c - 1). \quad (6.15)$$

Mais uma vez, recorrendo a [17], dessa vez pagina 1043 fórmula 9.134.1, temos a relação

$$F_1^{(2)}\left(1, \frac{3}{2}; 3; \frac{2}{1-c}\right) = \left(\frac{c-1}{c}\right) F_1^{(2)}\left(\frac{1}{2}, 1; 2; \frac{1}{c^2}\right)$$

que substituindo em (6.15) se obtém

$$F_1^{(2)}\left(\frac{1}{2}, 1; 2; \frac{1}{c^2}\right) = 2\sqrt{2}\beta Jc,$$

o que nos leva mais uma vez a tabela, pagina 1042, fórmula 9.121.24, que nos dá finalmente após uma álgebra monótona

$$\frac{2\beta\mu}{\sqrt{2}\beta J} = \sqrt{2}\beta J + \frac{1}{\sqrt{2}\beta J}$$

que é exatamente a expressão encontrada por A. Theumann [3] em seu modelo clássico. Note que para os resultados coincidirem devemos fazer a redefinição $\beta\mu \equiv \mu_A$ e $\sqrt{2}J \equiv J_A$, onde μ_A e J_A são os valores obtidos por A. Theumann [3].

Apêndice C: Energia livre

Para o cálculo da energia livre, é muito importante a constante de normalização da função de partição, pois ela dará uma contribuição dependente da temperatura β do sistema. A energia livre, segundo a equação (6.6) será dada por

$$\beta\mathcal{F} = \sum_{n=0}^{\infty} Q(\omega_n)^2 + \sum_{n=0}^{\infty} \ln \left\{ \beta [I\omega_n^2 + 2\mu - 2JQ(\omega_n)] \right\} - \ln \mathcal{N} - \mu \quad (6.16)$$

onde $Q(\omega_n)$ está dado pela equação (6.7). A complicação, obviamente, está no cálculo dos dois primeiros termos. Para manter a clareza da explicação, cálculo separadamente cada um deles.

O primeiro termo a ser calculado

$$\begin{aligned}\mathcal{T}_1 &= \sum_{n=0}^{\infty} Q(\omega_n)^2 = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{8J^2} \{(I\omega_n + 2\mu)^2 - 4J^2\} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{8J^2} (I\omega_n^2 + 2\mu) \sqrt{(I\omega_n^2 + 2\mu)^2 - 8J^2}.\end{aligned}$$

A primeira coisa que devemos notar é que, quando usamos o procedimento que leva a soma ao espaço complexo, a primeira soma não irá contribuir para o resultado, pois posso deformar o contorno (como na *Figura B1*). Já a segunda soma nos dá

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{8J^2} (I\omega_n^2 + 2\mu) \sqrt{(I\omega_n^2 + 2\mu)^2 - 8J^2} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{16J^2} (I\omega_n^2 + 2\mu) \sqrt{(I\omega_n^2 + 2\mu)^2 - 8J^2} = \\ &= \frac{\beta}{32\pi i J^2} \oint_{\Gamma} \frac{dz e^{\eta z}}{e^{\beta z} - 1} (2\mu - Iz^2) \times \\ &\quad \times \sqrt{(2\mu - Iz^2 + 2\sqrt{2}J^2) (Iz^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J^2)}.\end{aligned}$$

O contorno a ser considerado é o mesmo da *Figura B2 (II)*, pois os cortes estão no mesmo lugar. Novamente, terei de considerar as 4 integrais

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_a &= -\frac{\beta}{32\pi J^2} \int_{-\frac{L_+}{\sqrt{I}}}^{-\frac{L_-}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} (2\mu - Ix^2) \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J^2) (Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J^2)} \\ \mathcal{I}_b &= \frac{\beta}{32\pi J^2} \int_{-\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{-\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} (2\mu - Ix^2) \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J^2) (Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J^2)} \\ \mathcal{I}_c &= \frac{\beta}{32\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} (2\mu - Ix^2) \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J^2) (Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J^2)} \\ \mathcal{I}_d &= -\frac{\beta}{32\pi J^2} \int_{\frac{L_+}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_-}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} (2\mu - Ix^2) \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J^2) (Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J^2)}\end{aligned}$$

onde novamente devemos fazer a substituição $x \rightarrow -x$ em \mathcal{I}_a e \mathcal{I}_b , e trocar os limites de integração em \mathcal{I}_d . Fazendo isso e somando tudo, temos

$$\mathcal{T}_1 = \frac{\beta}{16\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} dx (2\mu - Ix^2) \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J^2) (Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J^2)} \coth\left(\frac{\beta x}{2}\right). \quad (6.17)$$

O segundo termo de (6.16)

$$\mathcal{T}_2 = \sum_{n=0}^{\infty} \ln \{\beta [I\omega_n^2 + 2\mu - 2JQ(\omega_n)]\} = \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln \{\beta [I\omega_n^2 + 2\mu - 2JQ(\omega_n)]\} =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln \left\{ \beta \left[I\omega_n^2 + 2\mu - 2J \left(\frac{1}{4J} (I\omega_n^2 + 2\mu) + \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{I\omega_n^2}{2J} + \frac{\mu}{J} \right)^2 - 2} \right) \right] \right\} = \\
&= \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln \left\{ \beta \left[\frac{I\omega_n^2}{2} + \mu + \frac{1}{2} \sqrt{(I\omega_n^2 + 2\mu)^2 - 8J^2} \right] \right\}
\end{aligned}$$

que, escrevendo em termos da integral em z , fica

$$\mathcal{T}_2 = \frac{\beta}{4\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{dz e^{\eta z}}{e^{\beta z} - 1} \ln \left\{ \beta \left[2\mu - \frac{Iz^2}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(2\mu - Iz^2)^2 - 8J^2} \right] \right\}.$$

Novamente, tenho cortes dados pela *Figura B2 (II)*, e divido a integral em 4 integrais

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_a &= \frac{\beta}{4\pi i} \int_{-\frac{L_+}{\sqrt{I}}}^{-\frac{L_-}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \ln \left\{ \beta \left[2\mu - \frac{Ix^2}{2} - \frac{i}{2} \sqrt{(2\mu - Ix^2)^2 - 8J^2} \right] \right\} \\
\mathcal{I}_b &= \frac{\beta}{4\pi i} \int_{-\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{-\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \ln \left\{ \beta \left[2\mu - \frac{Ix^2}{2} + \frac{i}{2} \sqrt{(2\mu - Ix^2)^2 - 8J^2} \right] \right\} \\
\mathcal{I}_c &= \frac{\beta}{4\pi i} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \ln \left\{ \beta \left[2\mu - \frac{Ix^2}{2} + \frac{i}{2} \sqrt{(2\mu - Ix^2)^2 - 8J^2} \right] \right\} \\
\mathcal{I}_d &= \frac{\beta}{4\pi i} \int_{\frac{L_+}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_-}{\sqrt{I}}} \frac{dx}{e^{\beta x} - 1} \ln \left\{ \beta \left[2\mu - \frac{Ix^2}{2} - \frac{i}{2} \sqrt{(2\mu - Ix^2)^2 - 8J^2} \right] \right\}.
\end{aligned}$$

Mais uma vez, fazendo a substituição $x \rightarrow -x$ em \mathcal{I}_a e \mathcal{I}_b , e fazendo a troca nos limites de integração de \mathcal{I}_d , temos

$$\mathcal{T}_2 = -\frac{\beta}{4\pi i} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} dx \coth \left(\frac{\beta x}{2} \right) \ln \left\{ \frac{\mu - \frac{Ix^2}{2} + \frac{i}{2} \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J) (Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)}}{\mu - \frac{Ix^2}{2} - \frac{i}{2} \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J) (Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)}} \right\}$$

que eu separo em

$$\begin{aligned}
\mathcal{T}_2 &= -\frac{\beta}{4\pi i} \left\{ \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} dx \coth \left(\frac{\beta x}{2} \right) \times \right. \\
&\quad \times \ln \left[\mu - \frac{Ix^2}{2} + \frac{i}{2} \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J) (Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)} \right] - \\
&\quad - \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} dx \coth \left(\frac{\beta x}{2} \right) \times \\
&\quad \left. \times \ln \left[\mu - \frac{Ix^2}{2} - \frac{i}{2} \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J) (Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)} \right] \right\}. \quad (6.18)
\end{aligned}$$

Novamente separo em duas integrais. Como tenho uma integral análoga a outra, apresento o cálculo de apenas uma delas, pois a outra é calculada exatamente do mesmo jeito. Tomo

a integral

$$\mathcal{I}nt_1 = \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} dx \coth\left(\frac{\beta x}{2}\right) \ln \left[\mu - \frac{Ix^2}{2} + \frac{i}{2} \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J)(Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)} \right]$$

e fazemos uma integração por partes usando a fórmula

$$\int_a^b u dv = uv|_a^b - \int_a^b v du$$

com

$$\begin{aligned} u &= \ln \left[\mu - \frac{Ix^2}{2} + \frac{i}{2} \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J)(Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)} \right] \\ du &= \frac{Ix}{\mu - \frac{Ix^2}{2} + \frac{i}{2} \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J)(Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)}} \times \\ &\quad \times \left\{ \frac{i(2\mu - Ix^2) - \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J)(Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)}}{\sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J)(Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)}} \right\} dx \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} dv &= \coth\left(\frac{\beta x}{2}\right) dx \\ v &= \frac{2}{\beta} \ln \left[\sinh\left(\frac{\beta x}{2}\right) \right] \end{aligned}$$

obtendo

$$\begin{aligned} \mathcal{I}nt_1 &= \frac{2}{\beta} \ln \left[\sinh\left(\frac{\beta x}{2}\right) \right] \ln \left[\mu - \frac{Ix^2}{2} + \frac{i}{2} \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J)(Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)} \right] \Big|_a^b - \\ &\quad - \int_a^b \frac{2}{\beta} \ln \left[\sinh\left(\frac{\beta x}{2}\right) \right] \frac{Ix}{\mu - \frac{Ix^2}{2} + \frac{i}{2} \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J)(Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)}} \times \\ &\quad \times \left\{ \frac{i(2\mu - Ix^2) - \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J)(Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)}}{\sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J)(Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)}} \right\} dx. \end{aligned}$$

Analogamente, a segunda integral dá

$$\begin{aligned} \mathcal{I}nt_2 &= \frac{2}{\beta} \ln \left[\sinh\left(\frac{\beta x}{2}\right) \right] \ln \left[\mu - \frac{Ix^2}{2} - \frac{i}{2} \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J)(Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)} \right] \Big|_a^b - \\ &\quad - \int_a^b \frac{2}{\beta} \ln \left[\sinh\left(\frac{\beta x}{2}\right) \right] \frac{Ix}{\mu - \frac{Ix^2}{2} - \frac{i}{2} \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J)(Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)}} \times \end{aligned}$$

$$\times \left\{ \frac{i(2\mu - Ix^2) - \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J)(Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)}}{\sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J)(Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)}} \right\} dx$$

que nos dá, voltando pra \mathcal{T}_2 e pulando uma álgebra um tanto quanto cansativa

$$\mathcal{T}_2 = \frac{2}{\pi} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \ln \left[\sinh \left(\frac{\beta x}{2} \right) \right] \frac{Ix}{\sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J)(Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)}} dx. \quad (6.19)$$

Agora, devemos juntar \mathcal{T}_1 e \mathcal{T}_2 para obter a energia livre. Juntando tudo e fazendo um pouco mais de álgebra finalmente se obtém

$$\begin{aligned} \beta \mathcal{F} &= \frac{1}{2\pi J^2} \int_{\frac{L_-}{\sqrt{I}}}^{\frac{L_+}{\sqrt{I}}} \ln \left[\sinh \left(\frac{\beta x}{2} \right) \right] \sqrt{(2\mu - Ix^2 + 2\sqrt{2}J)(Ix^2 - 2\mu + 2\sqrt{2}J)} Ix dx - \\ &\quad - \frac{1}{2} \ln \left(\frac{2\beta}{I} \right) - \mu. \end{aligned} \quad (6.20)$$

Apêndice D: Programas

Neste apêndice apresento os programas usados para o cálculo do potencial químico em função da temperatura e momentum de inércia, da condição esférica (temperatura em função do inverso do momentum de inércia, o que me dá o diagrama de fase apresentado no capítulo 3), da energia livre (feito em 2 dois programas: um para $T > T_c$ e o outro para $T < T_c$) e o programa que calcula a entropia (também apresentado em 2 partes). É importante notar que o programa para o cálculo da energia livre usa os dados de saída do programa para o cálculo do potencial químico em função da temperatura e momentum de inércia, bem como o programa da entropia, que usa os mesmos dados.

Os programas estão apresentados na ordem dada acima com os nomes de *mi.f*, *txi.f*, *energiapedro.f*, *en2pedro.f*, *entropiaanalitica.f* e *entranalit2.f*.

20-04-2005

mi.f

1

```

implicit none
real*8 pi, inf, sup, fa, fb, soma, area
real*8 m, t, x, g, dx
real*8 integrando
real*8 a
real*8 cond
real*8 tc
cINICIALIZACAO DAS VARIAVEIS
pi = acos(-1.)
m = 0.
t = 0.
g = 0.
read(*,*) g , t

do m = 1., 3., 0.001
  inf = sqrt(2.*m-2.)
  sup = sqrt(2.*m+2.)
1  dx = 0.0001
  soma = 0.
  area = 0.

c   do x = inf, sup, dx
c     fa = integrando(x,t,g,m)
c     write(*,*) x, fa
c   enddo

cINTEGRADOR
  do x = inf,sup,dx
    fa = integrando(x,t,g,m)
    if (x+dx .lt. sup) then
      fb = integrando(x+dx,t,g,m)
    endif
    if (x+dx .gt. sup) then
      fb = integrando(sup, t, g, m)
      dx = sup - x
    endif
    if (fa .gt. fb) then
      area = fb*dx + (fa - fb)*dx/2.
      soma = soma + area
    endif
    if (fa .lt. fb) then
      area = fa*dx + (fb - fa)*dx/2.
      soma = soma + area
    endif
  enddo
cFIM DO INTEGRADOR
cond = soma - 2.*pi
if (cond .gt. 0.000001) then
  t = t - 0.000001
c   write(*,*) cond
  goto 1
endif
if (cond .lt. -0.0001) then
  t = t + 0.0001
c   write(*,*) cond

```

file:///home/pcmxms/mestrado/modelo/f/mi/mi.f

20-04-2005

mi.f

2

```
        goto 1
    endif
    write(*,*) t, m, g
enddo
```

```
c    write(*,*) cond
end
```

```
cfuncao do integrando
```

```
real*8 function integrando(xis, tem, I, mi)
real*8 xis, tem, I, mi
real*8 partea, parteb
parte= 1./tanh(xis/(2.*sqrt(I)*tem))
parteb= 1./sqrt(I)*sqrt((2.*mi-(xis**2.)+2.)*(xis**2.)-2.*mi+2.)
integrando = partea*parteb
end
```

20-04-2005

txi.f

1

```

implicit none
real*8 pi, inf, sup, fa, fb, soma, area
real*8 m, t, x, g, dx
real*8 integrando
real*8 a
real*8 cond
real*8 tc
!INICIALIZACAO DAS VARIAVEIS
pi = acos(-1.)
m = 1.
t = 0.00409999999
g = 0.19999001

do g = 0.180129012, 0.177, -0.00000001
1  if (2.*m-2. .lt. 0.) then
    goto 2
  endif

  inf = sqrt(2.*m-2.)
  sup = sqrt(2.*m+2.)
  dx = 0.0001
  soma = 0.
  area = 0.

!   do x = inf, sup, dx
!     fa = integrando(x,t,g,m)
!     write(*,*) x, fa
!   enddo

!INTEGRADOR
  do x = inf,sup,dx
    fa = integrando(x,t,g,m)
    if (x+dx .lt. sup) then
      fb = integrando(x+dx,t,g,m)
    endif
    if (x+dx .gt. sup) then
      fb = integrando(sup, t, g, m)
      dx = sup - x
    endif
    if (fa .gt. fb) then
      area = fb*dx + (fa - fb)*dx/2.
      soma = soma + area
    endif
    if (fa .lt. fb) then
      area = fa*dx + (fb - fa)*dx/2.
      soma = soma + area
    endif
  enddo
!FIM DO INTEGRADOR

  cond = soma - 2.*pi

  if (cond .gt. 0.000001) then
    t = t - 0.000001
c   write(*,*) cond

```

file:///home/pcmxms/mestrado/modelo/f/condesf/txi.f

20-04-2005

txi.f

2

```

        goto 1
    endif
    if (cond .lt. -0.0000001) then
        t= t + 0.0001
c       write(*,*) cond
        goto 1
    endif

c       write(*,*) t, m
c       tc = t
c       t = t - 0.001
c       if (t .gt. -1.) then
c           goto 1
c       endif

2      write(*,*) 1./g, t
c      t = 0.
        if (g .lt. 7.9) then
            t=t-0.01
        endif
        if (g .lt. 2.7) then
            t=t-0.03
        endif
        t=0.0000000001

    enddo

!       write(*,*) cond
    end

!funcao do integrando
    real*8 function integrando(xis, tem, I, mi)
    real*8 xis, tem, I, mi
    real*8 partea, parteb
    partea= 1./tanh(xis/(2.*sqrt(I)*tem))
    parteb= 1./sqrt(I)*sqrt((2.*mi-(xis**2.)+2.)*((xis**2.)-2.*mi+2.))
    integrando = partea*parteb
end

```

20-04-2005

energiapedro.f

1

```

implicit none
real*8 pi, inf, sup, fa, fb, soma, area
real*8 m, t, x, g, dx
real*8 integrando
real*8 a
real*8 cond
real*8 tc
integer i
!INICIALIZACAO DAS VARIAVEIS
pi = acos(-1.)
m = 0.
t = 0.
g = 0.
do i = 1, 2000, 1
  read(*,*) t,m,g
  inf = sqrt(2.*m-2.)
  sup = sqrt(2.*m+2.)
  dx = 0.0001
  soma = 0.
  area = 0.

!INTEGRADOR
  do x = inf,sup,dx
    fa = integrando(x,t,g,m)
    if (x+dx .lt. sup) then
      fb = integrando(x+dx,t,g,m)
    endif
    if (x+dx .gt. sup) then
      fb = integrando(sup, t, g, m)
      dx = sup - x
    endif
    if (sqrt(fa*fa) .gt. sqrt(fb*fb)) then
      area = fb*dx + (fa - fb)*dx/2.
      soma = soma + area
    endif
    if (sqrt(fa*fa) .lt. sqrt(fb*fb)) then
      area = fa*dx + (fb - fa)*dx/2.
      soma = soma + area
    endif
  enddo
!FIM DO INTEGRADOR
  write(*,*)t,soma-m-1./2.*t*log(1./(t*g))+1./2.*t*log(2.), m, g
enddo
end

!funcao do integrando
real*8 function integrando(xis, tem, I, mi)
real*8 ach, xis, tem, I, mi, partea, parteb
ach = acos(-1.)
partea=sqrt(4. - (2.*mi-xis**2.))**2.)
parteb=xis*log(sinh(xis/(2.*tem*sqrt(I))))
integrando = (tem/ach)*partea*parteb
end

```

20-04-2005

en2pedro.f

1

```

implicit none
real*8 pi, inf, sup, fa, fb, soma, area
real*8 m, t, x, g, dx
real*8 integrando
real*8 a, pp, cc
real*8 cond
real*8 tc
integer i
cINICIALIZACAO DAS VARIAVEIS
pi = acos(-1.)
m = 0.
t = 0.
g = 0.
read(*,*) pp, cc, g
do t = 0.0001, pp, 0.001
  m = 1.
  inf = sqrt(2.*m-2.)
  sup = sqrt(2.*m+2.)
  dx = 0.0001
  soma = 0.
  area = 0.

cINTEGRADOR
do x = inf,sup,dx
  fa = integrando(x,t,g,m)
  if (x+dx .lt. sup) then
    fb = integrando(x+dx,t,g,m)
  endif
  if (x+dx .gt. sup) then
    fb = integrando(sup, t, g, m)
    dx = sup - x
  endif
  if (sqrt(fa*fa) .gt. sqrt(fb*fb)) then
    area = fb*dx + (fa - fb)*dx/2.
    soma = soma + area
  endif
  if (sqrt(fa*fa) .lt. sqrt(fb*fb)) then
    area = fa*dx + (fb - fa)*dx/2.
    soma = soma + area
  endif
enddo

cFIM DO INTEGRADOR
write(*,*)t,soma-m-1./2.*t*log(1./(t*g))+1./2.*t*log(2.), m, g
enddo
end

cfuncao do integrando
real*8 function integrando(xis, tem, I, mi)
real*8 ach, xis, tem, I, mi, partea, parteb
ach = acos(-1.)
partea=sqrt(4. - (2.*mi-xis**2.)**2.)
parteb=xis*log(sinh(xis/(2.*tem*sqrt(I))))
integrando = (tem/ach)*parte*parteb
end

```

file:///home/pcmxms/mestrado/modelo/f/energialivre/en2pedro.f

02-05-2005

entropiaanalitica.f

1

```

implicit none
real*8 pi, inf, sup, fa, fb, soma, area
real*8 m, t, x, g, dx
real*8 integrando
real*8 a
real*8 cond
real*8 tc
integer i
!INICIALIZACAO DAS VARIABEIS
pi = acos(-1.)
m = 0.
t = 0.
g = 0.
do i = 1, 2000, 1
  read(*,*) t,m,g
  inf = sqrt(2.*m-2.)
  sup = sqrt(2.*m+2.)
  dx = 0.0001
  soma = 0.
  area = 0.

!INTEGRADOR
  do x = inf,sup,dx
    fa = integrando(x,t,g,m)
    if (x+dx .lt. sup) then
      fb = integrando(x+dx,t,g,m)
    endif
    if (x+dx .gt. sup) then
      fb = integrando(sup, t, g, m)
      dx = sup - x
    endif
    if (sqrt(fa*fa) .gt. sqrt(fb*fb)) then
      area = fb*dx + (fa - fb)*dx/2.
      soma = soma + area
    endif
    if (sqrt(fa*fa) .lt. sqrt(fb*fb)) then
      area = fa*dx + (fb - fa)*dx/2.
      soma = soma + area
    endif
  enddo
!FIM DO INTEGRADOR
  write(*,*)t,-soma+1./2.*log(1./(2.*g*t))-1./2., m, g
enddo
end

!funcao do integrando
real*8 function integrando(xis, tem, I, mi)
real*8 ach, xis, tem, I, mi, partea, parteb, partec
ach = acos(-1.)
partea=sqrt(4. - (2.*mi-xis**2.)**2.)*xis
parteb=log(sinh(xis/(2.*tem*sqrt(I))))
partec=1./(2.*sqrt(I)*tem)*xis*1./tanh(xis/(2.*tem*sqrt(I)))
integrando = (1./ach)*parte*(parteb-partec)
end

```

file:///home/pcmxms/mestrado/modelo/f/entropia/entropiaanalitica.f

02-05-2005

entranalit2.f

1

```

implicit none
real*8 pi, inf, sup, fa, fb, soma, area
real*8 m, t, x, g, dx
real*8 integrando
real*8 a, pp, cc
real*8 cond
real*8 tc
integer i
cINICIALIZACAO DAS VARIABEIS
pi = acos(-1.)
m = 0.
t = 0.
g = 0.
read(*,*) pp, cc, g
do t = 0.0001, pp, 0.001
  m = 1.
  inf = sqrt(2.*m-2.)
  sup = sqrt(2.*m+2.)
  dx = 0.0001
  soma = 0.
  area = 0.

cINTEGRADOR
do x = inf,sup,dx
  fa = integrando(x,t,g,m)
  if (x+dx .lt. sup) then
    fb = integrando(x+dx,t,g,m)
  endif
  if (x+dx .gt. sup) then
    fb = integrando(sup, t, g, m)
    dx = sup - x
  endif
  if (sqrt(fa*fa) .gt. sqrt(fb*fb)) then
    area = fb*dx + (fa - fb)*dx/2.
    soma = soma + area
  endif
  if (sqrt(fa*fa) .lt. sqrt(fb*fb)) then
    area = fa*dx + (fb - fa)*dx/2.
    soma = soma + area
  endif
enddo

CFIM DO INTEGRADOR
write(*,*)t,-soma+1./2.*log(1./(2.*g*t))-1./2., m, g
enddo
end

cintegrando
real*8 function integrando(xis, tem, I, mi)
real*8 ach, xis, tem, I, mi, partea, parteb, partec
ach = acos(-1.)
partea=sqrt(4. - (2.*mi-xis**2.)*2.)*xis
parteb=log(sinh(xis/(2.*tem*sqrt(I))))
partec=1./(2.*sqrt(I)*tem)*xis*1./tanh(xis/(2.*tem*sqrt(I)))
integrando = (1./ach)*parte*(parteb-partec)
end

```

Referências

- [1] BINDER, K.; YOUNG, A. P. Spin glasses: experimental facts, theoretical concepts, and open questions. *Reviews of Modern Physics*, Woodbury, v. 58, n. 4, p. 801–976, Oct. 1986.
- [2] EDWARDS, S. F.; ANDERSON, P. W. Theory of spin glasses. *J. Phys. F: Metal Phys.*, London, v. 5, n. 5, p. 965–974, May 1975.
- [3] THEUMANN, A. Superalgebra and the spherical model of a spin glass. *J. Phys. A*, Bristol, v. 20, n. 1, p. 25–34, Jan 1987.
- [4] EFETOV, K. B. Supersymmetry and theory of disordered metals. *Advances in Physics*, London, v. 32, n. 1, p. 53–127, Jan./Feb. 1983.
- [5] SHUKLA, P.; SINGH, S. A quantum spherical model of spin glass. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 81, n. 8, p. 477–479, Feb. 1981.
- [6] FEYNMAN, R. P.; HIBBS, A. R. *Quantum mechanics and path integrals*. New York: McGraw-Hill, 1965.
- [7] NEGELE, J. W.; ORLAND, H. *Quantum many-particle systems*. Reading: Addison-Wesley, 1988.
- [8] BERLIN, T. H.; KAC, M. The spherical model of a ferromagnet. *The Physical Review*, New York, v. 86, n. 6, p. 821–835, June 1952.
- [9] KIRKPATRICK, S.; SHERRINGTON, D. Infinite-ranged models of spin-glasses. *Physical Review B*, New York, v. 17, n. 11, p. 4384–4403, June 1978.
- [10] FISCHER, K. H.; HERTZ, J. A. *Spin glasses*. Cambridge: Cambridge University Press, 1991.
- [11] SALINAS, S. R. A. *Introdução à física estatística*. 2. ed. São Paulo: edusp, 1999.
- [12] KOSTERLITZ, J. M.; THOULESS, D. J.; JONES, R. C. Spherical model of a spin-glass. *Physical Review Letters*, New York, v. 36, n. 20, p. 1217–1220, May 1976.
- [13] YE, J.; SACHDEV, S.; READ, N. Solvable spin glass of quantum rotors. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 70, n. 25, p. 4011–4014, June 1993.
- [14] MEHTA, M. L. *Random matrices and the statistical theory of energy levels*. New York: Academic Press, 1967.
- [15] EDWARDS, S. F.; JONES, R. C. The eigenvalue spectrum of a large symmetric random matrix. *J. Phys A: Math. Gen.*, London, v. 9, n. 10, p. 1595–1603, Oct. 1976.

- [16] STANLEY, H. E. Spherical model as the limit of infinite spin dimensionality. *Physical Review*, New York, v. 176, n. 2, p. 718–722, Dec. 1968.
- [17] GRADSHTEYN, I. S.; RYZHIK, I. M. *Table of integrals, series, and products*. 4. ed. New York: Academic Press, 1965.