

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
Instituto de Física

# Quantização Canônica e Integração Funcional no Modelo Esférico Médio

Paula Fernanda Bienzobaz

Tese apresentada ao Instituto de  
Física da Universidade de São Paulo  
para a obtenção do título de Doutor  
em Ciências.

Orientador:

**Prof. Dr. Silvio Roberto de Azevedo Salinas**

Comissão Examinadora:

**Prof. Dr. Silvio Roberto de Azevedo Salinas - IFUSP**

**Prof. Dr. Emerson Jose Veloso de Passos - IFUSP**

**Prof. Dr. Mário José de Oliveira - IFUSP**

**Prof. Dr. Luiz Roberto Evangelista - UEM**

**Prof. Dr. Roberto Fernandes Silva Andrade - UFB**

São Paulo  
2012

# Agradecimentos

Ao Prof. Silvio R. A. Salinas pela orientação.

Aos professores e funcionários do departamento de Física Geral da USP que, de alguma forma, contribuíram para a minha formação.

A todos os amigos, minha sincera gratidão.

Aos companheiros de sala Carlos Bistafa, Eduardo do Carmo, Lucas Modesto e William Conti.

Ao Pedro R. S. Gomes pela paciência, estímulo, compreensão, companheirismo e cuidados em todos os momentos.

À minha família.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior pelo apoio financeiro.

# Resumo

O modelo esférico desempenha um papel importante na mecânica estatística, pois ele permite a realização de cálculos exatos para estudar o comportamento crítico. Diferentes soluções do modelo esférico têm sido usadas para estudar o comportamento crítico de uma grande variedade de sistemas (com diversos tipos de desordem, com interações competitivas, de curto e de longo alcance, ferro e antiferromagnéticas, além de muitas outras situações). As soluções desses modelos apresentam uma série de anomalias a baixas temperaturas, inclusive resultados que contradizem a terceira lei da termodinâmica. Na década de 70, foi sugerido que esse comportamento anômalo a temperaturas muito baixas seria corrigido pela introdução de flutuações quânticas, que não eram levadas em conta nas soluções clássicas. De fato, a partir da quantização do modelo esférico é possível corrigir esse comportamento. Utilizamos então dois métodos distintos de quantização - quantização canônica e representação em termos de integrais funcionais - para construir versões quânticas do modelo esférico clássico, que podem ser investigadas analiticamente. Mostramos que essas formulações quânticas conduzem aos mesmos resultados. Em particular, analisamos as propriedades termodinâmicas de um “modelo esférico médio” quântico nas seguintes situações: (i) com interações de longo alcance, do tipo campo médio, que deve constituir um dos sistemas mais simples exibindo uma transição de fase quântica; (ii) com interações competitivas, entre primeiros e segundos vizinhos, numa situação em que ocorre um ponto multicrítico de Lifshitz; (iii) na presença de interações de longo alcance, tipo campo médio, e de um campo aleatório com média nula;

(iv) na presença de desordem de sítios, como nos modelos de van Hemmen para um vidro de spin ou de Hopfield para uma rede neural com poucos padrões. Em todos esses casos há correção do comportamento anômalo a baixas temperaturas. Obtemos diagramas de fases e estudamos em cada caso a natureza das fases ordenadas.

# Abstract

The spherical model plays an important role in statistical mechanics, since it is amenable to exact calculations to investigate the critical behavior. Solutions of the spherical model have been used to investigate the critical behavior of a large variety of systems (with different types of disorder, with competing interactions, of short and long range, of ferro and anti-ferromagnetic nature, and many other situations). Solutions of these model systems display a number of anomalies at low temperatures, which include some violations of the third law of thermodynamics. In the seventies, it has been suggested that this anomalous behavior at very low temperatures would be corrected by the introduction of quantum fluctuations, which were not taken into account by the classical solutions. In fact, the quantization of the spherical model leads to the correction of these effects. We then use two different methods of quantization, canonical quantization and representation in terms of functional integrals, which are still amenable to exact analytical calculations. We show that these quantum formulations lead to the same results. In particular, we analyze the thermodynamic properties of a quantum “mean spherical model” in the following situations: (i) with long-range, mean-field, interactions, which is perhaps the simplest model system that exhibits a quantum phase transition; (ii) with competing interactions between first and second neighbors, in which case there should be a Lifshitz multicritical point; (iii) in the presence of long-range interactions and of a random field of zero mean value; (iv) in the presence of disorder, such as the van Hemmen model for a spin glass or the Hopfield model for a neural network with just a few

patterns. In all of these cases the anomalous behavior is corrected at low temperatures. We obtain a number of phase diagrams, and discuss the nature of the ordered phases.

# Sumário

<b>Introdução</b>	<b>10</b>
<b>1 Modelo Esférico Quântico Elementar</b>	<b>19</b>
1.1 Modelo Esférico Médio na Versão de Curie-Weiss . . . . .	19
1.1.1 Representação de Fourier para o Modelo Esférico Médio . . . . .	22
1.1.2 Considerações sobre o Modelo Esférico no Ensemble Canônico . . . . .	24
1.1.3 Comportamento Crítico . . . . .	26
1.2 Modelo Esférico Quântico Elementar . . . . .	29
1.2.1 Quantização Canônica . . . . .	29
1.2.2 Comportamento Crítico . . . . .	34
<b>2 Integral de Trajetória e Aplicações</b>	<b>39</b>
2.1 Discussões Gerais . . . . .	39
2.2 Aplicações . . . . .	44
2.2.1 Partícula Livre . . . . .	45
2.2.2 Oscilador Harmônico . . . . .	46
2.3 Conexão com a Mecânica Estatística . . . . .	52
2.4 Modelo Esférico Quântico Elementar . . . . .	54
<b>3 Modelo Esférico Elementar na Presença de um Campo Aleatório</b>	<b>63</b>
3.1 Modelo Esférico Médio na Versão de Curie-Weiss . . . . .	63

3.2	Modelo Esférico Quântico Elementar . . . . .	65
3.2.1	Quantização Canônica . . . . .	65
3.2.2	Integrais de Trajetória . . . . .	68
<b>4</b>	<b>Modelo Esférico Quântico com Competição</b>	<b>73</b>
4.1	Quantização Canônica . . . . .	74
4.2	Comportamento Crítico . . . . .	79
4.2.1	Análise de Convergência para $p < 1/4$ . . . . .	81
	$T \neq 0$ . . . . .	81
	$T = 0$ . . . . .	82
4.2.2	Análise de Convergência para $p > 1/4$ . . . . .	83
	$T \neq 0$ . . . . .	84
	$T = 0$ . . . . .	85
4.2.3	Comportamento Crítico com $T \neq 0$ . . . . .	86
	$p < 1/4$ . . . . .	88
	$p > 1/4$ . . . . .	90
4.2.4	Comportamento Crítico com $T = 0$ . . . . .	91
	$p < 1/4$ . . . . .	92
	$p > 1/4$ . . . . .	93
4.2.5	Comportamento Crítico para $p = 1/4$ . . . . .	95
	$T \neq 0$ . . . . .	95
	$T = 0$ . . . . .	98
4.3	Competição em $m \leq d$ direções . . . . .	100
4.4	Diagramas de Fases . . . . .	103
4.5	Correlações spin-spin . . . . .	106
<b>5</b>	<b>Modelo Esférico Quântico com Desordem</b>	<b>109</b>
5.1	Desordem do tipo Hopfield . . . . .	110



---

5.1.1	Modelo Clássico . . . . .	110
5.1.2	Modelo Quântico . . . . .	116
5.1.3	Comportamento Crítico Quântico . . . . .	123
5.2	Desordem do tipo van Hemmem . . . . .	125
5.2.1	Modelo Clássico . . . . .	125
5.2.2	Modelo Quântico . . . . .	128
<b>A</b>	<b>Equação de Schrödinger</b>	<b>131</b>
<b>B</b>	<b>Energia de Interação</b>	<b>134</b>
<b>C</b>	<b>Integrais de Trajetória - Modelo com Competição</b>	<b>136</b>
<b>D</b>	<b>Expoente Crítico Dinâmico</b>	<b>139</b>

# Introdução

O modelo de Ising, proposto há cerca de noventa anos para explicar a transição ferromagnética, é definido pelo hamiltoniano de spin

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

em que  $\sigma_i = \pm 1$  é uma variável de spin no sítio  $i = 1, 2, \dots, N$  de uma rede cristalina,  $H$  é um campo magnético externo,  $J > 0$  é uma energia de interação, e a primeira soma deve ser realizada sobre todos os pares de sítios vizinhos mais próximos na rede. A função canônica de partição associada ao modelo de Ising é dada por

$$Z_N = Z(T, H, N) = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(-\beta \mathcal{H}), \quad (2)$$

em que  $\beta = 1/(k_B T)$ ,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura absoluta, e a soma deve ser realizada sobre todas as configurações das variáveis de spin. As propriedades termodinâmicas são obtidas a partir do cálculo da energia livre por sítio,

$$g = g(T, H) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( -\frac{1}{\beta N} \ln Z_N \right). \quad (3)$$

Em uma dimensão, ao longo de uma cadeia de sítios, esse problema foi resolvido exatamente por Ernst Ising, na sua tese de doutoramento, defendida em 1924 [1, 2]. Nesse

caso unidimensional a solução é relativamente simples, mas muito pouco interessante, pois  $g(T, H)$  é uma função bem comportada, sem nenhuma possibilidade de explicar a transição ferromagnética. De fato, é simples escrever uma expressão analítica para a magnetização por sítio,  $m = m(T, H)$ , e mostrar que não há magnetização espontânea, isto é, que  $m \rightarrow 0$  quando  $H \rightarrow 0$  para qualquer valor da temperatura. No entanto, várias técnicas aproximadas, do tipo “campo médio”, indicavam que esse modelo de Ising poderia ter uma transição de fases em duas ou três dimensões, de acordo com o figurino da teoria das transições de fase de Landau [3].

Em 1944 Onsager obteve uma expressão exata para a energia livre do modelo de Ising na rede quadrada, com interações de primeiros vizinhos, mas na ausência de campo externo, que é um resultado paradigmático na área de física estatística [4]. Nessas condições é possível mostrar que o calor específico a campo nulo diverge logaritmicamente na região crítica,

$$c_{H=0} \sim A \ln |T - T_c|, \quad (4)$$

quando  $T \rightarrow T_c$ , com uma temperatura crítica bem definida,  $k_B T_c / J = 2 / \ln(1 + \sqrt{2})$ . Detalhes sobre a solução do modelo de Ising em uma e em duas dimensões, bem como propostas de aproximações, são facilmente encontrados na literatura [5, 6, 7]. Embora, sob o ponto de vista numérico, quase todas as propriedades do modelo de Ising sejam bem conhecidas, ainda não se conhece uma solução exata do problema bidimensional na presença de campo aplicado e nem qualquer solução numa rede tridimensional.

Logo após a publicação do trabalho de Onsager, Marc Kac [8] propôs dois modelos bem mais simples, gaussiano e esférico, que se mostraram solúveis analiticamente em qualquer dimensão, mesmo na presença de campo externo, e que se tornaram excelentes laboratórios no estudo sobre transições de fases [9, 10].

O modelo gaussiano consiste em substituir as variáveis discretas de Ising, de caráter binário, por variáveis de spin contínuas, assumindo todos os valores reais,  $-\infty < \sigma_i < \infty$ , com a adição de um “peso gaussiano” para assegurar a convergência da função de partição.

Em termos bem gerais, a energia desse modelo é dada por

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N J_{i,j} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (5)$$

em que as somas são realizadas sobre os sítios de uma rede cristalina  $d$ -dimensional e os parâmetros de energia  $J_{i,j}$  dependem apenas da distância entre o par de sítios  $i$  e  $j$ . A função canônica de partição desse “modelo gaussiano” é dada por

$$Z_G = \prod_{i=1}^N \left( \int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma_i \right) \exp \left[ \frac{\beta}{2} \sum_{i,j=1}^N J_{i,j} \sigma_i \sigma_j + \beta H \sum_{i=1}^N \sigma_i - \frac{b}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 \right], \quad (6)$$

em que as integrais são realizadas sobre o eixo real, e o peso gaussiano contém o parâmetro  $b > 0$ . A forma quadrática do expoente é facilmente diagonalizável, mas a integral diverge abaixo de determinada temperatura crítica, tornando o modelo fisicamente questionável. No caso ferromagnético,  $J_{ij} = J > 0$ , com interações de primeiros vizinhos (quando  $i$  e  $j$  são sítios vizinhos mais próximos de uma rede hipercúbica), a temperatura crítica é dada por  $k_B T_c = dJ/b$ . O modelo gaussiano apresenta um comportamento crítico clássico, do tipo campo médio, tornando-se, no entanto, patológico a baixas temperaturas.

Mark Kac propôs então o “modelo esférico”, que também se caracteriza por variáveis de spin contínuas, definidas sobre o eixo real, mas que existe abaixo da temperatura crítica. O modelo esférico é solúvel analiticamente em qualquer dimensão, na presença de campo externo, e exhibe comportamento crítico que não se enquadra na teoria de Landau. No modelo esférico o peso gaussiano é substituído por um “vínculo esférico”,

$$\exp \left[ -\frac{b}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 \right] \implies \delta \left( \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 - N \right). \quad (7)$$

As configurações das variáveis de spin correspondem então a todos os pontos sobre a superfície de uma hiperesfera  $N$  dimensional. Note que as variáveis de Ising,  $\sigma_i = \pm 1$ , que conduzem a um conjunto discreto de  $2^N$  configurações, também satisfazem esse vínculo esférico. A função

canônica de partição do modelo esférico é dada por

$$Z_E = \prod_{j=1}^N \left( \int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma_j \right) \exp \left[ \frac{\beta}{2} \sum_{i,j=1}^N J_{i,j} \sigma_i \sigma_j + \beta H \sum_{j=1}^N \sigma_j \right] \delta \left( N - \sum_{j=1}^N \sigma_j^2 \right), \quad (8)$$

em que a função  $\delta$  de Dirac garante o vínculo esférico. Uma das primeiras aplicações à física estatística da técnica de integração de ponto de sela foi apresentada por Berlin e Kac [11] na solução desse modelo esférico. A partir da representação integral da função  $\delta$ ,

$$\delta \left( N - \sum_{j=1}^N \sigma_j^2 \right) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \exp \left[ s \left( N - \sum_{j=1}^N \sigma_j^2 \right) \right] ds, \quad (9)$$

Berlin e Kac obtiveram a energia livre do modelo ferromagnético,  $J_{ij} = J > 0$ , com interações entre vizinhos mais próximos. Esse modelo esférico é definido para qualquer temperatura, podendo exibir uma fase ordenada (ferromagnética), com campo nulo, abaixo de determinada temperatura crítica. A solução exata do modelo esférico pode ser obtida em qualquer dimensão, inclusive na presença de campo magnético externo. Em particular, para interações ferromagnéticas de curto alcance, a dimensão crítica inferior é  $d_c^i = 2$ ; para  $d \leq 2$  o modelo não apresenta fase ferromagnética. Por outro lado, a dimensão crítica superior é  $d_c^s = 4$ ; para  $d > 4$  os expoentes críticos são do tipo campo médio [12].

Uma formulação alternativa, conhecida como “modelo esférico médio”, que de certa forma consiste em uma mudança de ensemble, foi proposta por Lewis e Wannier [13], conduzindo essencialmente aos mesmos resultados termodinâmicos do modelo esférico usual no ensemble canônico. Esse modelo é definido pela função de partição

$$\Xi_{EM} = \prod_{i=1}^N \left( \int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma_i \right) \exp \left[ \frac{\beta}{2} \sum_{i,j=1}^N J_{i,j} \sigma_i \sigma_j + \beta H \sum_{i=1}^N \sigma_i - \beta \mu \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 \right], \quad (10)$$

em que foi introduzido um “potencial químico”  $\mu$  para garantir a existência de médias (grande canônicas) em relação a todas as grandezas envolvidas. Note que o parâmetro  $\mu$ , variável

conjugada a  $\sum_i \sigma_i^2$ , representa o papel de um multiplicador de Lagrange. De fato, devemos ter

$$\left\langle \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 \right\rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \Xi_{EM} = N, \quad (11)$$

ou seja, a condição de vínculo é satisfeita de forma média, dando origem à denominação “modelo esférico médio”, uma vez que os spins ocupam a superfície de uma esfera em  $N$  dimensões apenas em média. Existem algumas discrepâncias nos resultados obtidos a partir do modelo esférico e do modelo esférico médio. No entanto, essas discrepâncias não estão relacionadas com grandezas termodinâmicas usuais como a magnetização e a suscetibilidade [14, 9]. Estudos detalhados sobre as propriedades dos modelos esférico e esférico médio podem ser encontrados no trabalho de revisão de Joyce [12].

Há muito tempo se notou que o modelo esférico - na realidade, qualquer modelo magnético de “spins” contínuos - apresenta uma série de anomalias a baixas temperaturas, inclusive valores negativos da entropia. Esse tipo de problema conduz à procura de algum ingrediente relevante a baixas temperaturas. Uma possibilidade consiste na introdução de efeitos quânticos, que podem ser obtidos por meio da atribuição de um caráter quântico às variáveis de spin [15]. Esses aspectos serão discutidos em detalhe e constituem o objetivo principal desse trabalho.

De uma maneira geral, a investigação de transições de fase e fenômenos críticos de natureza quântica tem despertado muito interesse. Uma transição de fase é denominada quântica quando ocorre a temperatura nula e algum parâmetro não térmico sofre uma variação, como a pressão, composição química ou campo magnético. Esse tipo de transição está relacionado às flutuações quânticas, que são consequência do princípio de incerteza de Heisenberg, em contraste com as transições clássicas, que se relacionam às flutuações térmicas. Nesse trabalho vamos nos referir a transições de fases clássicas quando elas ocorrem a temperatura finita, sem que sejam necessariamente do tipo Landau ou campo médio.

A versão quântica do modelo esférico médio também é exatamente solúvel, tornando-se um protótipo para o estudo das transições de fase quânticas. A versão quântica do mo-

delo esférico permite um estudo detalhado do comportamento crítico a temperatura finita (transição clássica), bem como a temperatura nula (transição quântica). Em um de seus trabalhos sobre o modelo esférico, Vojta analisa o comportamento crítico da versão quântica com interações de curto e longo alcance, usando o esquema de quantização canônica [16]. Nesse caso, o modelo esférico médio é mais apropriado, pois as variáveis de spins são interpretadas como operadores, tornando mais difícil a implementação do vínculo esférico, dado pela equação (7). Nessa mesma linha, Oliveira e colaboradores estudaram os efeitos das flutuações térmicas e quânticas na função de correlação, no comprimento de correlação, na entropia e no calor específico, num modelo esférico com interações de curto alcance, tentando estabelecer contato com o comportamento de modelos quânticos para cadeias de spins de interesse físico [17].

Na literatura já foram propostas diferentes versões quânticas do modelo esférico [18, 19]. O método de quantização canônica não é a única maneira de quantizar um modelo, mas é essencial que diferentes formulações quânticas corrijam os resultados clássicos a baixas temperaturas e ao mesmo tempo sejam capazes de reproduzir o comportamento crítico, a temperatura finita, de acordo com as descrições clássicas. Devemos lembrar que, a temperaturas finitas, as flutuações térmicas devem predominar sobre as flutuações quânticas, pois  $k_B T$  deve ser bem maior do que uma energia quântica típica  $\hbar\omega$ .

A existência de diferentes abordagens quânticas do modelo esférico proporcionou a nossa motivação para utilizar tanto métodos de quantização canônica quanto métodos de integração funcional a fim de estudar soluções exatas, de preferência analíticas, de alguns problemas bem específicos. Em particular analisamos os seguintes sistemas:

(i) o modelo esférico quântico com interações de campo médio, do tipo Curie-Weiss, que nós denominamos “modelo esférico quântico elementar”, proveniente da quantização do modelo esférico médio com interações de alcance infinito. Esse é um sistema particularmente simples, que pode ser tratado exatamente, e que fornece um exemplo muito claro e ilustrativo de uma transição de fase quântica. A versão clássica desse modelo, nos ensembles

microcanônico e canônico, foi analisada em trabalho detalhado de Kastner e Schnetz [20], que não se preocuparam, no entanto, como o modelo esférico médio;

(ii) uma versão quântica do modelo esférico médio com interações competitivas entre primeiros e segundos vizinhos, ao longo de uma única direção ou de várias direções, que fornece um exemplo de ponto multicrítico de Lifshitz [21]. A versão clássica desse modelo foi bem explorada por diversos autores [22, 23], mas aparentemente não há estudos de nenhuma versão quântica;

(iii) versões quânticas do modelo esférico médio com campos aleatórios [24] ou desordem de sítios. Vamos nos limitar a problemas que podem ser resolvidos exatamente, como as versões quânticas do modelo de Hopfield com um número finito de padrões, ou o modelo de vidro de spin de van Hemmen [25, 26]. Nesse sentido, não vamos abordar as versões quânticas de modelos de vidros de spin, do tipo Sherrington-Kirkpatrick [27], que demandam a utilização do método das réplicas [28], e aparentemente não podem ser tratadas de maneira exata pelo menos para modelos com spins de Ising. Vários modelos esféricos de vidro de spin são encontrados na literatura [29, 30].

No capítulo 1 apresentamos uma breve introdução ao modelo esférico clássico com interações de campo médio, do tipo Curie-Weiss. Obtemos de forma exata a função de partição, sem a necessidade da representação de Fourier, e logo em seguida mostramos que a utilização da representação de Fourier, com condições periódicas de contorno, conduz a resultados termodinâmicos absolutamente equivalentes. Mostramos a equivalência dos resultados termodinâmicos para as formulações canônica (modelo esférico usual) e grande canônica (modelo esférico médio). Apesar de toda a sua simplicidade, o modelo esférico clássico com interações de campo médio fornece um exemplo muito claro da formação de uma singularidade, semelhante ao caso de uma transição de Bose-Einstein. Mostramos que os expoentes críticos associados à magnetização, à suscetibilidade e ao calor específico são típicos de campo médio, e que a entropia diverge a baixas temperaturas, em contradição com a terceira lei da termodinâmica. Em seguida, estudamos a versão quântica desse modelo, denominada “mo-



delo esférico quântico elementar”, que pode ser analisada em detalhe através do método de quantização canônica [16], em termos da temperatura  $T$  e de um parâmetro  $g$  associado às flutuações quânticas. No limite termodinâmico, a expressão que determina o vínculo esférico conduz ao mesmo tipo de singularidade do caso clássico. No contexto quântico, é possível mostrar que a entropia é nula no limite  $T \rightarrow 0$ , corrigindo a divergência do resultado clássico. No capítulo 2 introduzimos a formulação de integrais de trajetória [31], que também é utilizada para analisar o modelo esférico quântico elementar. Para exemplificar a eficiência do método, apresentamos a amplitude de transição de dois modelos simples (partícula livre e oscilador harmônico) e mostramos como a função de partição pode ser escrita em termos dessa amplitude no formalismo de integrais de trajetória. Calculamos então a amplitude de transição associada ao modelo esférico quântico elementar, que nos conduz à função de partição, verificando assim a equivalência dos resultados termodinâmicos nos formalismos de integrais de trajetória e de quantização canônica. No capítulo 3 introduzimos uma configuração de campos aleatórios  $\{H_i\}$  no modelo esférico elementar, com média nula,  $\langle H_i \rangle = 0$ , e variância  $\langle H_i H_j \rangle = \Delta^2 \delta_{ij}$ . Obtemos a fronteira crítica em termos dos parâmetros  $T$  e  $\Delta$ . Em seguida tratamos esse sistema desordenado pelas técnicas de quantização canônica e integrais de trajetória, obtendo resultados idênticos (a fronteira crítica em termos de  $T$ ,  $\Delta$  e  $g$  não comporta a existência de um ponto tricrítico). No capítulo 4, apresentamos o modelo esférico quântico com interações competitivas entre primeiros e segundo vizinhos. Em particular, consideramos interações ferromagnéticas,  $J_1 > 0$ , entre primeiros vizinhos em  $d$  dimensões, e interações antiferromagnéticas,  $J_2 < 0$ , entre segundos vizinhos ao longo da direção  $d$ , analisando o sistema em termos de um parâmetro de competição  $p = -J_2/J_1 > 0$ . Em seguida, generalizamos a competição para  $m$  direções ( $m \leq d$ ) e analisamos os diagramas de fases clássico e quântico. A partir do modelo unidimensional é possível mostrar que a correlação de dois pontos decai exponencialmente com uma certa oscilação para certos valores de  $T$  e  $p$ . Inicialmente tratamos o modelo através do método de quantização canônica; a formulação através de integrais de trajetória é apresentada no apêndice C. Fazemos uma análise

detalhada do comportamento crítico, em particular nas vizinhanças do ponto de Lifshitz,  $p = 1/4$ , e mostramos que em temperaturas finitas o sistema apresenta um comportamento crítico clássico. A partir desses resultados, mostramos que o comportamento crítico depende explicitamente da dimensão da rede cristalina e das direções em que ocorre competição. No capítulo 5, abordamos o modelo esférico quântico de campo médio com desordem de sítio, do tipo van Hemmen ou Hopfield, utilizando a formulação de integrais de trajetória, pois nesse caso o método de quantização canônica torna complicada a diagonalização do hamiltoniano. A amplitude de transição é calculada usando a lei dos grandes números, e é possível mostrar que o modelo esférico com desordem do tipo van Hemmen corresponde ao modelo com desordem do tipo Hopfield com dois padrões ( $p = 2$ ). Finalmente, incluímos mais três apêndices para discutir a equivalência da formulação de integrais de trajetória com a equação de Schrödinger, a forma explícita da energia de interação do modelo com competição ao longo de uma direção, e o expoente crítico dinâmico associado às flutuações quânticas.

# Capítulo 1

## Modelo Esférico Quântico Elementar

Inicialmente, apresentamos de forma simples e pedagógica as propriedades termodinâmicas do modelo esférico médio na versão de Curie-Weiss, ou seja, com interações do tipo campo médio (alcance infinito). Fazemos contato com alguns resultados da literatura e apresentamos comentários sobre certas questões, como anomalias do comportamento clássico, o papel do limite termodinâmico no estabelecimento das singularidades e a equivalência de ensembles. Consideramos então a versão quântica desse modelo, denominada “modelo esférico quântico elementar”, que pode ser analisada detalhadamente, em termos da temperatura  $T$  e de um parâmetro  $g$  associado às flutuações quânticas, constituindo talvez o exemplo mais simples de uma transição de fase quântica. A versão quântica é apresentada pelo método de quantização canônica.

### 1.1 Modelo Esférico Médio na Versão de Curie-Weiss

A função de partição do modelo esférico médio, dada pela Eq. (10), pode ser escrita como

$$\Xi_{EM} = \Xi_N(\beta, H, \mu) = \prod_{\mathbf{r}} \left( \int_{-\infty}^{\infty} d\sigma_{\mathbf{r}} \right) \exp \left[ -\beta \mathcal{H}(\sigma) - \beta \mu \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}}^2 \right], \quad (1.1)$$

com o hamiltoniano

$$\mathcal{H}(\sigma) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \sigma_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}'} - H \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}}, \quad (1.2)$$

em que  $\mathbf{r}$  designa um sítio de uma rede hipercúbica de  $N$  sítios,  $H$  é o campo magnético externo, e  $J_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$  é a energia de interação, que depende apenas da distância entre os sítios  $\mathbf{r}$  e  $\mathbf{r}'$ .

Na versão de Curie-Weiss, todos os pares interagem igualmente, com uma energia de interação inversamente proporcional a  $N$ . Nesse caso, temos

$$\mathcal{H}(\sigma) = -\frac{J}{2N} \left( \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}} \right)^2 - H \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}}, \quad (1.3)$$

com  $J > 0$  no caso ferromagnético. A função de partição associada ao modelo na versão de Curie-Weiss é dada por

$$\Xi_N(\beta, H, \mu) = \prod_{\mathbf{r}} \left( \int_{-\infty}^{\infty} d\sigma_{\mathbf{r}} \right) \exp \left[ \frac{\beta J}{2N} \left( \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}} \right)^2 + \beta H \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}} - \beta \mu \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}}^2 \right]. \quad (1.4)$$

Usando a identidade gaussiana,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2 + 2ax) dx = \sqrt{\pi} \exp(a^2), \quad (1.5)$$

podemos escrever a forma analítica

$$\Xi_N(\beta, H, \mu) = \left( \frac{\pi}{\beta} \right)^{N/2} \exp \left[ \frac{N\beta H^2}{4(\mu - \frac{J}{2})} \right] \left( \frac{1}{\mu} \right)^{\frac{N-1}{2}} \left( \mu - \frac{J}{2} \right)^{-1/2}, \quad (1.6)$$

que é válida para  $\mu > J/2$ . Essa é uma expressão exata para qualquer  $N$ , em que o valor  $\mu = \mu_c \equiv J/2$  deve ser reconhecido como o potencial químico crítico.

Implementando o vínculo esférico, dado pela equação (11), obtemos

$$\beta = \frac{\beta H^2}{4(\mu - \frac{J}{2})^2} + \frac{N-1}{N} \frac{1}{2\mu} + \frac{1}{2N} \frac{1}{(\mu - \frac{J}{2})}. \quad (1.7)$$

A equação (1.7) determina  $\mu$  em função de  $\beta$  e  $H$  para qualquer valor de  $N$ . O limite termodinâmico,  $N \rightarrow \infty$ , deve ser tomado com certa cautela, principalmente quando  $H \rightarrow 0$  ou  $\mu \rightarrow J/2$ .

Essas questões de limite, que também aparecem no contexto da transição de Bose-Einstein, sempre se colocam na análise do comportamento crítico do modelo esférico. No nosso caso a situação é particularmente simples. Por exemplo, com  $H = 0$ , mantendo o número  $N$  fixo, temos a condição de vínculo

$$\beta = \frac{1}{2\mu} + \frac{1}{N} \frac{J}{4\mu(\mu - \frac{J}{2})}, \quad (1.8)$$

que tem sentido apenas para  $\mu > J/2$ . A partir da equação (1.8), podemos obter uma expressão analítica para  $\mu$  em função de  $\beta$ , para qualquer  $N$ , e indicar graficamente a singularidade no limite  $N \rightarrow \infty$  (ver a figura 1.1). No limite termodinâmico,  $N \rightarrow \infty$ , obtemos o comportamento singular,

$$\mu = \begin{cases} J/2; & (\beta > 1/J) \\ 1/(2\beta); & (\beta < 1/J) \end{cases}, \quad (1.9)$$

em que  $\beta_c = 1/J$  define a temperatura crítica ( $k_B T_c = J$ ). Para  $H \neq 0$ , é fácil perceber que  $\mu = \mu(\beta, H) > J/2$  é uma função suave, definida para qualquer temperatura no limite  $N \rightarrow \infty$ .

O modelo esférico na versão de Curie-Weiss constitui dessa forma um exemplo particularmente simples para ilustrar o mecanismo de formação de uma singularidade, que é idêntico no caso do modelo esférico com interações de curto alcance ou na transição de Bose-Einstein (muito bem explicada no capítulo 12 do texto de mecânica estatística de Kerson Huang [5]). Mantendo o estilo pedagógico, apresentamos a representação de Fourier (em geral utilizada para analisar o modelo com interações de curto alcance), discutimos a equivalência de

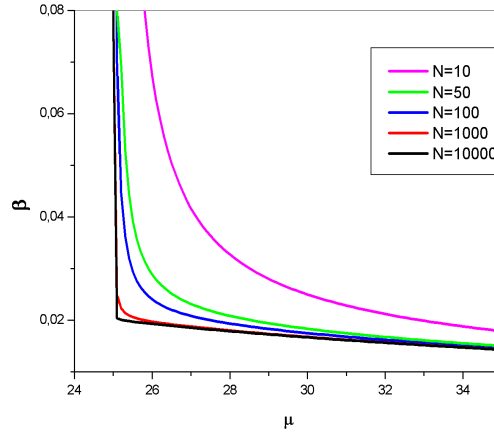


Figura 1.1: Gráfico ilustrativo da singularidade, no limite termodinâmico, no modelo elementar clássico, com  $J = 50$ .

ensembles e o comportamento crítico para esse modelo.

### 1.1.1 Representação de Fourier para o Modelo Esférico Médio

A solução mais comum do modelo esférico é obtida pela introdução de variáveis de Fourier,

$$\sigma_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \hat{\sigma}_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}), \quad (1.10)$$

em que o vetor  $\mathbf{q}$  está restrito à primeira zona de Brillouin da rede hipercúbica em  $d$  dimensões. Em termos gerais, temos que diagonalizar a forma quadrática

$$Q = \frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \sigma_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}'} + \beta H \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}} - \beta \mu \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}}^2, \quad (1.11)$$

em que  $J_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} = J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ , incluindo o caso particular das interações do tipo Curie-Weiss.

Dessa forma, temos

$$Q = \frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{q}} \hat{J}(\mathbf{q}) \hat{\sigma}_{\mathbf{q}} \hat{\sigma}_{-\mathbf{q}} + \beta H N^{-1/2} \hat{\sigma}_0 - \beta \mu \sum_{\mathbf{q}} \hat{\sigma}_{\mathbf{q}} \hat{\sigma}_{-\mathbf{q}}, \quad (1.12)$$

com

$$\hat{J}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{h}} J(\mathbf{h}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{h}). \quad (1.13)$$

Para obter a função de partição é conveniente escrever a equação (1.12) como

$$Q = 2 \sum_{\mathbf{q}>0} \left[ \frac{1}{2} \beta \hat{J}(\mathbf{q}) - \beta \mu \right] |\hat{\sigma}_{\mathbf{q}}|^2 + \left[ \frac{1}{2} \beta \hat{J}(\mathbf{0}) - \beta \mu \right] \hat{\sigma}_0^2 + \beta H N^{-1/2} \hat{\sigma}_0 \quad (1.14)$$

e fazer a transformação de variáveis

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_{\mathbf{q}} &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (x_{\mathbf{q}} + iy_{\mathbf{q}}); & \mathbf{q} \neq 0, \\ \hat{\sigma}_0 &\equiv x_0. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Deve-se notar que  $\{x_{\mathbf{q}}, y_{\mathbf{q}}\}$  é um conjunto de variáveis reais, e que a transformação  $\{\sigma_{\mathbf{r}}\} \rightarrow \{x_{\mathbf{q}}, y_{\mathbf{q}}\}$  é ortogonal, pois

$$\sigma_{\mathbf{r}}^2 = x_0^2 + \sum_{\mathbf{q}>0} (x_{\mathbf{q}}^2 + y_{\mathbf{q}}^2). \quad (1.16)$$

Assim, a função de partição do modelo esférico médio, na representação de Fourier, torna-se

$$\begin{aligned} Z_N &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \prod_{\mathbf{q}>0} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{+\infty} dy_{\mathbf{q}} \right] \exp[Q] \\ &= \left[ \frac{\pi}{\beta \mu - \frac{\beta}{2} \hat{J}(0)} \right]^{1/2} \exp \left\{ \frac{\beta^2 H^2 N}{4 \left[ \beta \mu - \frac{\beta}{2} \hat{J}(0) \right]} \right\} \prod_{\mathbf{q}>0} \ln \left[ \frac{\pi}{\beta \mu - \frac{\beta}{2} \hat{J}(\mathbf{q})} \right]. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Quando tomamos o logaritmo da função de partição,

$$\frac{1}{N} \ln Z_N = \frac{1}{2} \ln \pi - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \ln \left[ \beta \mu - \frac{\beta}{2} \hat{J}(\mathbf{q}) \right] + \frac{\beta^2 H^2}{4 \left[ \beta \mu - \frac{\beta}{2} \hat{J}(0) \right]}, \quad (1.18)$$

verificamos que a solução está de acordo com a expressão correspondente no artigo de revisão de G. S. Joyce [12].

Nesse caso, a condição do vínculo esférico é dada por

$$\beta = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\mu - \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{2}} + \frac{\beta H^2}{4 \left[ \mu - \frac{\hat{J}(0)}{2} \right]^2}. \quad (1.19)$$

Quando admitimos apenas interações do tipo Curie-Weiss,

$$J_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} = \frac{J}{N}, \quad \hat{J}(\mathbf{q}) = J\delta_{\mathbf{q},0}, \quad (1.20)$$

a condição esférica se reduz a

$$\beta = \frac{1}{2N} \frac{1}{\left(\mu - \frac{J}{2}\right)} + \frac{N-1}{2N} \frac{1}{\mu} + \frac{\beta H^2}{4 \left(\mu - \frac{J}{2}\right)^2}, \quad (1.21)$$

que é a mesma expressão (1.7) obtida anteriormente para a versão de Curie-Weiss do modelo esférico médio.

### 1.1.2 Considerações sobre o Modelo Esférico no Ensemble Canônico

Para mostrar a equivalência entre ensembles, usamos a forma quadrática (1.12) e a representação integral da função delta, com  $\beta\mu$  substituído pela variável de integração  $s$ , e escrevemos a função de partição do modelo esférico no ensemble canônico,

$$\begin{aligned} Z_E = & \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} ds \exp \left\{ sN + \frac{1}{2}N \ln \pi \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \ln \left[ s - \frac{1}{2}\beta\hat{J}(\mathbf{q}) \right] + \frac{\beta^2 H^2 N}{4 \left[ s - \frac{1}{2}\beta\hat{J}(0) \right]} \right\}, \end{aligned} \quad (1.22)$$

que é uma expressão válida para qualquer valor de  $N$ . No limite termodinâmico,  $N \rightarrow \infty$ , o



ponto de sela, que fornece o resultado assintótico dessa integral, é dado pela relação

$$\beta = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\frac{s}{\beta} - \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{2}} + \frac{\beta H^2}{4 \left[ \frac{s}{\beta} - \frac{\hat{J}(0)}{2} \right]}, \quad (1.23)$$

que corresponde à “condição esférica”, dada pela equação (1.19), substituindo  $s$  por  $\beta\mu$ . Nesse sentido, sob o ponto de vista termodinâmico, mantendo as diferenças de interpretação, tanto faz analisar o modelo no ensemble canônico ou analisar o modelo esférico médio, que é uma espécie de versão grande canônica do problema original. Segundo observação de Yan e Wannier [9], a equivalência dos resultados termodinâmicos é garantida se o limite termodinâmico for sempre tomado antes do limite de campo nulo ( $H \rightarrow 0$ ).

Na versão de Curie-Weiss,  $\hat{J}(\mathbf{q}) = J\delta_{\mathbf{q},0}$ , a função de partição canônica é dada por

$$\begin{aligned} Z_{ECW} = & \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} ds \exp \left[ sN + \frac{1}{2}N \ln \pi \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \ln \left( s - \frac{\beta J}{2} \right) - \frac{1}{2} (N-1) \ln s + \frac{\beta^2 H^2 N}{4 \left( s - \frac{\beta J}{2} \right)} \right], \end{aligned} \quad (1.24)$$

com a equação de ponto de sela

$$\beta = \frac{1}{2N} \frac{1}{\left( \frac{s}{\beta} - \frac{J}{2} \right)} + \frac{N-1}{2N} \frac{\beta}{s} + \frac{\beta H^2}{4 \left( \frac{s}{\beta} - \frac{J}{2} \right)}, \quad (1.25)$$

que corresponde à condição esférica obtida anteriormente, equação (1.7), com  $s = \beta\mu$ . Em trabalho recente, Kastner e Schnetz [20] escreveram  $Z_{ECW}$  na forma de uma integral,

$$Z_{ECW} = \frac{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right) \sqrt{\pi}} \int_{-1}^{+1} dz (1-z^2)^{\frac{N-3}{2}} \exp \left[ \beta N z \left( \frac{1}{2} z + H \right) \right]. \quad (1.26)$$

Apesar da função de partição acima ser válida para qualquer valor de  $N$ , inclusive  $N$  finito, a dificuldade nesse caso deve-se ao fato dela ser expressa em termos de uma soma infinita de funções hipergeométricas confluentes.

### 1.1.3 Comportamento Crítico

Vamos calcular algumas propriedades termodinâmicas e determinar o comportamento crítico do modelo esférico médio de Curie-Weiss.

#### Magnetização e Suscetibilidade

A magnetização para  $N$  fixo, é dada por

$$m_N \equiv \left\langle \frac{1}{N} \sum_j \sigma_j \right\rangle = \frac{1}{N\beta} \frac{\partial}{\partial H} \ln \Xi_N = \frac{H}{2(\mu - \frac{J}{2})}. \quad (1.27)$$

Para  $H = 0$ ,  $m_N$  é nula acima da temperatura crítica ( $T > T_c$ ), pois  $\mu > J/2$ . Abaixo da temperatura crítica, a expressão de  $m_N$  pode conduzir a uma indeterminação, pois  $\mu \rightarrow J/2$ . Portanto, para  $T < T_c$  devemos recorrer à equação que determina  $\mu$ , (1.7), que pode ser escrita na forma

$$\beta = \beta m_N^2 + \frac{N-1}{N} \frac{1}{2\mu} + \frac{1}{2N} \frac{1}{\mu - \frac{J}{2}}. \quad (1.28)$$

No limite termodinâmico, ainda com campo  $H \neq 0$ , temos  $m_N \rightarrow m$ , em que  $m$  é a magnetização (por sítio) termodinâmica. Então,

$$m^2 = 1 - \frac{1}{2\beta\mu}. \quad (1.29)$$

Assim, a partir da equação (1.29), obtemos a magnetização espontânea na região  $T < T_c$ , com  $H = 0$  e  $\mu = J/2$ ,

$$m_0 = \pm \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{1/2}, \quad (1.30)$$

com  $k_B T_c = J$  e um expoente crítico típico de campo médio ( $\beta = 1/2$ ).

A partir da magnetização podemos obter a suscetibilidade para  $N$  fixo,

$$\chi_N = \left( \frac{\partial m_N}{\partial H} \right)_{T,\mu} = \frac{1}{2 \left( \mu - \frac{J}{2} \right)}. \quad (1.31)$$

Para  $H = 0$ , a suscetibilidade (termodinâmica) acima da temperatura crítica é dada por

$$\chi_0 = \frac{\beta}{1 - \beta J} = \frac{1}{k_B} (T - T_c)^{-1}, \quad (1.32)$$

com  $2\beta\mu = 1$ . A expressão acima define o expoente crítico associado à suscetibilidade acima da temperatura crítica,  $\gamma = 1$ . Abaixo da temperatura crítica, com  $H = 0$ , a suscetibilidade diverge, pois  $\mu = J/2$ . Esse é um resultado típico do modelo esférico com interações de curto ou longo alcance.

## Entropia e Calor Específico

Para  $N$  fixo, a entropia é dada por

$$\begin{aligned} s_N &= - \left( \frac{\partial \phi_N}{\partial T} \right)_{H,\mu} \\ &= -\frac{1}{2\beta} \ln \frac{\pi}{\beta} - \frac{H^2}{4 \left( \mu - \frac{J}{2} \right)} + \frac{1}{\beta} \frac{N-1}{2N} \ln \mu + \frac{1}{2\beta N} \ln \left( \mu - \frac{J}{2} \right). \end{aligned} \quad (1.33)$$

Para  $H = 0$ , temos

$$s_N = k_B \left[ \frac{1}{2} \ln \pi - \frac{1}{2} \ln \beta + \frac{1}{2} - \frac{N-1}{2N} \ln \mu - \frac{1}{2N} \ln \left( \mu - \frac{J}{2} \right) \right]. \quad (1.34)$$

Podemos agora analisar o comportamento crítico da entropia acima e abaixo da temperatura crítica:

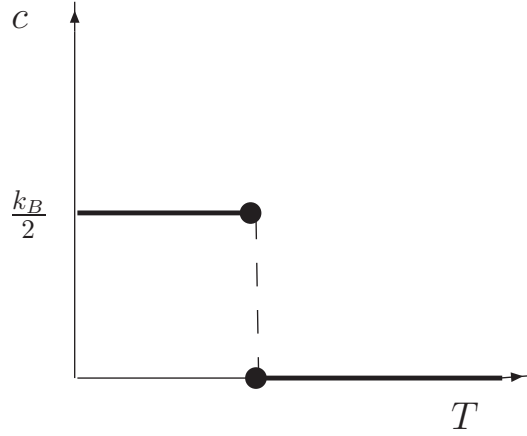


Figura 1.2: Calor específico em função da temperatura, com  $H = 0$ .

(i) Para  $T > T_c$ , temos  $\mu = 1/(2\beta)$ . Então,

$$\begin{aligned}
 s(T, H = 0) &= \lim_{N \rightarrow \infty} s_N(T, H = 0) \\
 &= k_B \left( \frac{1}{2} \ln \pi - \frac{1}{2} \ln \beta + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln \mu \right) \\
 &= \frac{1}{2} k_B [\ln(2\pi) + 1].
 \end{aligned} \tag{1.35}$$

Nesse caso a entropia é uma constante, independente da temperatura.

(ii) Para  $T < T_c$ , temos  $\mu = J/2 = k_B T_c/2$ . Assim, a entropia é dada por

$$s(T, H = 0) = \frac{1}{2} k_B \left[ \ln \left( \frac{2\pi T}{T_c} \right) + 1 \right], \tag{1.36}$$

tornando-se negativa e divergindo no limite  $T \rightarrow 0$ .

Esses resultados são bem conhecidos. Como a entropia a campo nulo é uma constante acima da temperatura crítica, o calor específico, definido como  $c = T(\partial s/\partial T)$ , é nulo nessa região. Por outro lado, abaixo de  $T_c$  a entropia depende logarithmicamente da temperatura, tal que o calor específico é uma constante, com uma descontinuidade na temperatura crítica. Na figura 1.2 ilustramos o comportamento do calor específico a campo nulo em função da

temperatura.

## 1.2 Modelo Esférico Quântico Elementar

Nesta seção, vamos utilizar o método da quantização canônica para analisar uma transição de fase de caráter quântico da versão quantizada do modelo esférico médio com interações do tipo Curie-Weiss (que vamos demoninar “modelo esférico quântico elementar”).

### 1.2.1 Quantização Canônica

De uma forma geral, as versões quânticas estudadas ao longo deste trabalho partem da hamiltoniana clássica com a adição de um termo de energia cinética simples, contendo “variáveis de momento” e governado por um parâmetro de acoplamento (quântico)  $g$ . A escolha do termo cinético não é única e, dependendo de sua forma, o modelo pode apresentar diferentes comportamentos dinâmicos. Consideramos assim o hamiltoniano quântico

$$\mathcal{H}_{EQ} = \frac{g}{2} \sum_{\mathbf{r}} p_{\mathbf{r}}^2 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \sigma_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}'} - H \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}}, \quad (1.37)$$

em que tanto  $\{\sigma_{\mathbf{r}}\}$  quanto as novas variáveis  $\{p_{\mathbf{r}}\}$  são interpretadas como operadores quânticos canonicamente conjugados, obedecendo as regras de comutação

$$[\sigma_{\mathbf{r}}, \sigma_{\mathbf{r}'}] = 0, \quad [p_{\mathbf{r}}, p_{\mathbf{r}'}] = 0, \quad [\sigma_{\mathbf{r}}, p_{\mathbf{r}'}] = i\delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}. \quad (1.38)$$

Quando  $g \rightarrow 0$ , recuperamos o hamiltoniano clássico. Na versão ferromagnética de Curie-Weiss, com  $J > 0$ , o hamiltoniano se reduz a

$$\mathcal{H}_{EQCW} = \frac{g}{2} \sum_{\mathbf{r}} p_{\mathbf{r}}^2 - \frac{J}{2N} \left( \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}} \right)^2 - H \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}}. \quad (1.39)$$

Para obter a função de partição associada ao modelo esférico quântico elementar, devemos diagonalizar a forma quadrática

$$Q_{CW} = -\frac{\beta g}{2} \sum_{\mathbf{r}} p_{\mathbf{r}}^2 + \frac{\beta J}{2N} \left( \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}} \right)^2 + \beta H \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}} - \beta \mu \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}}^2, \quad (1.40)$$

em que  $\mathbf{r}$  designa um vetor da rede hipercúbica em  $d$  dimensões. As variáveis de spin e de momento podem ser escritas em termos de operadores de criação,  $a_{\mathbf{r}}^{\dagger}$ , e aniquilação,  $a_{\mathbf{r}}$ , de acordo com

$$\sigma_{\mathbf{r}} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} (a_{\mathbf{r}} + a_{\mathbf{r}}^{\dagger}) \quad (1.41)$$

e

$$p_{\mathbf{r}} \equiv \frac{-i}{\sqrt{2}} \left( \frac{2\mu}{g} \right)^{1/4} (a_{\mathbf{r}} - a_{\mathbf{r}}^{\dagger}), \quad (1.42)$$

com as relações de comutação

$$[a_{\mathbf{r}}, a_{\mathbf{r}'}] = 0, \quad [a_{\mathbf{r}}^{\dagger}, a_{\mathbf{r}'}^{\dagger}] = 0, \quad [a_{\mathbf{r}}, a_{\mathbf{r}'}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}. \quad (1.43)$$

Dessa forma, obtemos

$$\begin{aligned} Q_{CW} &= -\beta(2g\mu)^{1/2} \sum_{\mathbf{r}} (a_{\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\mathbf{r}} + 1/2) + \frac{\beta H}{\sqrt{2}} \left( \frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{\mathbf{r}} (a_{\mathbf{r}} + a_{\mathbf{r}}^{\dagger}) \\ &+ \frac{\beta J}{4N} \left( \frac{g}{2\mu} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} (a_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}'} + a_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}'}^{\dagger} + a_{\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\mathbf{r}'} + a_{\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\mathbf{r}'}^{\dagger}). \end{aligned} \quad (1.44)$$

É conveniente escrever a expressão acima no espaço de Fourier,

$$a_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{q}}, \quad (1.45)$$

sendo que a soma é sobre todos os vetores de onda  $\mathbf{q}$  pertencentes à primeira zona de Brillouin.

Adotando condições periódicas de contorno,  $a_{N+1} = a_1$ , podemos escrever

$$\begin{aligned}
 Q_{CW} &= -\beta (2g\mu)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{q}} + \beta H \left( \frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \left( \frac{N}{2} \right)^{1/2} (\hat{a}_0 + \hat{a}_0^{\dagger}) \\
 &+ \frac{\beta J}{4} \left( \frac{g}{2\mu} \right)^{\frac{1}{2}} (\hat{a}_0 \hat{a}_0 + \hat{a}_0^{\dagger} \hat{a}_0^{\dagger} + 2\hat{a}_0^{\dagger} \hat{a}_0 + 1) - \frac{\beta N}{2} (2g\mu)^{1/2}. \quad (1.46)
 \end{aligned}$$

Para diagonalizar essa forma quadrática, fazemos uma transformação de Bogoliubov,

$$\begin{aligned}
 c_0 &\equiv u \hat{a}_0 - v \hat{a}_0^{\dagger} + w, \\
 c_0^{\dagger} &\equiv u \hat{a}_0^{\dagger} - v \hat{a}_0 + w, \quad (1.47)
 \end{aligned}$$

em que  $u$ ,  $v$  e  $w$  são variáveis reais a serem determinadas ( $w$  representa uma translação simples na transformação de Bogoliubov, para levar em conta o termo de campo). As relações de comutação são mantidas com a escolha  $u^2 - v^2 = 1$ . Os termos não diagonais podem ser eliminados com a escolha

$$u^2 = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \left( \frac{4\mu}{J} - 1 \right) \left[ \left( \frac{4\mu}{J} - 1 \right)^2 - 1 \right]^{-\frac{1}{2}}, \quad (1.48)$$

$$v^2 = -\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \left( \frac{4\mu}{J} - 1 \right) \left[ \left( \frac{4\mu}{J} - 1 \right)^2 - 1 \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (1.49)$$

e

$$w^2 = \frac{H^2 N}{2} \left( \frac{g}{2\mu} \right)^{1/2} \frac{1}{2g\mu} \left( 1 - \frac{J}{2\mu} \right)^{-2}, \quad (1.50)$$

com  $\mu > J/2$ , como no caso clássico. A partir dessa escolha, obtemos

$$\begin{aligned}
 -\frac{1}{\beta} Q_{CW} &= (2g\mu)^{1/2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} c_{\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{q}} - (2g\mu)^{1/2} \left( 1 - \frac{J}{2\mu} \right)^{1/2} c_0^{\dagger} c_0 \\
 &+ \frac{N-1}{2} (2g\mu)^{1/2} + \frac{1}{2} (2g\mu)^{1/2} \left( 1 - \frac{J}{2\mu} \right)^{1/2} - \frac{H^2 N}{4 \left( \mu - \frac{J}{2} \right)}, \quad (1.51)
 \end{aligned}$$

que também pode ser escrita na forma mais compacta

$$Q_{CW} = \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \left( c_{\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) - \frac{H^2 N}{4 \left( \mu - \frac{J}{2} \right)}, \quad (1.52)$$

sendo  $w_{\mathbf{q}}$  a frequência do modo  $\mathbf{q}$ , definida como

$$\omega_{\mathbf{q}} = \begin{cases} \omega_0^2 = (2g\mu) \left( 1 - \frac{J}{2\mu} \right); & \mathbf{q} = 0 \\ \omega^2 = (2g\mu); & \mathbf{q} \neq 0 \end{cases}. \quad (1.53)$$

A partir dessas expressões, é fácil perceber que as frequências são reais apenas para  $\mu > J/2$ , que define o mesmo valor crítico,  $\mu_c = J/2$ , encontrado no caso clássico.

A função de partição (grande canônica) é formalmente dada por

$$\begin{aligned} \Xi_{QE} &= \Xi_N(\beta, g, H, \mu) \\ &= \text{Tr} \left\{ \exp \left[ -\beta \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \left( \hat{n}_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) + \frac{\beta N H^2}{4 \left( \mu - \frac{J}{2} \right)} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (1.54)$$

em que  $\hat{n}_{\mathbf{q}}$  é o operador número. Tomando o traço no espaço de Fock (número de ocupação), temos a forma explícita

$$\Xi_N(\beta, g, H, \mu) = \exp \left[ \frac{\beta N H^2}{4 \left( \mu - \frac{J}{2} \right)} \right] 2^{-N} \left( \sinh \frac{\beta \omega_0}{2} \right)^{-1} \left( \sinh \frac{\beta w}{2} \right)^{-N+1}, \quad (1.55)$$

que é válida para  $\mu > J/2$  e para qualquer valor de  $N$ . A “energia livre” por sítio associada à função de partição grande canônica é dada por

$$\phi_N = -\frac{H^2}{4 \left( \mu - \frac{J}{2} \right)} + \frac{1}{\beta} \ln 2 + \frac{1}{N\beta} \ln \sinh \frac{\beta w_0}{2} + \frac{1}{\beta} \frac{N-1}{N} \ln \sinh \frac{\beta w}{2}. \quad (1.56)$$

Portanto, o vínculo esférico assume a forma

$$1 = \frac{H^2}{4 \left( \mu - \frac{J}{2} \right)^2} + \frac{1}{N} \frac{g}{2\omega_0} \coth \left( \frac{\beta w_0}{2} \right) + \frac{N-1}{2N} \left( \frac{g}{2\mu} \right)^{1/2} \coth \left( \frac{\beta w}{2} \right). \quad (1.57)$$



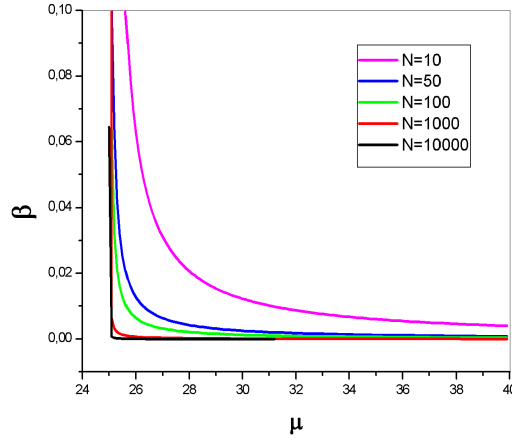


Figura 1.3: Gráfico ilustrativo da singularidade, no limite termodinâmico, no modelo esférico quântico elementar, com  $J = 50$ .

No limite  $g \rightarrow 0$  a equação do vínculo recupera o resultado clássico, equação (1.7), enquanto que nesse limite a “energia livre” apresenta um termo extra proporcional a  $\ln \beta g$ , que está ausente na solução clássica. De acordo com a discussão feita na introdução, esse termo representa uma contribuição adicional devido à quantização e, como veremos no cálculo da entropia, fornece uma correção ao modelo esférico a baixas temperaturas. No limite termodinâmico,  $N \rightarrow \infty$ , a equação (1.57) conduz ao mesmo tipo de singularidade do caso clássico (note que  $\omega_0 \rightarrow 0$  quando  $\mu \rightarrow J/2$ ) (ver a figura 1.3).

Então, para  $N \rightarrow \infty$ , lembrando que  $\mu > J/2$ , temos

$$1 = \frac{H^2}{4\left(\mu - \frac{J}{2}\right)^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{g}{2\mu}\right)^{1/2} \coth\left(\frac{\beta\omega}{2}\right). \quad (1.58)$$

Num diagrama  $g - T$ , a transição de fase ocorre com  $H = 0$  ao longo de uma curva crítica, dada pela expressão

$$1 = \frac{1}{2} \left(\frac{g}{J}\right)^{1/2} \coth\left[\frac{(gJ)^{1/2}}{2k_B T}\right], \quad (1.59)$$

que está ilustrada na figura 1.4. Note que a temperatura crítica clássica é devidamente recuperada no limite  $g \rightarrow 0$ . Note também que  $g_c = 4J$  (no limite  $T \rightarrow 0$ ).

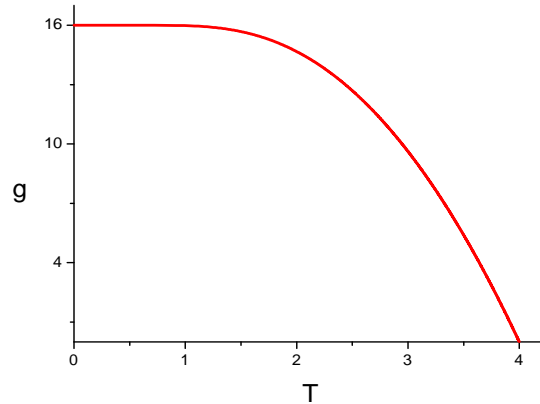


Figura 1.4: Diagrama  $g \times T$  do modelo esférico quântico elementar com  $J = 4$ .

## 1.2.2 Comportamento Crítico

A conexão com a termodinâmica é feita por meio do potencial

$$\phi_N = -\frac{1}{\beta N} \ln \Xi_N, \quad (1.60)$$

com a função  $\Xi_N$  dada pela Eq. (1.55), suplementada pela condição de vínculo esférico (1.58) e com o devido cuidado na operação de limite termodinâmico.

### Magnetização e Suscetibilidade

A magnetização é obtida a partir do limite termodinâmico da função

$$m_N = -\frac{\partial \phi_N}{\partial H} = \frac{H}{2(\mu - \frac{J}{2})}, \quad (1.61)$$

que é a mesma expressão do caso clássico. A campo nulo, na região desordenada,  $T > T_c$ ,  $\mu$  é sempre maior do que  $J/2$ , e a magnetização é nula. Na região ordenada,  $T < T_c$ , temos que tomar cuidado com o limite termodinâmico, pois como  $\mu \rightarrow J/2$  e  $H = 0$ , pode ocorrer uma

indeterminação. Como no caso clássico, para analisar a magnetização na região ordenada é conveniente utilizar a condição esférica, equação (1.57), para escrever  $m_N$  na forma

$$m_N^2 = 1 - \frac{1}{2N} \frac{g}{\omega_0} \coth\left(\frac{\beta\omega_0}{2}\right) - \frac{N-1}{2N} \left(\frac{g}{2\mu}\right)^{1/2} \coth\left(\frac{\beta\omega}{2}\right). \quad (1.62)$$

No limite termodinâmico,  $m_N \rightarrow m$ , temos a magnetização

$$m^2 = 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{g}{2\mu}\right)^{1/2} \coth\left(\frac{\beta\omega}{2}\right). \quad (1.63)$$

Assim, na região ordenada, com  $\mu = J/2$  e  $H = 0$ , obtemos a magnetização espontânea

$$m = \pm \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{g}{J}\right)^{1/2} \coth\left[\frac{1}{2}\beta(gJ)^{1/2}\right] \right\}^{1/2}, \quad (1.64)$$

que se anula sobre a curva crítica no plano  $g-T$ . É fácil analisar o comportamento assintótico da magnetização espontânea:

(i) No limite  $g \rightarrow 0$ , recuperamos o resultado clássico, com expoente crítico  $\beta = 1/2$ . Isso acontece pois a magnetização é determinada pela derivada da “energia livre” com relação ao campo. Como o termo adicional, proporcional a  $\ln \beta g$ , na “energia livre” não depende do campo, a magnetização recupera o caso clássico.

(ii) No limite  $T \rightarrow 0$ , temos

$$m^2 \rightarrow 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{g}{J}\right)^{1/2}; \quad (1.65)$$

nas vizinhanças do ponto crítico quântico,  $g \rightarrow g_c$ , podemos escrever

$$m^2 \rightarrow -\frac{1}{2g_c} (g - g_c), \quad (1.66)$$

usando o fato que  $g_c \equiv 4J$ . O expoente crítico da versão quântica,  $\beta_g = 1/2$ , assume o mesmo valor característico das abordagens de campo médio.

A suscetibilidade magnética, para  $N$  fixo, é dada por

$$\chi_N = \frac{\partial m_N}{\partial H} = \frac{1}{2\left(\mu - \frac{J}{2}\right)}. \quad (1.67)$$

Como acontece no caso clássico, a campo nulo, a suscetibilidade continua divergindo na região ordenada, pois  $\mu = J/2$ . Na região desordenada, temos a condição de vínculo, equação (1.58),

$$1 = \frac{1}{2} \left( \frac{g}{2\mu} \right)^{1/2} \coth \left[ \frac{1}{2} \beta (2g\mu)^{1/2} \right], \quad (1.68)$$

com  $H = 0$ . Embora seja difícil obter uma forma explícita de  $\mu$  em função de  $T$  e  $g$ , a equação do vínculo define  $\mu$  em função dessas variáveis. Assim, na região desordenada, podemos analisar os comportamentos assintóticos  $T = 0$  e  $g = 0$ :

(i) Para  $T = 0$  e  $g \rightarrow g_c^+$ , a condição do vínculo, equação (1.68), conduz a  $\mu = g/8$ . Consequentemente,

$$\chi(g, T = 0) \propto (g - g_c)^{-1}, \quad (1.69)$$

resultando em  $\gamma_g = 1$  (expoente crítico de campo médio).

(ii) Para  $g = 0$  e  $T \rightarrow T_c^+$ , a condição do vínculo conduz a  $\mu = 1/(2\beta)$ . Dessa forma,

$$\chi(g = 0, T) \propto (T - T_c)^{-1}, \quad (1.70)$$

com  $\beta_c = 1/J$  e  $\gamma = 1$ , recuperando o comportamento clássico usual. Novamente, a suscetibilidade recupera o caso clássico quando  $g \rightarrow 0$ , pois ela não depende do termo adicional que a “energia livre” do modelo quântico apresenta.

## Entropia e Calor Específico

A entropia  $s_N$  é obtida a partir de

$$\begin{aligned} \frac{s_N}{k_B} = \beta^2 \frac{\partial \phi_N}{\partial \beta} &= -\ln 2 - \frac{1}{N} \ln \left( \sinh \frac{\beta \omega_0}{2} \right) - \frac{N-1}{N} \ln \left( \sinh \frac{\beta \omega}{2} \right) \\ &+ \frac{1}{N} \frac{\beta \omega_0}{2} \coth \frac{\beta \omega_0}{2} + \frac{N-1}{N} \frac{\beta \omega}{2} \coth \frac{\beta \omega}{2}. \end{aligned} \quad (1.71)$$

No limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ),  $s_N \rightarrow s$ , temos

$$\frac{s}{k_B} = -\ln 2 - \ln \left( \sinh \frac{\beta \omega}{2} \right) + \frac{\beta \omega}{2} \coth \frac{\beta \omega}{2}, \quad (1.72)$$

com a frequência  $\omega$  dada pela Eq. (1.53).

A campo nulo,  $H = 0$ , na região ordenada ( $T < T_c$ ), temos  $\mu = J/2$ . Portanto, a entropia é dada por

$$\frac{1}{k_B} s(T, H = 0, g) = -\ln 2 - \ln \sinh \left[ \frac{\beta}{2} (gJ)^{1/2} \right] + \frac{\beta}{2} (gJ)^{1/2} \coth \left[ \frac{\beta}{2} (gJ)^{1/2} \right]. \quad (1.73)$$

Não é difícil perceber que no limite  $T \rightarrow 0$  a entropia é nula, corrigindo a divergência do resultado clássico. Pode-se também perceber que o calor específico é nulo. Por outro lado, no limite  $g \rightarrow 0$ , não é possível recuperar o caso clássico, pois a entropia é definida como a derivada da “energia livre” em relação a  $\beta$ . Como o termo adicional depende explicitamente de  $\beta$ , a entropia apresenta um termo adicional proporcional a  $\ln g\beta$ . Na região desordenada,  $T > T_c$ , visto que não é possível obter uma forma analítica de  $\mu$  em função de  $T$  e  $g$ , podemos analisar o comportamento assintótico:

(i) para  $T = 0$  e  $g \rightarrow g_c^+$  temos  $\mu = g/8$ . Conseqüentemente, a entropia é nula, corrigindo o caso clássico.

(ii) para  $g = 0$  e  $T \rightarrow T_c^+$  não recuperamos o caso clássico, devido à presença do termo proporcional a  $\ln g\beta$ .

Existem diferentes maneiras de quantizar um modelo e cada uma pode ser mais ou menos apropriada de acordo com o problema em questão. Em particular, o método de integrais de trajetória é conveniente em muitas situações e será discutido em detalhe no próximo capítulo.

# Capítulo 2

## Integral de Trajetória e Aplicações

Este capítulo é dedicado à apresentação da formulação de integrais de trajetória, envolvendo o estudo de alguns exemplos simples e a conexão com a mecânica estatística [31]. Em seguida, retomamos o modelo esférico quântico elementar dentro desse contexto.

### 2.1 Discussões Gerais

O método de integrais de trajetória é uma formulação muito útil na descrição da mecânica quântica. De partida, consideramos o hamiltoniano unidimensional de uma partícula em movimento, na presença de um potencial  $V(\hat{q})$ ,

$$\mathcal{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}). \quad (2.1)$$

A amplitude de probabilidade de encontrar a partícula no ponto  $q'$  no tempo  $t = T$ , considerando que ela estava originalmente na posição  $q$  no instante  $t = 0$ , é dada por

$$K(q', T; q, 0) \equiv \langle q' | e^{-i\mathcal{H}T} | q \rangle, \quad (2.2)$$

em que  $e^{-i\mathcal{H}T}$  é o operador evolução temporal, com  $\hbar = 1$ . Também conhecida como propagador, a equação (2.2) pode ser representada como uma soma sobre caminhos, como passamos a descrever.

Observe que o intervalo de tempo  $T$  decorrido na evolução temporal em (2.2) pode ser dividido em intervalos menores. Por exemplo, no caso de duas divisões, temos

$$K(q', T; q, 0) = \langle q' | e^{-i\mathcal{H}(T-t_1)} e^{-i\mathcal{H}t_1} | q \rangle. \quad (2.3)$$

Agora introduzimos uma base ortonormal completa de auto-estados do operador posição  $\hat{q}$ ,

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle, \quad \langle q|q'\rangle = \delta(q - q'), \quad \int dq |q\rangle \langle q| = 1 \quad (2.4)$$

e de auto-estados do operador  $\hat{p}$ ,

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle, \quad \langle p|p'\rangle = \delta(p - p'), \quad \int \frac{dp}{2\pi} |p\rangle \langle p| = 1. \quad (2.5)$$

Usando a relação de completeza, a amplitude pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} K(q', T; q, 0) &= \langle q' | e^{-i\mathcal{H}(T-t_1)} \int dq_1 |q_1\rangle \langle q_1| e^{-i\mathcal{H}t_1} |q\rangle \\ &= \int dq_1 K(q', T; q_1, t_1) K(q_1, t_1; q, 0). \end{aligned} \quad (2.6)$$

Nesse caso a amplitude é dada por uma combinação de amplitudes intermediárias. Como dividimos a evolução temporal em duas partes apenas, obtemos o produto de duas amplitudes intermediárias.

O processo de repartição do intervalo de tempo total pode ser repetido, de forma que é possível dividir o intervalo  $T$  em um número grande  $N'$  de intervalos de tempo  $\epsilon = T/N'$ .



Assim,

$$K(q', T; q, 0) = \langle q' | (e^{-i\mathcal{H}\epsilon})^{N'} | q \rangle = \langle q' | \underbrace{e^{-i\mathcal{H}\epsilon} e^{-i\mathcal{H}\epsilon} \dots e^{-i\mathcal{H}\epsilon}}_{N' \text{ termos}} | q \rangle, \quad (2.7)$$

com  $\epsilon \rightarrow 0$  e  $N' \rightarrow \infty$ , mantendo  $T = \epsilon N'$  finito. Quando o intervalo de tempo total foi dividido em duas partes, equação (2.3), introduzimos apenas uma relação de completeza para obter a expressão (2.6). Assim, quando dividimos  $T$  em  $N'$  intervalos menores de tempo, introduzimos  $(N' - 1)$  relações de completeza, tal que

$$\begin{aligned} K(q', T; q, 0) &= \langle q | e^{-i\mathcal{H}\epsilon} \int dq_{N'-1} |q_{N'-1}\rangle \langle q_{N'-1} | e^{-i\mathcal{H}\epsilon} \int dq_{N'-2} |q_{N'-2}\rangle \langle q_{N'-2} | \dots \\ &\times \dots \int dq_2 |q_2\rangle \langle q_2 | e^{-i\mathcal{H}\epsilon} \int dq_1 |q_1\rangle \langle q_1 | e^{-i\mathcal{H}\epsilon} |q\rangle \\ &= \int dq_1 \dots dq_{N'-1} \langle q' | e^{-i\mathcal{H}\epsilon} |q_{N'-1}\rangle \langle q_{N'-1} | e^{-i\mathcal{H}\epsilon} |q_{N'-2}\rangle \dots \langle q_1 | e^{-i\mathcal{H}\epsilon} |q\rangle \\ &= \int dq_1 \dots dq_{N'-1} K_{q_{N'}, q_{N'-1}} K_{q_{N'-1}, q_{N'-2}} \dots K_{q_2, q_1} K_{q_1, q_0}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

com  $q = q_0$ ,  $q' = q_{N'}$  e  $K_{q_{j+1}, q_j} \equiv \langle q_{j+1} | e^{-i\mathcal{H}\epsilon} | q_j \rangle$ . Para um intervalo de tempo  $\epsilon$  suficientemente pequeno, podemos expandir o exponencial,

$$\begin{aligned} K_{q_{j+1}, q_j} &= \langle q_{j+1} | e^{-i\mathcal{H}\epsilon} | q_j \rangle \\ &= \langle q_{j+1} | \left( 1 - i\mathcal{H}\epsilon + \frac{1}{2}\mathcal{H}^2\epsilon^2 + \dots \right) | q_j \rangle \\ &= \langle q_{j+1} | q_j \rangle - i\epsilon \langle q_{j+1} | \mathcal{H} | q_j \rangle + \mathcal{O}(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Como os auto-estados formam um conjunto ortonormal, o primeiro termo da equação acima conduz à função delta, que na representação integral assume a forma

$$\begin{aligned} \langle q_{j+1} | q_j \rangle &= \delta(q_{j+1} - q_j) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dp_j e^{ip_j(q_{j+1} - q_j)}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

No segundo termo da equação (2.9), introduzimos uma vez a relação de completeza no espaço dos momentos,

$$\begin{aligned}
 \langle q_{j+1} | \mathcal{H} | q_j \rangle &= \langle q_{j+1} | \int \frac{dp_j}{2\pi} | p_j \rangle \langle p_j | \left( \frac{\hat{p}}{2m} + V(\hat{q}) \right) | q_j \rangle \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int dp_j \left( \frac{p_j^2}{2m} + V(q_j) \right) \langle q_{j+1} | p_j \rangle \langle p_j | q_j \rangle \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int dp_j \left( \frac{p_j^2}{2m} + V(q_j) \right) e^{iq_{j+1}p_j} e^{-iq_j p_j}. \tag{2.11}
 \end{aligned}$$

A partir dos resultados (2.10) e (2.11), obtemos

$$\begin{aligned}
 K_{q_{j+1}, q_j} &= \frac{1}{2\pi} \int dp_j e^{ip_j(q_{j+1}-q_j)} - \frac{i\epsilon}{2pi} \int dp_j \left( \frac{p_j^2}{2m} + V(q_j) \right) e^{ip_j(q_{j+1}-q_j)} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int dp_j e^{ip_j(q_{j+1}-q_j)} \left[ 1 - i\epsilon \left( \frac{p_j^2}{2m} + V(q_j) \right) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \right] \\
 &\approx \frac{1}{2\pi} \int dp_j e^{ip_j(q_{j+1}-q_j)} e^{-i\epsilon \mathcal{H}(p_j, q_j)}. \tag{2.12}
 \end{aligned}$$

Usando o fato que  $\dot{q}_j = (q_{j+1} - q_j)/\epsilon$  e levando em conta que a expressão da amplitude de transição, equação (2.8), contem  $N'$  termos do tipo (2.12), obtemos

$$\begin{aligned}
 K(q', T; q, 0) &= \int dq_1 \cdots dq_{N'-1} \prod_{j=0}^{N'-1} \int \frac{dp_j}{2\pi} \exp \left[ i\epsilon p_j \dot{q}_j - i\epsilon \mathcal{H}(p_j, q_j) \right] \\
 &= \int \left( \prod_{j=1}^{N'-1} dq_j \right) \int \left( \prod_{j=0}^{N'-1} \frac{dp_j}{2\pi} \right) \exp \left[ i\epsilon \sum_{j=0}^{N'-1} \left( p_j \dot{q}_j - \mathcal{H}(p_j, q_j) \right) \right]. \tag{2.13}
 \end{aligned}$$

É importante notar que existe uma integral de momento para cada intervalo (em um total de  $N'$  intervalos) enquanto existe uma integral de posição para cada posição intermediária. Dado o hamiltoniano da partícula, equação (2.1), podemos então calcular as integrais em  $p$ ,

pois são todas gaussianas,

$$\begin{aligned}
K(q', T; q, 0) &= \int \left( \prod_{j=1}^{N'-1} dq_j \right) \exp \left[ -\imath \epsilon \sum_{j=0}^{N'-1} V(q_j) \right] \int \left( \prod_{j=0}^{N'-1} \frac{dp_j}{2\pi} \right) \exp \left[ \imath \epsilon \sum_{j=0}^{N'-1} \left( p_j \dot{q}_j - \frac{p_j^2}{2m} \right) \right] \\
&= \int \left( \prod_{j=1}^{N'-1} dq_j \right) \exp \left[ -\imath \epsilon \sum_{j=0}^{N'-1} V(q_j) \right] \prod_{j=0}^{N'-1} \left[ \sqrt{\frac{m}{2\pi\imath\epsilon}} \exp \left( \frac{1}{2} \imath \epsilon m \dot{q}_j^2 \right) \right] \\
&= \left( \frac{m}{2\pi\imath\epsilon} \right)^{\frac{N'}{2}} \int \left( \prod_{j=1}^{N'-1} dq_j \right) \exp \left[ \imath \epsilon \sum_{j=0}^{N'-1} \left( \frac{m}{2} \dot{q}_j^2 - V(q_j) \right) \right]. \tag{2.14}
\end{aligned}$$

O argumento da exponencial é uma aproximação discreta da ação do caminho que passa pelos pontos  $q_0 = q, q_1, \dots, q_{N'-1}, q_{N'} = q'$ , definida como

$$S[q] = \int_{t_i}^{t_f} dt \mathcal{L}, \tag{2.15}$$

sendo  $\mathcal{L}$  a lagrangiana do sistema. No limite  $N' \rightarrow \infty$  a equação (2.14) é equivalente a uma integral sobre todas as funções  $q(t)$ ,

$$K(q', T; q, 0) = \int \mathcal{D}q(t) e^{\imath S[q]}, \tag{2.16}$$

sendo a medida de integração,  $\mathcal{D}q(t)$ , definida formalmente como

$$\mathcal{D}q(t) \equiv \lim_{N' \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi\imath\epsilon} \right)^{\frac{N'}{2}} \prod_{j=1}^{N'-1} dq_j. \tag{2.17}$$

Usualmente conhecida como integral de trajetória no espaço das configurações, a integral (2.16) representa uma soma sobre todas as funções  $q(t)$ , sujeitas a  $q(0) = q$  e  $q(T) = q'$ . Podemos considerar a equação (2.16) como a definição da teoria quântica. A equivalência com a equação de Schrödinger é discutida no apêndice A.

É interessante observar que, devido ao fator oscilante na amplitude de transição  $e^{\imath S[q]}$ , a contribuição máxima para a integração funcional, vem da trajetória que extremiza (mais

precisamente, minimiza) a ação, ou seja, aquela que satisfaz a condição

$$\frac{\delta S[q]}{\delta q(t)} = 0. \quad (2.18)$$

Como  $S[q]$  é um funcional da coordenada  $q(t)$ , a extremização deve ser feita com a derivada funcional, que é uma generalização da derivada ordinária,

$$\frac{\partial q_i}{\partial q_j} = \delta_{i,j} \quad \longrightarrow \quad \frac{\delta q(t)}{\delta q(t')} = \delta(t - t').$$

A extremização funcional acima conduz às equações de movimento clássica ou de Euler-Lagrange,

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} = 0.$$

Esse é simplesmente o princípio da mínima ação, ou seja, a trajetória clássica é aquela que minimiza a ação. Essa análise mostra que na soma sobre todas as trajetórias possíveis em (2.16), envolvidas na construção da teoria quântica, a contribuição máxima vem da trajetória clássica.

Na situação quântica, devido ao princípio de incerteza de Heisenberg,  $\Delta q \Delta p \geq \hbar/2$ , as trajetórias no espaço de fase deixam de ser bem definidas, em contraste com a teoria clássica, cujas trajetórias são bem definidas. Assim, de uma forma natural, quanticamente podemos pensar em “soma” sobre trajetórias.

## 2.2 Aplicações

Nesta seção, calculamos a amplitude de transição para dois sistemas simples: partícula livre e oscilador harmônico. Na formulação de integrais de trajetória, a lagrangiana constitui o ponto de partida, uma vez que dada uma lagrangiana podemos calcular a amplitude de transição a partir da equação (2.16). Em geral, nos problemas estatísticos o hamiltoniano

é o ponto de partida, mas podemos obter a lagrangiana correspondente por meio de uma transformação de Legendre,

$$\mathcal{L} = -\mathcal{H} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} p, \quad (2.19)$$

com  $\partial \mathcal{H} / \partial p = \dot{q}$ .

### 2.2.1 Partícula Livre

A amplitude de transição de uma partícula livre,

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} \quad \rightarrow \quad \mathcal{L} = \frac{1}{2} m \dot{q}^2,$$

é dada pela equação (2.14) no limite  $N' \rightarrow \infty$  e  $V(q) = 0$ ,

$$\begin{aligned} K(q_{N'}, T; q_0, 0) &= \lim_{N' \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{\frac{N'}{2}} \int \left( \prod_{j=1}^{N'-1} dq_j \right) \exp \left[ i \epsilon \frac{m}{2} \sum_{j=0}^{N'-1} \left( \frac{q_{j+1} - q_j}{\epsilon} \right)^2 \right] \\ &= \lim_{N' \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{\frac{N'}{2}} \int \left( \prod_{j=1}^{N'-1} dq_j \right) \exp \left\{ i \frac{m}{2\epsilon} \left[ (q_{N'} - q_{N'-1})^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (q_{N'-1} - q_{N'-2})^2 + \cdots + (q_2 - q_1)^2 + (q_1 - q_0)^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

com  $q_0 = q$  e  $q_{N'} = q'$ . A integrais da equação (2.20) são todas gaussianas e podem ser calculadas exatamente,

$$\begin{aligned} K(q', T; q, 0) &= \lim_{N' \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi i N' \epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[ i \frac{m}{2N' \epsilon} (q' - q)^2 \right] \\ &= \left( \frac{m}{2\pi i T} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[ i \frac{m}{2T} (q' - q)^2 \right], \end{aligned} \quad (2.21)$$

sendo que  $N' \epsilon = T$  é o intervalo de tempo total.

O argumento da exponencial,

$$T \frac{m}{2} \left( \frac{q' - q}{T} \right)^2, \quad (2.22)$$

nada mais é que a ação  $S[q_c]$  de uma partícula que se move ao longo de um caminho clássico entre os pontos inicial e final (nesse caso, uma linha reta). Assim, a amplitude de transição é dada por

$$K(T, q'; 0, q) = \left( \frac{m}{2\pi i T} \right)^{\frac{1}{2}} e^{iS[q_c]}. \quad (2.23)$$

## 2.2.2 Oscilador Harmônico

Como uma segunda aplicação da formulação de integrais de trajetória, vamos analisar o problema do oscilador harmônico em uma dimensão na presença de uma fonte externa. Esse sistema é descrito por

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}mw^2x^2 - Jx \quad \rightarrow \quad \mathcal{L} = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}mw^2x^2 + Jx. \quad (2.24)$$

A fonte externa pode apresentar uma dependência temporal,  $J(t)$ . No entanto, vamos nos ater apenas ao caso em que a fonte externa é uma constante no tempo. Como já sabemos, a amplitude de transição é dada pela expressão

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int \mathcal{D}x(t) e^{iS[x]}, \quad (2.25)$$

com

$$\begin{aligned} S[x] &= \int dt \mathcal{L} \\ &= \int dt \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{dx(t)}{dt} \right)^2 - \frac{1}{2}mw^2x^2(t) + Jx(t) \right]. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Como discutimos anteriormente, a trajetória clássica fornece a maior contribuição para a integração funcional, obtida a partir da equação de Euler-Lagrange,

$$m\ddot{x}_{cl} + mw^2x_{cl} - J = 0. \quad (2.27)$$

Assim, é conveniente considerar uma flutuação em torno da trajetória clássica,

$$x(t) = x_{cl}(t) + \eta(t), \quad (2.28)$$

sendo  $\eta(t)$  a perturbação (quântica) em torno de  $x_{cl}(t)$ . Com isso, a expansão funcional da ação em série de Taylor resulta em

$$\begin{aligned} S[x] &= S[x_{cl}] + \int dt \eta(t) \left. \frac{\delta S[x]}{\delta x(t)} \right|_{x=x_{cl}} \\ &+ \frac{1}{2!} \int dt_1 dt_2 \eta(t_1) \eta(t_2) \left. \frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(t_1) \delta x(t_2)} \right|_{x=x_{cl}}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Note que a expansão acima é desenvolvida até segunda ordem, pois a ação é no máximo quadrática e, conseqüentemente, termos superiores são nulos. Levando em conta que a derivada funcional primeira da ação deve ser nula, equação (2.18), e que a derivada funcional segunda assume a forma

$$\frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(t_1) \delta x(t_2)} = - \left[ m \frac{d^2}{dt_1^2} \delta(t_1 - t_2) + mw^2 \delta(t_1 - t_2) \right], \quad (2.30)$$

podemos reescrever a ação como

$$S[x] = S[x_{cl}] + \frac{1}{2!} \int dt_1 (m \dot{\eta}^2 - mw^2 \eta^2). \quad (2.31)$$

Por simplicidade, omitimos a dependência temporal na variável,  $\eta \equiv \eta(t_1)$ .

Como já mencionado, a variável  $\eta$  representa flutuações quânticas em torno da trajetória clássica. Admitindo que os extremos das trajetórias sejam pontos fixos, as flutuações satisfazem as condições de contorno  $\eta(t_i) = \eta(t_f) = 0$ . Conseqüentemente,

$$\begin{aligned} K(x_f, t_f; x_i, t_i) &= A \int \mathcal{D}\eta \exp \left\{ i \left[ S[x_{cl}] + \frac{1}{2!} \int_{t_i}^{t_f} dt (m\dot{\eta}^2 - mw^2 \eta^2) \right] \right\} \\ &= A e^{iS[x_{cl}]} \int \mathcal{D}\eta \exp \left[ \frac{i}{2} \int_{t_i}^{t_f} dt (m\dot{\eta}^2 - mw^2 \eta^2) \right], \end{aligned} \quad (2.32)$$

sendo  $A$  uma constante. Essa integral pode ser calculada exatamente, pois os expoentes acima são quadráticos na variável de integração. O cálculo a seguir procede pelo método da transformada de Fourier.

Por conveniência, redefinimos a variável de integração,  $t \rightarrow t - t_i$ , de modo que

$$K(x_f, T; x_i, 0) = A e^{iS[x_{cl}]} \int \mathcal{D}\eta \exp \left[ \frac{i}{2} \int_0^T dt (m\dot{\eta}^2 - mw^2\eta^2) \right], \quad (2.33)$$

com  $T = t_f - t_i$  e as condições de contorno  $\eta(0) = 0$  e  $\eta(T) = 0$ . A flutuação em qualquer ponto da trajetória pode ser representada pela série de Fourier

$$\eta(t) = \sum_{n=1}^{N'-1} a_n \sin \left( \frac{n\pi t}{T} \right), \quad n = 1, 2, \dots, (N' - 1), \quad (2.34)$$

observando que ela também satisfaz as condições de contorno. Como a trajetória foi dividida em  $N'$  intervalos de tempo, temos  $(N' - 1)$  tempos intermediários e, conseqüentemente,  $(N' - 1)$  coeficientes  $a_n$  na expansão de Fourier, equação (2.34). Dessa forma, podemos calcular a integral no tempo na equação (2.33),

$$\begin{aligned} \int_0^T dt \dot{\eta}^2 &= \int_0^T dt \sum_n a_n \left( \frac{n\pi}{T} \right) \cos \left( \frac{n\pi t}{T} \right) \sum_m a_m \left( \frac{m\pi}{T} \right) \cos \left( \frac{m\pi t}{T} \right) \\ &= \frac{T}{2} \sum_n \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 a_n^2, \end{aligned} \quad (2.35)$$

e

$$\begin{aligned} \int_0^T dt \eta^2 &= \int_0^T dt \sum_n a_n \sin \left( \frac{n\pi t}{T} \right) \sum_m a_m \sin \left( \frac{m\pi t}{T} \right) \\ &= \frac{T}{2} \sum_n a_n^2, \end{aligned} \quad (2.36)$$



tal que

$$\begin{aligned}
K(x_f, T; x_i, 0) &= A e^{iS[x_{cl}]} \int \mathcal{D}\eta \exp \left[ \frac{i}{2} \sum_{n=1}^{N'-1} \left( \frac{T}{2} \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 m a_n^2 - \frac{T}{2} m w^2 a_n \right) \right] \\
&= \lim_{\substack{N' \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} A' e^{iS[x_{cl}]} \int da_1 da_2 \cdots da_{N'-1} \exp \left\{ \frac{imT}{4} \sum_{n=1}^{N'-1} \left[ \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 - w^2 \right] a_n^2 \right\} \\
&= \lim_{\substack{N' \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} A' e^{iS[x_{cl}]} \prod_{n=1}^{N'-1} \int da_n \exp \left\{ \frac{imT}{4} \left[ \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 - w^2 \right] a_n^2 \right\}, \quad (2.37)
\end{aligned}$$

em que redefinimos  $A$  para absorver alguns fatores constantes irrelevantes. As integrais acima são todas gaussianas. Então, obtemos

$$\begin{aligned}
K(x_f, T; x_i, 0) &= \lim_{\substack{N' \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} A' e^{iS[x_{cl}]} \prod_{n=1}^{N'-1} \left( \frac{4\pi i}{mT} \right)^{\frac{1}{2}} \left[ \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 - w^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \\
&= \lim_{\substack{N' \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} A' e^{iS[x_{cl}]} \prod_{n=1}^{N'-1} \left( \frac{4\pi i}{mT} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{n\pi}{T} \right)^{-1} \prod_{n=1}^{N'-1} \left[ 1 - \left( \frac{wT}{n\pi} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (2.38)
\end{aligned}$$

Visto que o primeiro produto não depende de  $w$ , agregamos esse fator à constante  $A'$ ,

$$K(x_f, T; x_i, 0) = \lim_{\substack{N' \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} A'' e^{iS[x_{cl}]} \prod_{n=1}^{N'-1} \left[ 1 - \left( \frac{wT}{n\pi} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (2.39)$$

Usando a identidade

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N-1} \left[ 1 - \left( \frac{wT}{n\pi} \right)^2 \right] = \frac{\sin wT}{wT}, \quad (2.40)$$

obtemos

$$K(x_f, T; x_i, 0) = \lim_{\substack{N' \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} A'' e^{iS[x_{cl}]} \left( \frac{\sin wT}{wT} \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (2.41)$$

O valor da constante  $A''$  é determinado a partir do resultado obtido para a partícula livre.

Para  $w = 0$  devemos recuperar a equação

$$K_{PL}(x_f, t_f; x_i, t_i) = \left( \frac{m}{2\pi i T} \right)^{\frac{1}{2}} e^{iS[x_{cl}]}, \quad (2.42)$$

portanto,

$$\lim_{\substack{N' \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} A'' = \left( \frac{m}{2\pi i T} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.43)$$

Finalmente,

$$K(x_f, T; x_i, 0) = \left( \frac{m}{2\pi i T} \right)^{\frac{1}{2}} e^{iS[x_{cl}]} \left( \frac{\sin wT}{wT} \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (2.44)$$

Para obter a expressão explícita da amplitude de transição, devemos calcular a ação clássica, a qual passamos a descrever.

## Ação Clássica

Inicialmente, consideramos o caso mais simples com  $J = 0$  e em seguida o caso  $J \neq 0$ .

### Caso $J = 0$

Para  $J = 0$ , a ação clássica é dada por

$$\begin{aligned} S[x_{cl}] &= \int_0^T dt \mathcal{L}_{cl} \\ &= \int dt \left( \frac{1}{2} m \dot{x}_{cl}^2 - \frac{1}{2} m w^2 x_{cl}^2 \right). \end{aligned} \quad (2.45)$$

Da condição de mínima ação, segue a equação de movimento,

$$m \ddot{x}_{cl} + m w^2 x_{cl} = 0, \quad (2.46)$$

cuja solução geral pode ser escrita como

$$x_{cl}(t) = A \sin wt + B \cos wt. \quad (2.47)$$

A partir das condições de contorno,

$$x_{cl}(0) = x_i \quad \text{e} \quad x_{cl}(T) = x_f, \quad (2.48)$$

determinamos as constantes  $A$  e  $B$ , de modo que

$$x_{cl}(t) = \frac{1}{\sin wT} [(x_f - x_i \cos wT) \sin wt + x_i \sin wT \cos wt]. \quad (2.49)$$

Assim, calculamos  $x_{cl}^2$  e  $\dot{x}_{cl}^2$  e, conseqüentemente, a expressão para ação clássica,

$$\begin{aligned} S[x_{cl}] &= \frac{m}{2} \int_0^T dt \dot{x}_{cl}^2 - \frac{1}{2} m w^2 \int_0^T dt x_{cl}^2 \\ &= \frac{m}{2} \int_0^T dt \dot{x}_{cl}^2 = \frac{w^2}{\sin^2 wT} \int_0^T dt (a \cos^2 wt + b \sin^2 wt - 2c \sin wt \cos wt) \\ &\quad - \frac{1}{2} m w^2 \int_0^T dt x_{cl}^2 = \frac{1}{\sin^2 wT} \int_0^T dt (b \cos^2 wt + a \sin^2 wt + 2c \sin wt \cos wt) \\ &= \frac{1}{2} \frac{m w^2}{\sin^2 wT} \int_0^T dt [(a - b) \cos^2 wt + (b - a) \sin^2 wt - 4c \sin wt \cos wt], \quad (2.50) \end{aligned}$$

em que definimos

$$a \equiv (x_f - x_i \cos wT)^2, \quad (2.51)$$

$$b \equiv x_i^2 \sin^2 wT \quad (2.52)$$

e

$$c \equiv x_i \sin wT (x_f - x_i \cos wT). \quad (2.53)$$

Finalmente, a ação clássica do oscilador harmônico na ausência de fonte externa,  $J = 0$ , é dada por

$$S[x_{cl}] = \frac{1}{2} \frac{m w}{\sin wT} [(x_f^2 + x_i^2) \cos wT - 2x_i x_f]. \quad (2.54)$$

### Caso $J \neq 0$

Quando  $J \neq 0$ , a condição de mínima ação nos dá a equação de movimento

$$m\ddot{x}_{cl} + mw^2x_{cl} - J = 0, \quad (2.55)$$

cuja solução geral é

$$x_{cl}(t) = \frac{J}{mw^2} + A \sin wt + B \cos wt, \quad (2.56)$$

sob as mesmas condições de contorno do caso  $J = 0$ , equação (2.48). Nesse caso, temos

$$x_{cl} = \frac{J}{mw^2} + \frac{1}{\sin wT} [(\bar{x}_f - \bar{x}_i \cos wT) \sin wt + \bar{x}_i \sin wT \cos wt], \quad (2.57)$$

com

$$\bar{x}_i \equiv x_i - \frac{J}{mw^2} \quad \text{e} \quad \bar{x}_f \equiv x_f - \frac{J}{mw^2}. \quad (2.58)$$

Como no caso  $J = 0$ , a partir da equação (2.57), calculamos  $x_{cl}^2$  e  $\dot{x}_{cl}^2$ , de modo que a ação clássica do oscilador harmônico na presença de fonte externa,  $J \neq 0$ , assume a forma

$$\begin{aligned} S[x_{cl}] &= \frac{1}{2}m \int_0^T dt \dot{x}_{cl}^2 - \frac{1}{2}mw^2 \int_0^T dt x_{cl}^2 + J \int_0^T dt x_{cl} \\ &= \frac{1}{2} \frac{m}{\sin wT} [(\bar{x}_f^2 + \bar{x}_i^2) \cos wT - 2\bar{x}_i\bar{x}_f] + \frac{1}{2} \frac{TJ^2}{mw^2}. \end{aligned} \quad (2.59)$$

## 2.3 Conexão com a Mecânica Estatística

Nesta seção, mostramos como a função de partição pode ser escrita em termos da amplitude de transição no formalismo de integrais de trajetórias. O ponto principal é a relação

entre o operador de evolução temporal e a matriz densidade (peso de Boltzmann),

$$e^{-\imath T \mathcal{H}} \longleftrightarrow e^{-\beta \mathcal{H}},$$

que sugere a identificação  $\beta \equiv \imath T$ , sendo  $\beta$  proporcional ao inverso da temperatura.

De uma forma geral, a função de partição de um sistema quântico é dada pelo traço da matriz densidade,

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}} \\ &= \sum_j \langle j | e^{-\beta \mathcal{H}} | j \rangle \\ &= \sum_j e^{-\beta E_j} \end{aligned} \tag{2.60}$$

em que  $j$  designa genericamente uma base completa ortonormal de estados que diagonaliza o hamiltoniano e  $\beta = 1/(k_B T)$ . Analisando a expressão da amplitude de transição, com a identificação  $T = -\imath \beta$ , e usando a relação de completeza, obtemos

$$\begin{aligned} K(q', -\imath \beta; q, 0) &= \langle q' | e^{-\imath H(-\imath \beta)} | q \rangle \\ &= \langle q' | e^{-\imath H(-\imath \beta)} \sum_j | j \rangle \langle j | q \rangle \\ &= \sum_j e^{-\beta E_j} \langle j | q \rangle \langle q' | j \rangle. \end{aligned} \tag{2.61}$$

Observe que a expressão acima pode ser deixada exatamente na forma de (2.60), admitindo  $q = q'$  e fazendo uma integração sobre  $q$ ,

$$\begin{aligned} \int dq K(q, -\imath \beta; q, 0) &= \sum_j e^{-\beta E_j} \langle j | \underbrace{\int dq | q \rangle \langle q |}_{1} | j \rangle \\ &= \sum_j e^{-\beta E_j} = Z. \end{aligned} \tag{2.62}$$

Portanto, a função de partição está relacionada com a amplitude de transição sob a identificação  $T = -\imath\beta$ .

Para exemplificar, calculamos a função de partição para um oscilador harmônico na ausência de fonte externa. Das equações (2.44) e (2.54), a amplitude se reduz a

$$\begin{aligned} K(q', T; q, 0) &= \left(\frac{m}{2\pi\imath T}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\sin wT}{wT}\right)^{-\frac{1}{2}} e^{\imath S[x_{cl}]} \\ &= \left(\frac{mw}{2\pi\imath \sin wT}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[\imath \frac{mw}{2 \sin wT} \left((q'^2 + q^2) \cos wT - 2q'q\right)\right]. \end{aligned} \quad (2.63)$$

Considerando  $q' = q$  e  $T = -\imath\beta$ , temos

$$K(q, -\imath\beta; q, 0) = \left(\frac{mw}{2\pi \sinh wT}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{mwq^2}{\sinh \beta w} (\cosh \beta w - 1)\right]. \quad (2.64)$$

Consequentemente, obtemos o resultado conhecido para a função de partição do oscilador harmônico quântico

$$Z = \int dq K(-\imath\beta, q; 0, q) = \left(2 \sinh \frac{\beta w}{2}\right)^{-1}. \quad (2.65)$$

A seguir vamos aplicar as idéias desenvolvidas aos modelos estatísticos de interesse.

## 2.4 Modelo Esférico Quântico Elementar

No primeiro capítulo, o modelo esférico quântico foi analisado detalhadamente, em termos da temperatura e do parâmetro  $g$  associado às flutuações quânticas, usando o método de quantização canônica. Nesta seção, apresentamos o cálculo da função de partição usando a

formulação de integrais de trajetória. O hamiltoniano efetivo do sistema é dado por <sup>1</sup>

$$\mathcal{H} = \frac{g}{2} \sum_{j=1}^N p_j^2 - \frac{J}{2N} \left( \sum_{j=1}^N \sigma_j \right)^2 - H \sum_{j=1}^N \sigma_j + \mu \sum_{j=1}^N \sigma_j^2. \quad (2.66)$$

Como estamos interessados na solução do problema usando a formulação de integrais de trajetória, precisamos conhecer a langrangiana do sistema, que pode ser obtida por meio de uma transformação de Legendre,

$$\mathcal{L} = -\mathcal{H} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} p_i. \quad (2.67)$$

Assim, a lagrangiana do modelo esférico quântico elementar é dada por

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2g} \sum_{j=1}^N \dot{\sigma}_j^2 + \frac{J}{2N} \left( \sum_{j=1}^N \sigma_j \right)^2 + H \sum_{j=1}^N \sigma_j - \mu \sum_{j=1}^N \sigma_j^2. \quad (2.68)$$

A função de partição está relacionada com a amplitude de transição pela equação (2.62). Para calcular a amplitude de transição, equação (2.25), o primeiro passo é determinar a ação  $S[\sigma]$ , com  $\sigma_j \equiv x_j$ . Exatamente como no caso do oscilador harmônico, podemos expandir a ação em torno da trajetória clássica (que fornece a maior contribuição),

$$S[x] = S[x_{cl}] + \frac{1}{2!} \sum_{k,l} \int dt_1 dt_2 \eta_k(t_1) \eta_l(t_2) \frac{\delta^2 S[x]}{\delta x_k(t_1) \delta x_l(t_2)} \Big|_{x=x_{cl}}, \quad (2.69)$$

usando o fato que

$$S[x] = \int_{t_i}^{t_f} dt \mathcal{L}. \quad (2.70)$$

---

<sup>1</sup>Por simplicidade de notação, ao longo deste trabalho não usaremos notação vetorial quando empregamos a formulação de integrais de trajetória.

O cálculo da derivada funcional segunda da ação fornece

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2 S[x]}{\delta x_l(t_2) \delta x_k(t_1)} &= \frac{\delta}{\delta x_l(t_2)} \left[ -\frac{1}{g} \frac{d^2 x_k(t_1)}{dt_1^2} + \frac{J}{N} \sum_{j=1}^N x_j(t_1) + H - 2\mu x_k(t_1) \right] \\ &= -\frac{1}{g} \frac{d}{dt_1} \frac{d}{dt_1} [\delta(t_1 - t_2) \delta_{k,l}] + \frac{J}{N} \delta(t_1 - t_2) - 2\mu \delta(t_1 - t_2) \delta_{k,l}. \end{aligned} \quad (2.71)$$

Consequentemente, obtemos a expressão

$$S[x] = S[x_{cl}] + \frac{1}{2!} \int dt \left[ \frac{1}{g} \sum_{k=1}^N \dot{\eta}_k^2(t) - 2\mu \sum_{k=1}^N \eta_k^2(t) + \frac{J}{N} \left( \sum_{k=1}^N \eta_k(t) \right)^2 \right]. \quad (2.72)$$

Dada a equação (2.72), a amplitude de transição do modelo esférico quântico elementar é escrita na forma

$$\begin{aligned} K(x_f, T; x_i, 0) &= A e^{iS[x_{cl}]} \\ &\times \int \mathcal{D}\eta \exp \left\{ \frac{i}{2} \int_0^T dt \left[ \frac{1}{g} \sum_{k=1}^N \dot{\eta}_k^2(t) - 2\mu \sum_{k=1}^N \eta_k^2(t) + \frac{J}{N} \left( \sum_{k=1}^N \eta_k(t) \right)^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.73)$$

Podemos diagonalizar a expressão a partir de uma generalização funcional da integral gaussiana,

$$\exp \left[ \int dt \left( \sum_k \eta_k(t) \right)^2 \right] = \frac{1}{\pi^{N/2}} \int \mathcal{D}\gamma \exp \left[ -\int dt \gamma^2(t) + 2 \int dt \sum_k \eta_k(t) \gamma(t) \right]. \quad (2.74)$$

Com isso, a integral da expressão (2.73) assume a forma

$$\begin{aligned} I &= \int \mathcal{D}\eta \exp \left\{ \frac{i}{2} \int_0^T dt \left[ \frac{1}{g} \sum_{k=1}^N \dot{\eta}_k^2(t) - 2\mu \sum_{k=1}^N \eta_k^2(t) + \frac{J}{N} \left( \sum_{k=1}^N \eta_k(t) \right)^2 \right] \right\} \\ &= \int \mathcal{D}\gamma e^{-\int dt \gamma^2(t)} \int \mathcal{D}\eta \exp \left\{ \frac{i}{2} \sum_{k=1}^N \int_0^T dt \left[ \frac{1}{g} \dot{\eta}_k^2(t) - 2\mu \eta_k^2(t) + 2 \left( \frac{2J}{iN} \right)^{\frac{1}{2}} \gamma(t) \eta_k(t) \right] \right\} \\ &= \int \mathcal{D}\gamma e^{-\int dt \gamma^2(t)} \prod_{k=1}^N \int \mathcal{D}\eta \exp \left\{ \frac{i}{2} \int_0^T dt \left[ \frac{1}{g} \dot{\eta}_k^2(t) - 2\mu \eta_k^2(t) + 2 \left( \frac{2J}{iN} \right)^{\frac{1}{2}} \gamma(t) \eta_k(t) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.75)$$



A partir desse resultado, a amplitude de transição é dada por

$$K(x_f, T; x_i, 0) = A e^{iS[x_{cl}]} \int \mathcal{D}\gamma e^{-\int dt \gamma^2(t)} \\ \times \prod_{k=1}^N \int \mathcal{D}\eta \exp \left\{ \frac{i}{2} \int dt \left[ \frac{1}{g} \dot{\eta}_k^2(t) - 2\mu\eta_k^2(t) + 2 \left( \frac{2J}{iN} \right)^{\frac{1}{2}} \gamma(t) \eta_k(t) \right] \right\}. \quad (2.76)$$

## Método da Transformada de Fourier

Para calcular a integral funcional na variável  $\eta$ ,

$$I_1 = \prod_{k=1}^N \int \mathcal{D}\eta \exp \left\{ \frac{i}{2} \int_0^T dt \left[ \frac{1}{g} \dot{\eta}_k^2(t) - 2\mu\eta_k^2(t) + 2 \left( \frac{2J}{iN} \right)^{\frac{1}{2}} \gamma(t) \eta_k(t) \right] \right\}, \quad (2.77)$$

consideramos que as flutuações quânticas em qualquer ponto da trajetória podem ser representadas por uma série de Fourier. Levando em conta que os extremos das trajetórias são pontos fixos, as flutuações devem satisfazer as condições de contorno  $\eta(0) = \eta(T) = 0$ , de tal forma que podemos introduzir a expansão

$$\eta_k(t) = \sum_{n=1}^{N'-1} a_n^k \sin \left( \frac{n\pi}{T} t \right), \quad (2.78)$$

que também satisfaz as condições de contorno. A variável  $\gamma(t)$  também pode ser escrita como uma expansão do mesmo tipo,

$$\gamma(t) = \sum_{n=1}^{N'-1} b_n \sin \left( \frac{n\pi}{T} t \right), \quad (2.79)$$

satisfazendo as mesmas condições de contorno. Além disso, ela satisfaz a identidade (2.74), como deveria ser.

O cálculo da integral sobre todas as configurações possíveis de  $\eta$  (integral funcional) é equivalente ao cálculo da integral sobre todos os valores possíveis dos coeficientes  $a_n$  da

expansão (2.78) (integrais ordinárias). Assim, a equação (2.77) conduz a

$$\begin{aligned}
 I_1 &= \prod_{k=1}^N \int \mathcal{D}\eta \exp \left\{ \frac{i}{2} \int_0^T dt \left[ \frac{1}{g} \dot{\eta}_k^2(t) - 2\mu\eta_k^2(t) + 2 \left( \frac{2J}{iN} \right)^{\frac{1}{2}} \gamma(t) \eta_k(t) \right] \right\} \\
 &= B \lim_{\substack{N' \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \prod_{k=1}^N \int da_1^k \dots da_{N'-1}^k \exp \left\{ \frac{i}{2} \sum_{n=1}^{N'-1} \left[ \frac{T}{2g} \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 (a_n^k)^2 - T\mu(a_n^k)^2 + \left( \frac{2J}{iN} \right)^{\frac{1}{2}} T b_n a_n^k \right] \right\} \\
 &= B \lim_{N' \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N'-1} \left( \frac{4\pi i}{T \left[ \frac{1}{g} \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 - 2\mu \right]} \right)^{\frac{N}{2}} \exp \left[ - \frac{\frac{JT}{2} \sum_n b_n^2}{\frac{1}{g} \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 - 2\mu} \right]. \tag{2.80}
 \end{aligned}$$

Da mesma forma, o cálculo da integral sobre todas as funções possíveis  $\gamma$  (integral funcional) é equivalente ao cálculo das integrais sobre os coeficientes  $b_n$  (integrais ordinárias). Então,

$$\begin{aligned}
 I_2 &\equiv \int \mathcal{D}\gamma e^{-\int dt \gamma^2(t)} I_1 \\
 &= B' \lim_{N' \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N'-1} \left( \frac{4\pi i}{T \left[ \frac{1}{g} \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 - 2\mu \right]} \right)^{\frac{N}{2}} \\
 &\quad \times \int db_1 \dots db_{N'-1} \exp \left\{ - \sum_{n=1}^{N'-1} \left[ \frac{T}{2} + \frac{JT}{\frac{2}{g} \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 - 4\mu} \right] b_n^2 \right\}. \tag{2.81}
 \end{aligned}$$

As constantes nas expressões (2.80) e (2.81) surgem do jacobiano nas transformadas de variáveis nas integrais funcionais. De uma forma geral,

$$\begin{aligned}
 K(x_f, T; x_i, 0) &= B'' e^{iS[x_{cl}]} \lim_{N' \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N'-1} \left[ \frac{1}{1 - 2g\mu \left( \frac{T}{n\pi} \right)^2} \right]^{\frac{N}{2}} \left[ \frac{1 - 2g\mu \left( \frac{T}{n\pi} \right)^2}{\frac{1}{g} \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 - 2\mu + J} \right]^{\frac{1}{2}} \\
 &= B'' e^{iS[x_{cl}]} \lim_{N' \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N'-1} \left[ \frac{1}{1 - (2g\mu) \left( \frac{T}{n\pi} \right)^2} \right]^{\frac{N-1}{2}} \left[ \frac{1}{\frac{1}{g} \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 - (2\mu - J)} \right]^{\frac{1}{2}}. \tag{2.82}
 \end{aligned}$$

A partir da identidade (2.40), a expressão da amplitude de transição é dada por

$$\begin{aligned}
 K(x_f, T; x_i, 0) &= B''' e^{iS[x_{cl}]} \lim_{N' \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N'-1} \left[ 1 - \left( \frac{wT}{n\pi} \right)^2 \right]^{-\frac{(N-1)}{2}} \left[ 1 - \left( \frac{w_0 T}{n\pi} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \\
 &= \left( \frac{1}{2\pi i g T} \right)^{\frac{N}{2}} e^{iS[x_{cl}]} \left( \frac{\sin wT}{wT} \right)^{-\frac{(N-1)}{2}} \left( \frac{\sin w_0 T}{w_0 T} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (2.83)
 \end{aligned}$$

com

$$\begin{cases} \omega_0^2 = (2g\mu) \left( 1 - \frac{J}{2\mu} \right) \\ \omega^2 = (2g\mu) \end{cases}. \quad (2.84)$$

No limite  $w \rightarrow 0$  e  $w_0 \rightarrow 0$  a equação deve se reduzir à amplitude de transição de um conjunto de  $N$  partículas livres, com  $m \equiv 1/g$ . Então, tomamos esses limites e obtemos o valor da constante  $B'''$ . Resta-nos agora calcular a ação clássica do problema.

## Ação Clássica

O cálculo da ação clássica poderia, em princípio, ser feito a partir da lagrangiana (2.68). No entanto, como o resultado da amplitude de transição, equação (2.83), pode ser reconhecido como a amplitude de um conjunto de  $N$  osciladores harmônicos, equação (2.44) com  $m \equiv 1/g$ , partimos da lagrangiana desse sistema de  $N$  osciladores harmônicos, sendo que  $(N-1)$  oscilam com frequência  $w$  e um oscilador com frequência  $w_0$ . A ação desse tipo de problema pode ser escrita como

$$\mathcal{L}_{OH} = \sum_{k=1}^{N-1} \left( \frac{1}{2} m \dot{x}_k^2 - \frac{1}{2} m w^2 x_k^2 \right) + \left( \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} m w_0^2 x^2 \right) + A, \quad (2.85)$$

em que  $A$  é uma constante associada ao termo linear. Essa constante pode ser determinada a partir da lagrangiana (2.68). Com uma redefinição da coordenada  $x$ ,  $x_i \equiv \tilde{x}_i + f$ , podemos

escrever a expressão (2.68) na forma

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2g} \sum_i \dot{\tilde{x}}_i^2 + \sum_{ij} (\tilde{x}_i + f) \left( \frac{J}{2N} - \mu \delta_{ij} \right) (\tilde{x}_j + f) + H \sum_i (\tilde{x}_i + f), \quad (2.86)$$

em que  $f$  é escolhida de modo a cancelar o termos lineares. Assim, obtemos uma lagrangiana com apenas termos quadráticos e constantes, ou seja,

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2g} \sum_i \dot{\tilde{x}}_i^2 + \sum_{i,j} \tilde{x}_i \left( \frac{J}{2N} - \mu \delta_{ij} \right) \tilde{x}_j + cte, \quad (2.87)$$

sendo que  $f$  é solução da expressão

$$2 \sum_{ij} \tilde{x}_i \left( \frac{J}{2N} - \mu \delta_{ij} \right) f + H \sum_i \tilde{x}_i = 0 \quad (2.88)$$

e a constante é dada por

$$cte = f^2 \sum_{ij} \left( \frac{J}{2N} - \mu \delta_{ij} \right) + HNf. \quad (2.89)$$

Da relação (2.88) obtemos o valor de  $f$  e, conseqüentemente, a forma explícita de (2.89),

$$cte = \frac{NH^2}{4\mu \left( 1 - \frac{J}{2\mu} \right)}. \quad (2.90)$$

Portanto, quando identificamos o modelo elementar com um sistema de  $N$  osciladores harmônicos, a constante  $A$  da lagrangiana (2.85) deve ser identificada com o termo constante que aparece na expressão (2.87). Assim, a ação clássica do modelo esférico é dada por

$$\begin{aligned} S_{ME}[x_{cl}] &\Leftrightarrow \int_0^T dt \mathcal{L}_{OH} \\ &= \bar{S}_{OH}[x_{cl}] + \frac{H^2 NT}{4\mu \left( 1 - \frac{J}{2\mu} \right)}, \end{aligned} \quad (2.91)$$

conduzindo à amplitude de transição

$$\begin{aligned}
 K(T, x_f; 0, x_i) &= \left( \frac{1}{2\pi\iota g T} \right)^{\frac{N}{2}} \exp \left[ \iota \frac{H^2 N T^2}{4 \left( \mu - \frac{J}{2} \right)} \right] e^{\iota \bar{S}_{OH}[x_{cl}]} \\
 &\times \left( \frac{\sin w T}{w T} \right)^{-\frac{(N-1)}{2}} \left( \frac{\sin w_0 T}{w_0 T} \right)^{-\frac{1}{2}}.
 \end{aligned} \tag{2.92}$$

A ação clássica de um sistema de  $N$  osciladores harmônicos,  $\bar{S}_{OH}[x_{cl}]$ , em que  $N - 1$  oscilam com frequência  $w$  e um oscila com frequência  $w_0$  é definida a partir da equação (2.54) com  $m \equiv 1/g$ ,

$$\begin{aligned}
 \bar{S}_{OH}[x_{cl}] &= \frac{1}{2} \frac{w_0}{g \sin w_0 T} \left[ (x_f^2 + x_i^2) \cos w_0 T - 2x_i x_f \right] \\
 &+ \sum_{k=1}^{N-1} \left\{ \frac{1}{2} \frac{w}{g \sin w T} \left[ (x_{k_f}^2 + x_{k_i}^2) \cos w T - 2x_{k_i} x_{k_f} \right] \right\}.
 \end{aligned} \tag{2.93}$$

## Conexão com a Mecânica Estatística

A conexão com a mecânica estatística é dada pela função de partição

$$\mathcal{Z} = \int \left( \prod_{k=1}^N dx_k \right) K(x_k, -\iota\beta; x_k, 0),$$

com  $T \rightarrow -\iota\beta$  e  $x_{k_f} = x_{k_i} \equiv x_k$ . Assim, obtemos

$$\mathcal{Z} = \exp \left[ \frac{N\beta H^2}{4\mu \left( 1 - \frac{J}{2\mu} \right)} \right] 2^{-N} \left( \sinh \frac{\beta w}{2} \right)^{-(N-1)} \left( \sinh \frac{\beta w_0}{2} \right)^{-1}, \tag{2.94}$$

que é equivalente ao resultado obtido quando o modelo esférico elementar é quantizado usando o método de quantização canônica, equação (1.55), mostrando que os dois processos de quantização conduzem ao mesmo tipo de comportamento termodinâmico. Uma abordagem diferente de quantização, ainda no contexto de integração funcional, é discutida por

Nieuwenhuizen e Serral Gracià [18, 19].

# Capítulo 3

## Modelo Esférico Elementar na Presença de um Campo Aleatório

O modelo esférico quântico elementar também pode ser analisado de forma exata na presença de uma configuração de campos aleatórios. Apresentamos de forma sucinta a formulação clássica e em seguida a formulação quântica, usando o método de quantização canônica e integrais de trajetória.

### 3.1 Modelo Esférico Médio na Versão de Curie-Weiss

Vamos considerar um conjunto  $\{H_i; i = 1, \dots, N\}$  de variáveis aleatórias independentes, idênticas e indenticamente distribuídas, com média nula,  $\langle H_{\mathbf{r}} \rangle = 0$ , e variância  $\langle H_{\mathbf{r}} H_{\mathbf{r}'} \rangle = \Delta^2 \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}$ . A função de partição grande canônica do modelo esférico médio elementar na presença de uma configuração de campos aleatórios é dada por

$$\Xi_A = \prod_{\mathbf{r}} \left( \int_{-\infty}^{\infty} d\sigma_{\mathbf{r}} \right) \exp \left[ \frac{\beta J}{2N} \left( \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}} \right)^2 + \beta \sum_{\mathbf{r}} (H_{\mathbf{r}} + H) \sigma_{\mathbf{r}} - \beta \mu \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}}^2 \right]. \quad (3.1)$$

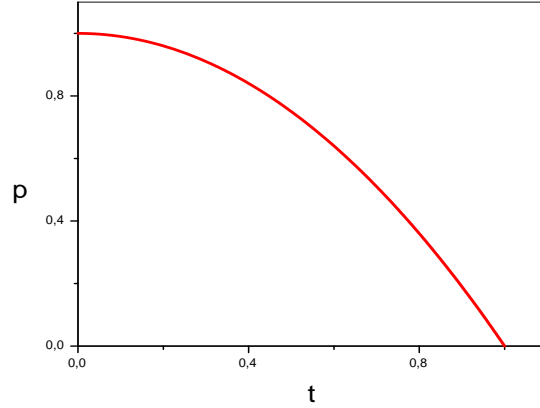


Figura 3.1: Diagrama de fases do modelo esférico clássico elementar na presença de campo aleatório, com  $t \equiv 1/(\beta J)$  e  $p \equiv \Delta/J$ .

Usando a identidade gaussiana, podemos calcular todas as integrais e escrever a função de partição na forma exata

$$\Xi_A = \frac{\left(\frac{\pi}{\beta\mu}\right)^{N/2}}{\left(1 - \frac{J}{2\mu}\right)^{1/2}} \exp \left[ \frac{\beta}{4\mu} \sum_{\mathbf{r}} H_{\mathbf{r}}^2 + \frac{\beta J}{8N\mu^2 \left(1 - \frac{J}{2\mu}\right)} \left( \sum_{\mathbf{r}} H_{\mathbf{r}} \right)^2 \right], \quad (3.2)$$

que é válida para  $\mu > J/2$  e  $H = 0$ . Novamente, o valor  $\mu = J/2$  deve ser reconhecido como o potencial químico crítico.

A “energia livre” associada à função de partição desse sistema é obtida a partir de uma média sobre a distribuição dos campos aleatórios,

$$\phi_N = -\frac{1}{\beta N} \langle \ln \Xi_A \rangle, \quad (3.3)$$

que pode ser escrita para qualquer valor de  $N$  como

$$\phi_N = -\frac{1}{\beta} \left[ \frac{1}{2} \ln \frac{\pi}{\beta\mu} - \frac{1}{2N} \ln \left( 1 - \frac{J}{2\mu} \right) + \frac{\beta\Delta^2}{4\mu} + \frac{\beta J \Delta^2}{8N\mu^2 \left( 1 - \frac{J}{2\mu} \right)} \right]. \quad (3.4)$$



A partir dessa expressão temos a equação do vínculo esférico,

$$1 = \frac{1}{2\beta\mu} + \frac{\Delta^2}{4\mu^2} + \frac{1}{N} \frac{J}{4\mu^2 \left(1 - \frac{J}{2\mu}\right)} \left[ \frac{1}{\beta} + \frac{\Delta^2}{\mu} + \frac{J\Delta^2}{4\mu^2 \left(1 - \frac{J}{2\mu}\right)} \right]. \quad (3.5)$$

Tomando o limite termodinâmico, com  $\mu \rightarrow J/2$ , obtemos a linha crítica

$$1 = \frac{1}{\beta J} + \frac{\Delta^2}{J^2}, \quad (3.6)$$

que está ilustrada na figura (3.1). Ao contrário do modelo de Ising na presença de campos aleatórios [32], obtemos o mesmo comportamento crítico para distribuições gaussianas ou do tipo duplo-delta, desde que tenham média nula e mesma variância.

## 3.2 Modelo Esférico Quântico Elementar

Para examinar os efeitos das flutuações quânticas no modelo esférico quântico elementar na presença de um campo aleatório, apresentamos a versão quântica do modelo usando o método de quantização canônica e a formulação de integrais de trajetória.

### 3.2.1 Quantização Canônica

Dada uma configuração  $\{H_j\}$  de campos aleatórios, o hamiltoniano efetivo quântico, na presença de campo externo, é dado por

$$\mathcal{H}_A = \frac{g}{2} \sum_{\mathbf{r}} p_{\mathbf{r}}^2 - \frac{J}{2N} \left( \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}} \right)^2 - \sum_{\mathbf{r}} (H + H_{\mathbf{r}}) \sigma_{\mathbf{r}} + \mu \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}}^2, \quad (3.7)$$

em que tanto  $\{\sigma_{\mathbf{r}}\}$  quanto  $\{p_{\mathbf{r}}\}$  são operadores quânticos canonicamente conjugados, obedecendo as regras de comutação usuais

$$[\sigma_{\mathbf{r}}, \sigma_{\mathbf{r}'}] = 0, \quad [p_{\mathbf{r}}, p_{\mathbf{r}'}] = 0, \quad [\sigma_{\mathbf{r}}, p_{\mathbf{r}'}] = i\delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}. \quad (3.8)$$

Seguindo os mesmos passos descritos anteriormente, obtemos a forma diagonal

$$Q_A = -\beta\mathcal{H}\{H_{\mathbf{r}}\} = \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \left( c_{\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) - \frac{H^2}{4\left(\mu - \frac{J}{2}\right)^2} - \sum_{\mathbf{q}} \nu_{\mathbf{q}} \hat{H}(\mathbf{q}) \hat{H}(-\mathbf{q}), \quad (3.9)$$

em que as somas são realizadas sobre todos os vetores  $\mathbf{q}$  pertencentes à primeira zona de Brillouin,  $\hat{H}(\mathbf{q})$  é uma transformada de Fourier dos campos aleatórios,

$$\hat{H}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) H_{\mathbf{r}} \quad (3.10)$$

e as frequências são dadas por

$$\omega_{\mathbf{q}} = \begin{cases} \omega_0 \equiv (2g\mu)^{1/2} \left(1 - \frac{J}{2\mu}\right)^{1/2}; & \mathbf{q} = 0 \\ \omega \equiv (2g\mu)^{1/2}; & \mathbf{q} \neq 0 \end{cases} \quad (3.11)$$

e

$$\nu_{\mathbf{q}} = \begin{cases} \nu_0 \equiv \frac{1}{4\mu} \left(1 - \frac{J}{2\mu}\right)^{-1}; & \mathbf{q} = 0 \\ \nu \equiv \frac{1}{4\mu}; & \mathbf{q} \neq 0 \end{cases}. \quad (3.12)$$

A partir dessas expressões, obtemos a função de partição

$$\begin{aligned} Z_A &= 2^{-N} \left[ \sinh \frac{\beta\omega_0}{2} \right]^{-1} \left[ \sinh \frac{\beta\omega}{2} \right]^{-N+1} \\ &\times \exp \left[ \frac{\beta NH^2 + 2\sqrt{N}\hat{H}(0)H}{4\left(\mu - \frac{J}{2}\right)} + \beta \sum_{\mathbf{q}} \nu_{\mathbf{q}}(\mathbf{q}) \hat{H}(\mathbf{q}) \hat{H}(-\mathbf{q}) \right]. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Como no caso clássico, a energia livre é obtida a partir de uma média sobre a distribuição

de campos aleatórios,

$$\begin{aligned}
 f_N &= -\frac{H^2}{4\left(\mu - \frac{J}{2}\right)} + \frac{1}{\beta} \ln 2 + \frac{1}{\beta N} \ln \sinh \frac{\beta\omega_0}{2} \\
 &+ \frac{N-1}{\beta N} \ln \sinh \frac{\beta\omega}{2} - \frac{1}{N} \sum_q \nu_q \Delta^2,
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

com a transformada de Fourier da média dada por

$$\left\langle \hat{H}(\mathbf{q}) \hat{H}(-\mathbf{q}) \right\rangle = \Delta^2. \tag{3.15}$$

Admitindo campo nulo,  $H = 0$ , a expressão do vínculo esférico assume a forma

$$1 = \frac{N-1}{N} \frac{\Delta^2}{4\mu^2} + \frac{N-1}{2N} \frac{g}{\omega} \coth \frac{\beta\omega}{2} + \frac{\Delta^2}{4N\left(\mu - \frac{J}{2}\right)^2} + \frac{1}{N} \frac{g}{2\omega_0} \coth \frac{\beta\omega_0}{2}. \tag{3.16}$$

No limite termodinâmico, com  $\mu \rightarrow J/2$ , obtemos uma equação que define a fronteira crítica num diagrama de fases em termos da temperatura e dos parâmetros  $g$  e  $\Delta$ ,

$$1 = \frac{\Delta^2}{4\mu^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{g}{J}\right)^{1/2} \coth \left[ \frac{\beta}{2} (gJ)^{1/2} \right]. \tag{3.17}$$

No limite  $g \rightarrow 0$ , recuperamos a fronteira clássica, isto é,

$$1 = \frac{\Delta^2}{J^2} + \frac{1}{\beta J}. \tag{3.18}$$

No limite  $T \rightarrow 0$ , temos

$$g = 4J \left( 1 - \frac{\Delta^2}{J^2} \right)^2, \tag{3.19}$$

que define a linha crítica em termos de  $g$  e  $\Delta$ . Diferentemente do modelo esférico quântico elementar na ausência de campo aleatório, no limite  $T \rightarrow 0$ , o comportamento crítico é governado pelas flutuações relacionadas ao campo aleatório e não mais pelas flutuações quânticas.

O primeiro estudo sobre a influência do campo aleatório no comportamento crítico quântico

surgiu no começo da década de 80 [33]. Nesse trabalho é possível verificar que o comportamento crítico quântico é governado pelas flutuações dos campos aleatórios e não pelas flutuações quânticas quando analisamos versões de campo médio. O comportamento crítico, clássico e quântico, do modelo esférico com campo aleatório também é analisado com interações de curto ou longo alcance por Vojta e Schreiber [24].

### 3.2.2 Integrais de Trajetória

Dada a hamiltoniana, equação (3.7), podemos obter a lagrangiana do modelo esférico quântico elementar na presença de um campo aleatório, e apresentar a solução da função de partição usando a formulação de integrais de trajetória. A lagrangiana do modelo esférico quântico elementar na presença de uma configuração de campo aleatório é dada por

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2g} \sum_{j=1}^N \dot{\sigma}_j^2 + \frac{J}{2N} \left( \sum_{j=1}^N \sigma_j \right)^2 + \sum_{J=1}^N (H + H_i) \sigma_j - \mu \sum_{j=1}^N \sigma_j^2. \quad (3.20)$$

Para calcular a amplitude de transição, equação (2.25), o primeiro passo é determinar a ação, com  $\sigma_j \equiv x_j$ . Exatamente como no caso do modelo na ausência de campo aleatório, podemos expandir a ação em torno da trajetória clássica,

$$S[x] = S[x_{cl}] + \frac{1}{2!} \sum_{k,l} \int dt_1 dt_2 \eta_k(t_1) \eta_l(t_2) \frac{\delta^2 S[x]}{\delta x_k(t_1) \delta x_l(t_2)} \Big|_{x=x_{cl}}. \quad (3.21)$$

A partir da derivada funcional segunda da ação,

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2 S[x]}{\delta x_l(t_2) \delta x_k(t_1)} &= \frac{\delta}{\delta x_l(t_2)} \left[ -\frac{1}{g} \frac{d^2 x_k(t_1)}{dt_1^2} + \frac{J}{N} \sum_{j=1}^N x_j(t_1) + (H + H_k) - 2\mu x_k(t_1) \right] \\ &= -\frac{1}{g} \frac{d}{dt_1} \frac{d}{dt_1} [\delta(t_1 - t_2) \delta_{k,l}] + \frac{J}{N} \delta(t_1 - t_2) - 2\mu \delta(t_1 - t_2) \delta_{k,l}, \end{aligned} \quad (3.22)$$

verificamos que a ação será equivalente à ação obtida para a versão do problema na ausência

de campo aleatório, equação (2.72). Portanto, a expressão da amplitude de transição pode ser reescrita como

$$K(x_f, T; x_i, 0) = \left( \frac{1}{2\pi i g T} \right)^{\frac{N}{2}} e^{iS[x_{cl}]} \left( \frac{\sin wT}{wT} \right)^{-\frac{(N-1)}{2}} \left( \frac{\sin w_0 T}{w_0 T} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (3.23)$$

sendo  $w$  e  $w_0$  definidos na equação (3.11). Novamente, temos uma amplitude correspondente a um sistema de  $N$  osciladores harmônicos, tal que  $(N - 1)$  oscilam com frequência  $w$  e um oscila com frequência  $w_0$ . A diferença entre os modelos, na ausência e na presença de campo aleatório, está na ação clássica.

## Ação Clássica

Como já sabemos, deve haver alguma transformação relacionando a lagrangiana do modelo esférico quântico elementar na presença de campo aleatório ( $\mathcal{L}$ ) com a lagrangiana de um conjunto de  $N$  osciladores harmônicos ( $\mathcal{L}_{OH}$ ). Em um caso mais geral, a ação  $\mathcal{L}_{OH}$  pode apresentar um termo adicional devido à presença de campo externo,  $H$ , e campo aleatório,  $H_i$ . Portanto,

$$\mathcal{L}_{OH} = \sum_{k=1}^{N-1} \left( \frac{1}{2} m \dot{x}_k^2 - \frac{1}{2} m w^2 x_k^2 \right) + \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} m w_0^2 x^2 + A \quad (3.24)$$

A constante  $A$  é obtida por um procedimento análogo àquele do capítulo anterior. Redefinimos a coordenada,  $x_i \equiv \tilde{x}_i + f_i$ , na lagrangiana (3.20) e a deixamos na forma

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2g} \sum_i \dot{\tilde{x}}_i^2 + \sum_{i,j} \tilde{x}_i \underbrace{\left( \frac{J}{2N} - \mu \delta_{ij} \right)}_{\mathcal{O}_{ij}} \tilde{x}_j + cte, \quad (3.25)$$

sendo que  $f_i$  é solução da equação

$$2 \sum_{ij} \tilde{x}_j \mathcal{O}_{ij} f_i + \sum_i (H + H_i) \tilde{x}_i = 0 \quad (3.26)$$

e a constante é dada por

$$cte = \sum_{i,j} \left( \frac{J}{2N} - \mu \delta_{ij} \right) f_i f_j + \sum_i (H + H_i) f_i. \quad (3.27)$$

Observe que  $f_i$  deve ter a forma

$$f_i = \sum_k \mathcal{O}_{ik}^{-1} g_k, \quad (3.28)$$

implicando a seguinte relação para  $g_k$ ,

$$\sum_j (2g_j + H + H_j) \tilde{x}_j = 0 \quad \rightarrow \quad g_k = -\frac{1}{2}(H + H_k). \quad (3.29)$$

Dessa forma, calculando a inversa de  $\mathcal{O}_{ik}$ ,

$$\mathcal{O}_{ik}^{-1} = -\frac{1}{\mu} \left[ \frac{J}{2N \left( \mu - \frac{J}{2} \right)} + \delta_{ik} \right], \quad (3.30)$$

podemos obter a constante  $f_i$ ,

$$f_i = \frac{JH}{4\mu \left( \mu - \frac{J}{2} \right)} + \frac{H}{2\mu} + \frac{H_i}{2\mu} + \frac{J}{4N\mu \left( \mu - \frac{J}{2} \right)} \sum_k H_k. \quad (3.31)$$

Com um pouco de trabalho, substituímos a equação (3.31) em (3.27) e obtemos

$$\begin{aligned} cte &= \frac{NH^2}{4\mu \left( 1 - \frac{J}{2\mu} \right)} + \frac{H}{2\mu \left( 1 - \frac{J}{2\mu} \right)} \sum_{i=1}^N H_i + \frac{1}{4\mu} \sum_{i=1}^N H_i \\ &+ \frac{1}{4\mu \left( 1 - \frac{J}{2\mu} \right)} \frac{J}{2\mu N} \left( \sum_{i=1}^N H_i \right)^2. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Quando identificamos o modelo esférico elementar com campo aleatório com um sistema de  $N$  osciladores harmônicos, sendo que  $(N - 1)$  oscilam com frequência  $w$  e um oscila com frequência  $w_0$ , a constante  $A$  da lagrangiana (3.24) deve ser identificada com o termo constante que aparece na expressão (3.25), ou seja,  $A = cte$ .

Portanto, considerando um sistema de osciladores harmônicos, a ação do modelo esférico quântico elementar na presença de campo aleatório é equivalente a

$$\begin{aligned}
 S[x] &\Leftrightarrow \int_0^T dt \mathcal{L}_{OH} \\
 &= \bar{S}_{OH}[x] + \frac{NH^2T}{4\mu \left(1 - \frac{J}{2\mu}\right)} + \frac{HT}{2\mu \left(1 - \frac{J}{2\mu}\right)} \sum_{i=1}^N H_i \\
 &+ \frac{T}{4\mu} \sum_{i=1}^N H_i^2 + \frac{T}{4\mu \left(1 - \frac{J}{2\mu}\right)} \frac{J}{2\mu N} \left( \sum_{i=1}^N H_i \right)^2.
 \end{aligned} \tag{3.33}$$

A ação clássica de um sistema de  $N$  osciladores harmônicos,  $\bar{S}_{OH}[x_{cl}]$ , em que  $(N - 1)$  oscilam com frequência  $w$  e um oscila com frequência  $w_0$ , é definida a partir da equação (2.54) com  $m \equiv 1/g$ ,

$$\begin{aligned}
 \bar{S}_{OH}[x_{cl}] &= \frac{1}{2} \frac{w_0}{g \sin w_0 T} \left[ (x_f^2 + x_i^2) \cos w_0 T - 2x_i x_f \right] \\
 &+ \sum_{k=1}^{N-1} \left\{ \frac{1}{2} \frac{w}{g \sin w T} \left[ (x_{k_f}^2 + x_{k_i}^2) \cos w T - 2x_{k_i} x_{k_f} \right] \right\}.
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

## Conexão com a Mecânica Estatística

A conexão com a mecânica estatística é dada pela função de partição

$$\mathcal{Z} = \int \prod_{k=1}^N dx_k K(T, x_{k_f}; 0, x_{k_i}),$$

com  $T \rightarrow -i\beta$  e  $x_{k_f} = x_{k_i} \equiv x_k$ . A partir da amplitude de transição (3.23) e dos resultados

(3.33) e (3.34), obtemos

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} = & \exp \left[ \frac{NH^2\beta}{4\mu \left(1 - \frac{J}{2\mu}\right)} + \frac{H\beta}{2\mu \left(1 - \frac{J}{2\mu}\right)} \sum_{i=1}^N H_i \right. \\
& + \left. \frac{\beta}{4\mu} \sum_{i=1}^N H_i^2 + \frac{\beta}{4\mu \left(1 - \frac{J}{2\mu}\right)} \frac{J}{2\mu N} \left( \sum_{i=1}^N H_i \right)^2 \right] 2^{-N} \\
& \times \left( \sinh \frac{\beta w}{2} \right)^{-(N-1)} \left( \sinh \frac{\beta w_0}{2} \right)^{-1}. \tag{3.35}
\end{aligned}$$

Não é difícil verificar que, ao escrever a expressão acima em termos das transformadas de Fourier das quantidades envolvidas, obtemos exatamente o resultado (3.13).

Uma análise sobre o modelo de Ising na presença de campo aleatório (RFIM), em duas e três dimensões, é discutida por Belanger e Young [34].



## Capítulo 4

# Modelo Esférico Quântico com Competição

Até o momento, estudamos o modelo esférico com interações do tipo Curie-Weiss. Vamos agora considerar interações competitivas de curto alcance. Em analogia com o modelo ANNNI [23, 35, 36], a competição é introduzida no modelo esférico quântico ao longo de uma dimensão. Consideramos então interações ferromagnéticas de primeiros vizinhos,  $J_1 > 0$ , em todas as direções, e interações antiferromagnéticas de segundos vizinhos,  $J_2 < 0$ , ao longo da direção  $d$ , isto é, direção em que há competição (veja o apêndice B). Em seguida, generalizamos a competição para  $m$  direções ( $m \leq d$ ). Apresentamos a quantização do modelo esférico com competição entre primeiros e segundos vizinhos usando o método de quantização canônica; a formulação do problema usando integrais de trajetória é apresentada no apêndice C. Fazemos uma conexão dos resultados obtidos com alguns resultados conhecidos na literatura.

## 4.1 Quantização Canônica

A diferença entre o modelo esférico quântico tratado por Thomas Vojta [16] e o modelo esférico quântico com competição apresentado nesse capítulo deve-se à forma da energia de interação. Nesse caso, em que a competição é dada ao longo de uma direção entre interações ferromagnéticas ( $J_1 > 0$ ) de primeiros vizinhos e antiferromagnéticas ( $J_2 < 0$ ) de segundos vizinhos, a energia de interação no espaço de Fourier é dada por

$$\hat{J}(\mathbf{q}) = 2J_1 \sum_{i=1}^d \cos(q_i) + 2J_2 \cos(2q_d). \quad (4.1)$$

Em  $(d - 1)$  dimensões existem apenas interações ferromagnéticas de primeiros vizinhos. De uma forma geral, o valor que maximiza  $\hat{J}(\mathbf{q})$  é dado pelo vetor

$$\mathbf{q}_c = \underbrace{(0, 0, 0, \dots, q_c)}_{d-1} \quad (4.2)$$

com

$$q_c = \begin{cases} 0, & \text{para } p \leq \frac{1}{4} \\ \pm \arccos\left(\frac{1}{4p}\right), & \text{para } p > \frac{1}{4} \end{cases}, \quad (4.3)$$

sendo que o parâmetro  $p$  é definido como  $p \equiv -J_2/J_1$ .

Como discutido na introdução, o hamiltoniano efetivo do modelo esférico clássico é dado por

$$\mathcal{H}_{cl} = -\frac{1}{2} \sum_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \sigma_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}'} + \mu \sum_{\mathbf{r}} (\sigma_{\mathbf{r}}^2 - 1) - H \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}}, \quad (4.4)$$

em que  $\sigma_{\mathbf{r}}$  assume valores reais de  $-\infty$  a  $+\infty$ ,  $J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$  é a energia de interação entre os sítios  $\mathbf{r}$  e  $\mathbf{r}'$ ,  $H$  é um campo magnético externo e as somas são sobre os  $N$  sítios da rede. As

variáveis  $\sigma_{\mathbf{r}}$  são sujeitas ao vínculo esférico médio,

$$\sum_{\mathbf{r}} \langle \sigma_{\mathbf{r}}^2 \rangle = N, \quad (4.5)$$

sendo que  $\langle \dots \rangle$  designa uma média termodinâmica. Vimos também que modelo esférico quântico pode ser obtido da versão clássica adicionando um termo de energia cinética,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{kin} + \mathcal{H}_{cl} = \frac{g}{2} \sum_{\mathbf{r}} p_{\mathbf{r}}^2 - \frac{1}{2} \sum_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \sigma_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}'} - H \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}} + \mu \sum_{\mathbf{r}} (\sigma_{\mathbf{r}}^2 - 1), \quad (4.6)$$

e interpretando as variáveis  $\sigma_{\mathbf{r}}$  e  $p_{\mathbf{r}}$  como operadores, satisfazendo as relações

$$[\sigma_{\mathbf{r}}, \sigma_{\mathbf{r}'}] = 0, \quad [p_{\mathbf{r}}, p_{\mathbf{r}'}] = 0, \quad [\sigma_{\mathbf{r}}, p_{\mathbf{r}'}] = i\delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}. \quad (4.7)$$

As flutuações quânticas são determinadas pela constante de acoplamento  $g$ ; no limite  $g \rightarrow 0$  recuperamos o hamiltoniano clássico.

O hamiltoniano quântico, equação (4.6), é diagonalizado introduzindo operadores de criação,  $a_{\mathbf{r}}^{\dagger}$ , e aniquilação,  $a_{\mathbf{r}}$ , como foi feito no modelo esférico quântico elementar, equações (1.41) e (1.42),

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= (2g\mu)^{1/2} \sum_{\mathbf{r}} (a_{\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\mathbf{r}} + 1/2) \\ &- \frac{1}{4} \left( \frac{g}{2\mu} \right)^{1/2} \sum_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) (a_{\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\mathbf{r}'} + a_{\mathbf{r}'}^{\dagger} a_{\mathbf{r}} + a_{\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\mathbf{r}'}^{\dagger} + a_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}'} ) \\ &- \frac{H}{\sqrt{2}} \left( \frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{\mathbf{r}} (a_{\mathbf{r}} + a_{\mathbf{r}}^{\dagger}) - N\mu. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Nesse ponto, devemos admitir que a rede cristalina obedece as condições cíclicas de contorno, pois o processo de diagonalização torna-se muito mais simples. No espaço de Fourier,

$$a_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{q}},$$

o hamiltoniano a ser diagonalizado é dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & (2g\mu)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \left( 1 - \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{4\mu} \right) a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}} - \frac{(2g\mu)^{1/2}}{2} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{4\mu} (a_{\mathbf{q}} a_{-\mathbf{q}} + a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{-\mathbf{q}}^{\dagger}) \\ & - H \left( \frac{N}{2} \right)^{1/2} \left( \frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} (a_0 + a_0^{\dagger}) + \frac{N}{2} (2g\mu)^{1/2} - N\mu, \end{aligned} \quad (4.9)$$

sendo  $\hat{J}(\mathbf{q})$  a transformada de Fourier da energia de interação,

$$\hat{J}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{h}} J(|\mathbf{h}|) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{h}}, \quad (4.10)$$

com  $\mathbf{h} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$  e  $\mathbf{q}$  pertencente à primeira zona de Brillouin. Note que, no processo de diagonalização, não é necessário usar a forma explícita da energia de interação. Portanto, a expressão (4.10) é válida para qualquer interação que dependa apenas das distâncias entre os sítios. Em particular, para o nosso modelo com competição, a energia é definida em (4.1).

A diagonalização da equação (4.9) é feita a partir de duas transformadas de Bogoliubov. Iniciamos com o modo  $\mathbf{q} = 0$ , ou seja, queremos encontrar a forma diagonal da expressão

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\mathbf{q}=0} = & (2g\mu)^{1/2} \left( 1 - \frac{\hat{J}(0)}{4\mu} \right) a_0^{\dagger} a_0 - \frac{(2g\mu)^{1/2}}{2} \frac{\hat{J}(0)}{4\mu} [a_0^2 + (a_0^{\dagger})^2] \\ & - H \left( \frac{N}{2} \right)^{1/2} \left( \frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} (a_0 + a_0^{\dagger}). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Para isso, definimos os operadores  $a_0$  e  $a_0^{\dagger}$  em termos de novos operadores,  $c_0$  e  $c_0^{\dagger}$ ,

$$\begin{aligned} a_0 & \equiv u_0 c_0 + v_0 c_0^{\dagger} + w_0 \\ a_0^{\dagger} & \equiv u_0 c_0^{\dagger} + v_0 c_0 + w_0, \end{aligned} \quad (4.12)$$

em que as constantes  $u_0$ ,  $v_0$  e  $w_0$  são escolhidas para preservar as relações de comutação bosônicas e para assegurar a forma diagonal. A constante  $w_0$  representa uma translação simples na transformação de Bogoliubov, para levar em conta o campo externo  $H$ . Com a

escolha

$$u_0^2 = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\hat{J}(0)}{4\mu}\right) \left(1 - \frac{\hat{J}(0)}{2\mu}\right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (4.13)$$

$$v_0^2 = -\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\hat{J}(0)}{4\mu}\right) \left(1 - \frac{\hat{J}(0)}{2\mu}\right)^{-\frac{1}{2}} \quad (4.14)$$

e

$$w_0^2 = \frac{NH^2}{2} \left(\frac{g}{2\mu}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(2g\mu)} \left(1 - \frac{\hat{J}(0)}{2\mu}\right)^{-2}, \quad (4.15)$$

obtemos a forma diagonal para o modo  $\mathbf{q} = 0$ ,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\mathbf{q}=0} &= (2g\mu)^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{\hat{J}(0)}{2\mu}\right)^{\frac{1}{2}} a_0^\dagger a_0 + \frac{1}{2} (2g\mu)^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{\hat{J}(0)}{2\mu}\right)^{\frac{1}{2}} \\ &- \frac{NH^2}{4\mu \left(1 - \frac{\hat{J}(0)}{2\mu}\right)} - \frac{(2g\mu)^{\frac{1}{2}}}{2} \left(1 - \frac{\hat{J}(0)}{4\mu}\right). \end{aligned} \quad (4.16)$$

A diagonalização no modo  $\mathbf{q} \neq 0$ ,

$$\mathcal{H}_{\mathbf{q} \neq 0} = (2g\mu)^{1/2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \left(1 - \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{4\mu}\right) a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} - \frac{(2g\mu)^{1/2}}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{4\mu} (a_{\mathbf{q}} a_{-\mathbf{q}} + a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{-\mathbf{q}}^\dagger), \quad (4.17)$$

procede por meio da seguinte transformação de Bogoliubov

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{q}} &\equiv u_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}} + v_{\mathbf{q}} c_{-\mathbf{q}}^\dagger \\ a_{-\mathbf{q}} &\equiv u_{\mathbf{q}} c_{-\mathbf{q}} + v_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}}^\dagger, \end{aligned} \quad (4.18)$$

com

$$u_{\mathbf{q}}^2 = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{4\mu}\right) \left(1 - \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{2\mu}\right)^{-\frac{1}{2}} \quad (4.19)$$

e

$$v_{\mathbf{q}}^2 = -\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{4\mu}\right) \left(1 - \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{2\mu}\right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (4.20)$$

Novamente,  $u_{\mathbf{q}}$  e  $v_{\mathbf{q}}$  foram escolhidos tal que preservem as relações de comutação e conduzam à forma diagonal

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\mathbf{q} \neq 0} = & \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \left[ (2g\mu)^{\frac{1}{2}} \left( 1 - \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{2\mu} \right)^{\frac{1}{2}} c_{\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{q}} - \frac{(2g\mu)^{\frac{1}{2}}}{2} \left( 1 - \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{4\mu} \right) \right. \\ & \left. + \frac{(2g\mu)^{\frac{1}{2}}}{2} \left( 1 - \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{2\mu} \right)^{\frac{1}{2}} \right]. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Por fim, reunindo os resultados (4.16) e (4.21), além dos termos constantes no hamiltoniano de partida, dado pela equação (4.9), obtemos

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{q}} w_{\mathbf{q}} \left( c_{\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) - \frac{NH^2}{4 \left( \mu - \frac{\hat{J}(0)}{2} \right)} - N\mu, \quad (4.22)$$

com a frequência definida como

$$w_{\mathbf{q}}^2 \equiv (2g\mu) \left( 1 - \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{2\mu} \right) \quad (4.23)$$

e sob a condição

$$\sum_{\mathbf{q}} \hat{J}(\mathbf{q}) = J(|h=0|) = 0. \quad (4.24)$$

A somatória na equação (4.22) se restringe aos valores de  $\mathbf{q}$  pertencentes à primeira zona de Brillouin. Visto que  $w_{\mathbf{q}}$  é a frequência do modo  $\mathbf{q}$  do sistema, esse modelo apresenta resultados fisicamente aceitáveis apenas para  $\mu > \hat{J}_m(q)/2$ , sendo que  $\hat{J}_m(\mathbf{q})$  é o valor máximo de  $\hat{J}(\mathbf{q})$ , definido no começo da seção e no apêndice B.

A função de partição do modelo esférico quântico com competição é dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_N(\beta, H, \mu) &= \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}} \\ &= \exp \left[ \frac{\beta NH^2}{4 \left( \mu - \frac{\hat{J}(0)}{2} \right)} + \beta N\mu \right] \prod_{\mathbf{q}} \left[ 2 \sinh \frac{1}{2} \beta w_{\mathbf{q}} \right]^{-1}, \end{aligned} \quad (4.25)$$

em que  $\beta$  é o inverso da temperatura  $\beta = 1/T$ , com  $k_B = 1$  (constante de Boltzmann). A energia livre por sítio da rede é definida como

$$\begin{aligned} f(\beta, H, \mu) &= -\frac{1}{\beta N} \ln \mathcal{Z}_N \\ &= -\mu - \frac{H^2}{4 \left[ \mu - \frac{j(0)}{2} \right]} + \frac{1}{\beta N} \sum_{\mathbf{q}} \ln \left( 2 \sinh \frac{1}{2} \beta w_{\mathbf{q}} \right). \end{aligned} \quad (4.26)$$

Portanto, o vínculo esférico que determina  $\mu$  é dado por

$$0 = \frac{\partial f}{\partial \mu} = -1 + \frac{H^2}{4 \left[ \mu - \frac{j(0)}{2} \right]^2} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{g}{2w_{\mathbf{q}}} \coth \frac{1}{2} \beta w_{\mathbf{q}}. \quad (4.27)$$

No limite  $g \rightarrow 0$  a equação do vínculo, (4.27), recupera o caso clássico,

$$1 = \frac{H^2}{4 \left[ \mu - \frac{j(0)}{2} \right]} + \frac{1}{2N\beta} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\mu - \frac{j(\mathbf{q})}{2}}. \quad (4.28)$$

Como no modelo esférico quântico elementar, a expressão para a energia livre, (4.26), não recupera o caso clássico no limite  $g \rightarrow 0$ . Isso acontece porque a energia livre do modelo com competição também apresenta o termo adicional proporcional a  $\ln(\beta g)$  no limite  $g \rightarrow 0$ . Esse termo pode corrigir o comportamento crítico a baixas temperaturas.

A equação (4.27) é válida para qualquer energia de interação que dependa da distância entre os sítios. O problema da competição aparece na análise do comportamento crítico, quando de fato usamos a forma explícita da energia de interação.

## 4.2 Comportamento Crítico

Como dito anteriormente, a diferença entre o modelo esférico quântico usual e o modelo esférico quântico com competição é a forma da energia de interação,  $\hat{J}(\mathbf{q})$ . Portanto, para

estudar o comportamento crítico do modelo com competição, devemos analisar a convergência da expressão (4.27) com  $\hat{J}(\mathbf{q})$  definido na equação (4.1).

Inicialmente, expandimos a soma na equação (4.27) em torno do ponto  $w_{\mathbf{q}} = 0$ , isto é, no limite  $\mu \rightarrow \hat{J}(\mathbf{q})/2$ ,

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{g}{2w_{\mathbf{q}}} \coth \left( \frac{1}{2} \beta w_{\mathbf{q}} \right) = \frac{g\beta}{12} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{g}{\beta w_{\mathbf{q}}^2} + \mathcal{O}[w_{\mathbf{q}}^2]. \quad (4.29)$$

Como  $w_{\mathbf{q}}$  depende de  $\hat{J}(\mathbf{q})$ , equação (4.23), expandimos  $\hat{J}(\mathbf{q})$  em série de Taylor em torno do ponto crítico  $\mathbf{q} = \mathbf{q}_c$ ,

$$\begin{aligned} \hat{J}(\mathbf{q}) &= \hat{J}(\mathbf{q}_c) + \sum_{i=1}^d \left. \frac{\partial \hat{J}(\mathbf{q})}{\partial q_i} \right|_{q_i=q_{i_c}} (q_i - q_{i_c}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d \left. \frac{\partial^2 \hat{J}(\mathbf{q})}{\partial q_i \partial q_j} \right|_{\substack{q_i=q_{i_c} \\ q_j=q_{j_c}}} (q_i - q_{i_c})(q_j - q_{j_c}) + \mathcal{O}[(q - q_c)^3], \end{aligned} \quad (4.30)$$

com

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^d \left. \frac{\partial \hat{J}(\mathbf{q})}{\partial q_i} \right|_{q_i=q_{i_c}} (q_i - q_{i_c}) &= -2 \{ J_1 \sin q_{1_c} (q_1 - q_{1_c}) + J_1 \sin q_{2_c} (q_2 - q_{2_c}) + \dots \\ &+ [J_1 \sin q_{d_c} + 2J_2 \sin(2q_{d_c})] (q_d - q_{d_c}) \} \end{aligned} \quad (4.31)$$

e

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d \left. \frac{\partial^2 \hat{J}(\mathbf{q})}{\partial q_i \partial q_j} \right|_{\substack{q_i=q_{i_c} \\ q_j=q_{j_c}}} (q_i - q_{i_c})(q_j - q_{j_c}) &= -2 \{ J_1 \cos q_{1_c} (q_1 - q_{1_c})^2 + \dots \\ &+ [J_1 \cos q_{d_c} + 4J_2 \cos(2q_{d_c})] (q_d - q_{d_c})^2 \}. \end{aligned} \quad (4.32)$$

A derivada primeira, equação (4.31), é nula tanto para  $p \leq 1/4$  como para  $p > 1/4$ , pois  $\mathbf{q}_c$  é o valor que maximiza  $\hat{J}(\mathbf{q})$ . A derivada segunda, equação (4.32), depende do valor de  $q_c$ , que é distinto para  $p \leq 1/4$  e para  $p > 1/4$ , de acordo com a equação (4.3). O estudo da convergência da expressão (4.29) é feito no ponto  $\mu = \hat{J}(\mathbf{q}_c)/2$ . Como  $\hat{J}(\mathbf{q}_c)$  assume valores



diferentes para  $p < 1/4$  e para  $p > 1/4$ , a análise de convergência da soma na equação (4.29) é feita separadamente.

### 4.2.1 Análise de Convergência para $p < 1/4$

Nessa região temos  $\mathbf{q}_c = (0, 0, \dots, 0)$ . Como o objetivo é obter os expoentes clássicos e quânticos, a análise será feita para os dois casos separadamente, ou seja, para  $T \neq 0$  e  $T = 0$ , respectivamente.

#### Caso $T \neq 0$

Usando o fato que

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \Leftrightarrow \frac{v}{(2\pi)^d} \int d^d \mathbf{q},$$

sendo  $v$  o volume da célula unitária, para uma rede em  $d$  dimensões com volume da célula unitária igual a 1, a soma da equação (4.29), depois da expansão de  $\hat{J}(\mathbf{q})$  em torno do ponto  $\mathbf{q} = \mathbf{q}_c$ , assume a forma

$$\begin{aligned} I &\equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{g}{\beta w_{\mathbf{q}}^2} \sim \frac{1}{\beta} \int d^d \mathbf{q} \frac{g}{w_{\mathbf{q}}^2} \\ &\approx \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{\left(\mu - \frac{\hat{J}(\mathbf{q}_c)}{2}\right) + J_1 \mathbf{q}^2 + 4 J_2 q_d^2}. \end{aligned} \quad (4.33)$$

A partir da identidade

$$\frac{1}{a^p} = \frac{1}{\Gamma(p)} \int_0^{\infty} dx x^{p-1} e^{-ax}, \quad (4.34)$$

no ponto  $\mu = \hat{J}(\mathbf{q}_c)/2$  a integral da equação (4.33) é reescrita como

$$\begin{aligned}
I &= \int_0^\infty dx \int d^d \mathbf{q} \exp[-x(J_1 \mathbf{q}^2 + 4J_2 q_d^2)] \\
&= \int_0^\infty dx \left[ \int_{-\pi}^\pi dq \exp(-xJ_1 q^2) \right]^{d-1} \int_{-\pi}^\pi dq \exp[-x(J_1 + 4J_2)q^2] \\
&= \int_0^\infty dx \left[ \sqrt{\frac{\pi}{xJ_1}} \operatorname{Erf}\left(\pi\sqrt{xJ_1}\right) \right]^{d-1} \sqrt{\frac{\pi}{x(J_1 + 4J_2)}} \operatorname{Erf}\left(\pi\sqrt{x(J_1 + 4J_2)}\right). \quad (4.35)
\end{aligned}$$

Analisando os comportamentos assintóticos em relação ao parâmetro  $x$ ,

$$\begin{aligned}
\operatorname{Erf}(a\sqrt{x}) &\sim \frac{2a\sqrt{x}}{\pi}, & x \rightarrow 0 \\
\operatorname{Erf}(a\sqrt{x}) &\sim 1, & x \rightarrow \infty,
\end{aligned} \quad (4.36)$$

verificamos que a integral da equação (4.35) converge sempre no limite  $x \rightarrow 0$ . No limite  $x \rightarrow \infty$ , a convergência depende da dimensão,

$$I \sim \int dx x^{-\frac{d}{2}}. \quad (4.37)$$

Nesse caso, no limite  $x \rightarrow \infty$ , a integral converge para todo  $d > 2$ .

### Caso $T = 0$

Sabemos que o comportamento crítico é determinado pela equação do vínculo esférico, equação (4.27). Em  $T = 0$ , a soma do vínculo se reduz a

$$I_0 \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{g}{2w_{\mathbf{q}}} \coth \frac{1}{2} \beta w_{\mathbf{q}} \approx \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{g}{2w_{\mathbf{q}}}. \quad (4.38)$$

As expansões são feitas como no caso de  $T \neq 0$ ,  $\mathbf{q}$  em torno de  $\mathbf{q}_c$ , tal que

$$I_0 \approx \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{\left[ \mu - \frac{\hat{J}(\mathbf{q}_c)}{2} + J_1 \mathbf{q}^2 + 4 J_2 q_d^2 \right]^{\frac{1}{2}}}. \quad (4.39)$$

Usando a relação (4.34), no ponto  $\mu = \hat{J}(\mathbf{q}_c)/2$ , obtemos

$$\begin{aligned} I_0 &\approx \int_0^\infty dx x^{-\frac{1}{2}} \left[ \int_{-\pi}^\pi dq \exp(-x J_1 q) \right]^{d-1} \int_{-\pi}^\pi dq \exp[-x(J_1 + 4J_2)q^2] \\ &= \int_0^\infty dx x^{-\frac{1}{2}} \left[ \sqrt{\frac{\pi}{x J_1}} \text{Erf}\left(\pi \sqrt{x J_1}\right) \right]^{d-1} \sqrt{\frac{\pi}{x(J_1 + 4J_2)}} \text{Erf}\left(\pi \sqrt{x(J_1 + 4J_2)}\right). \end{aligned} \quad (4.40)$$

Novamente, a partir dos comportamentos assintóticos, equação (4.36), verificamos que a integral  $I_0$  converge sempre no limite de  $x \rightarrow 0$ . No limite de  $x \rightarrow \infty$ , temos

$$I_0 \sim \int dx x^{-\frac{(d+1)}{2}} \quad (4.41)$$

e a integral converge para  $d > 1$ .

Portanto, para  $p < 1/4$ , a soma da expressão (4.29) converge sempre para  $d > 2$  quando  $T \neq 0$  e converge sempre para  $d > 1$  quando  $T = 0$ .

### 4.2.2 Análise de Convergência para $p > 1/4$

Para  $p > 1/4$  o estudo também é feito em duas etapas,  $T \neq 0$  e  $T = 0$ . O mecanisico da análise segue o mesmo raciocínio de  $p < 1/4$ . As expansões são similares, com

$$\mathbf{q}_c = (0, 0, 0, \dots, \pm \arccos 1/(4p)). \quad (4.42)$$

Caso  $T \neq 0$

A partir da expansão de  $\hat{J}(\mathbf{q})$  em torno do ponto  $\mathbf{q}_c$ , temos

$$I = \frac{1}{\beta} \int d^d \mathbf{q} \frac{g}{2w_{\mathbf{q}}^2}$$

$$\approx \frac{1}{\beta} \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{\left(\mu - \frac{\hat{J}(\mathbf{q}_c)}{2}\right) + J_1(q_1^2 + q_2^2 + \dots + q_{d-1}^2) + J_1\left(4p - \frac{1}{4p}\right)\left(q_d \pm \arccos \frac{1}{4p}\right)^2}.$$

A partir da relação (4.34), a integral acima, no ponto  $\mu = \hat{J}(\mathbf{q}_c)/2$ , é dada por

$$I = \int_0^\infty dx \left( \int_{-\pi}^\pi dq e^{-xJ_1q^2} \right)^{d-1} \int_{-\pi}^\pi dq e^{-xJ_1\left(4p - \frac{1}{4p}\right)\left(q \pm \arccos \frac{1}{4p}\right)^2}$$

$$= \int_0^\infty dx \left( \frac{\sqrt{\pi} \operatorname{Erf}(\pi\sqrt{J_1x})}{\sqrt{J_1x}} \right)^{d-1} \left[ \frac{\pi}{4J_1\left(4p - \frac{1}{4p}\right)x} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\times \left\{ \operatorname{Erf} \left[ \sqrt{J_1\left(4p - \frac{1}{4p}\right)x} (\pi - \operatorname{arcsec} 4p) \right] + \operatorname{Erf} \left[ \sqrt{J_1\left(4p - \frac{1}{4p}\right)x} (\pi + \operatorname{arcsec} 4p) \right] \right\}.$$

Analisando os comportamentos assintóticos em relação ao parâmetro  $x$ , constatamos que a integral  $I$  tende para um valor finito, quando  $x \rightarrow 0$ . No limite  $x \rightarrow \infty$ , a integral apresenta divergência dependendo da dimensão. Como  $\operatorname{Erf}(\infty) \rightarrow 1$ , temos

$$I \sim \int dx x^{-\frac{d}{2}} \quad (4.43)$$

e a integral  $I$  converge sempre que  $d > 2$ .

Caso  $T = 0$

Novamente, expandindo  $\hat{J}(\mathbf{q})$  em torno do ponto  $\mathbf{q}_c$ , obtemos

$$I_0 \approx \int d^d \mathbf{q} \frac{g}{2w_{\mathbf{q}}} \\ = \int d^d \mathbf{q} \frac{g}{2 \left\{ 2g \left[ \mu - \frac{\hat{J}(\mathbf{q}_c)}{2} + J_1 (q_1^2 + \dots + q_{d-1}^2) + J_1 \left( 4p - \frac{1}{4p} \right) \left( q_d \pm \arccos \frac{1}{4p} \right)^2 \right] \right\}^{1/2}},$$

para  $T = 0$ . Usando a identidade (4.34), no ponto  $\mu = \hat{J}(\mathbf{q}_c)/2$ , a integral  $I_0$  pode ser escrita como

$$I_0 \sim \int_0^\infty dx \frac{1}{\sqrt{x}} \left( \prod_{i=1}^d \int_{-\pi}^\pi d_{q_i} \exp \left[ -x J_1 \left( q_1^2 + \dots + q_{d-1}^2 + \left( 4p - \frac{1}{4p} \right) \left( q_d \pm \arccos \frac{1}{4p} \right)^2 \right) \right] \right) \\ = \int_0^\infty dx \frac{1}{\sqrt{x}} \left( \frac{\sqrt{\pi} \operatorname{Erf}(\pi \sqrt{J_1 x})}{\sqrt{J_1 x}} \right)^{d-1} \left[ \frac{\pi}{4 J_1 \left( 4p - \frac{1}{4p} \right) x} \right]^{\frac{1}{2}} \\ \times \left\{ \operatorname{Erf} \left[ \sqrt{J_1 \left( 4p - \frac{1}{4p} \right) x} (\pi - \operatorname{arcsec} 4p) \right] + \operatorname{Erf} \left[ \sqrt{J_1 \left( 4p - \frac{1}{4p} \right) x} (\pi + \operatorname{arcsec} 4p) \right] \right\}.$$

Em relação aos comportamentos assintóticos do parâmetro  $x$ ,  $I_0$  tende para um valor finito quando  $x \rightarrow 0$ . Quando  $x \rightarrow \infty$  a integral apresenta divergência dependendo da dimensão. Como  $\operatorname{Erf}(\infty) \rightarrow 1$ , temos

$$I_0 \sim \int dx x^{-\left(\frac{d+1}{2}\right)} \quad (4.44)$$

e a integral  $I_0$  converge sempre que  $d > 1$ .

De um modo geral, a partir dos resultados obtidos para a convergência da soma

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{g}{2w_{\mathbf{q}}} \coth \left( \frac{1}{2} \beta w_{\mathbf{q}} \right),$$

verificamos que a expressão que determina o vínculo esférico converge sempre para  $d >$

2 quando admitimos  $T \neq 0$  e converge sempre para  $d > 1$  quando admitimos  $T = 0$ , independentemente do parâmetro  $p$  ( $p < 1/4$  ou  $p > 1/4$ ).

O comportamento crítico do modelo esférico quântico com competição é determinado pela equação do vínculo esférico, equação (4.27), no ponto  $\mu = \hat{J}(\mathbf{q}_c)/2$ . Como já sabemos, no modelo esférico com competição  $\hat{J}(\mathbf{q}_c)$  pode assumir dois valores distintos para diferentes regiões do parâmetro  $p$ . No entanto, para  $p \neq 1/4$ , o sistema apresenta um ponto crítico em  $H = 0$ ,  $\mu = \mu_c$  e  $T = T_c$  para  $T \neq 0$  e  $d > 2$ , e um ponto crítico em  $H = 0$ ,  $\mu = \mu_c$  e  $g = g_c$  para  $T = 0$  e  $d > 1$ .

### 4.2.3 Comportamento Crítico com $T \neq 0$

Nessa seção, nós discutimos o comportamento crítico do modelo com temperatura finita,  $T$ . Se a soma da expressão que determina o vínculo converge para  $d > 2$ , então o sistema apresenta um ponto crítico com  $H = 0$ ,  $T = T_c$  e  $\mu = \mu_c$ . No ponto crítico, temos

$$0 = -1 + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{g}{2w_{c\mathbf{q}}} \coth \frac{1}{2} \beta_c w_{c\mathbf{q}} \quad (4.45)$$

com

$$w_{c\mathbf{q}}^2 = 2g \left( \mu_c - \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{2} \right). \quad (4.46)$$

Subtraindo a equação (4.45) da equação (4.27) conseguimos calcular o comportamento do sistema nas proximidades do ponto crítico,

$$0 = \frac{H^2}{\left( \mu - \frac{\hat{J}(0)}{2} \right)^2} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left( \underbrace{\frac{g}{2w_{\mathbf{q}}} \coth \frac{1}{2T} w_{\mathbf{q}}}_{m(T,g,\mu)} - \frac{g}{2w_{c\mathbf{q}}} \coth \frac{1}{2T_c} w_{c\mathbf{q}} \right). \quad (4.47)$$

Inicialmente, expandimos  $m(T, g, \mu)$  em série de Taylor em torno do ponto crítico  $T = T_c$  e

$$\mu = \mu_c,$$

$$m(T, g, \mu) = m(T, g, \mu) \Big|_{\substack{T=T_c \\ \mu=\mu_c}} + \frac{\partial m(T, g, \mu)}{\partial T} \Big|_{\substack{T=T_c \\ \mu=\mu_c}} (T - T_c) + \frac{\partial m(T, g, \mu)}{\partial \mu} \Big|_{\substack{T=T_c \\ \mu=\mu_c}} (\mu - \mu_c) + \dots$$

Usando os resultados

$$\frac{\partial m(T, g, \mu)}{\partial T} \Big|_{\substack{T=T_c \\ \mu=\mu_c}} = \frac{g}{4T_c^2} \operatorname{csch}^2 \left( \frac{w_{c\mathbf{q}}}{2T_c} \right)$$

e

$$\frac{\partial m(T, g, \mu)}{\partial \mu} \Big|_{\substack{T=T_c \\ \mu=\mu_c}} = -\frac{g^2}{4T_c(w_{c\mathbf{q}})^3} \operatorname{csch}^2 \left( \frac{w_{c\mathbf{q}}}{2T_c} \right) \left[ w_{c\mathbf{q}} + T_c \sinh \left( \frac{w_{c\mathbf{q}}}{T_c} \right) \right],$$

a soma da equação (4.47) é dada por

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left( \underbrace{\frac{g}{2w_{\bar{q}}} \coth \frac{1}{2T} w_{\mathbf{q}} - \frac{g}{2w_{c\mathbf{q}}} \coth \frac{1}{2T_c} w_{c\mathbf{q}}}_{m(T, g, \mu)} \right) &\approx \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left[ \frac{g}{4T_c^2} \operatorname{csch}^2 \left( \frac{w_{c\mathbf{q}}}{2T_c} \right) (T - T_c) \right. \\ &\quad \left. - \frac{g^2}{4T_c(w_{c\mathbf{q}})^3} \operatorname{csch}^2 \left( \frac{w_{c\mathbf{q}}}{2T_c} \right) \left[ w_{c\mathbf{q}} + T_c \sinh \left( \frac{w_{c\mathbf{q}}}{T_c} \right) \right] (\mu - \mu_c) \right]. \end{aligned}$$

A soma é feita termo a termo usando o fato que

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \sim \int d^d \mathbf{q}.$$

O primeiro termo conduz a

$$I_1 = \frac{g}{4T_c^2} (T - T_c) \int d^d \mathbf{q} \operatorname{csch}^2 \left( \frac{w_{c\mathbf{q}}}{2T_c} \right). \quad (4.48)$$

Podemos expandir  $\operatorname{csch}$  em torno de  $w_{c\mathbf{q}} = 0$ , pois é o termo de maior contribuição, de tal forma que

$$I_1 \approx \frac{(T - T_c)}{2} \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{\mu_c - \frac{\hat{j}(\mathbf{q})}{2}}. \quad (4.49)$$

O segundo termo,

$$I_2 = (\mu - \mu_c) \frac{g^2}{4T_c} \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{(w_{c\mathbf{q}})^3} \operatorname{csch}^2 \left( \frac{w_{c\mathbf{q}}}{2T_c} \right) \left[ w_{c\mathbf{q}} + T_c \sinh \left( \frac{w_{c\mathbf{q}}}{T_c} \right) \right], \quad (4.50)$$

também é expandido em termos de  $w_{c\mathbf{q}} = 0$ , tal que

$$I_2 \approx (\mu - \mu_c) T_c \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{\left( \mu_c - \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{2} \right)^2}. \quad (4.51)$$

De um modo geral, admitindo campo nulo, a expressão que determina o comportamento crítico com  $T \neq 0$  é dada por

$$0 = I_1 - I_2, \quad (4.52)$$

sendo  $I_1$  e  $I_2$  definidos nas equações (4.49) e (4.51), respectivamente. O passo seguinte é expandir essas equações em torno do ponto  $\mathbf{q} = \mathbf{q}_c$ , que é definido nas equações (4.2) e (4.3).

**Caso  $p < 1/4$**

Nessa região, o primeiro termo,

$$I_1 = \frac{(T - T_c)}{2} \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{J_1 \mathbf{q}^2 + 4 J_2 q_d^2}, \quad (4.53)$$

corresponde à integral (4.33) no ponto  $\mu = \hat{J}(\mathbf{q}_c)/2$ , ou seja, converge para  $d > 2$ . O segundo termo assume a forma

$$\begin{aligned} I_2 &\approx T_c (\mu - \mu_c) \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{(J_1 \mathbf{q}^2 + 4 J_2 q_d^2)^2} \\ &= T_c (\mu - \mu_c) \int_0^\infty dx x \left( \int_{-\pi}^\pi dq \exp(-x J_1 q) \right)^{d-1} \int_{-\pi}^\pi dq \exp[-x (J_1 + 4 J_2) q^2] \\ &= T_c (\mu - \mu_c) \int_0^\infty dx x \left[ \sqrt{\frac{\pi}{x J_1}} \operatorname{Erf} \left( \pi \sqrt{x J_1} \right) \right]^{d-1} \sqrt{\frac{\pi}{x (J_1 + 4 J_2)}} \operatorname{Erf} \left( \pi \sqrt{x (J_1 + 4 J_2)} \right). \end{aligned}$$



Analisando os comportamentos assintóticos de  $x$ , a integral  $I_2$  converge sempre no limite de  $x \rightarrow 0$ . No limite de  $x \rightarrow \infty$ , temos

$$I_2 \sim T_c(\mu - \mu_c) \int dx x^{1-\frac{d}{2}}, \quad (4.54)$$

que converge sempre para  $d > 4$ . Portanto, a partir dos resultados (4.53) e (4.54), para  $d > 4$ , a equação que determina o comportamento crítico, (4.52), conduz a

$$\mu - \mu_c \sim \tau, \quad (4.55)$$

definindo  $\tau \equiv (T - T_c)/T_c$  como a distância do ponto crítico. Fazendo uma mudança de variável na integral (4.54), podemos calcular a divergência nas dimensões  $d = 4$  e  $d = 3$ . Assim, para  $x \equiv 1/(a^2)$ , podemos analisar a convergência da integral

$$I_2 \sim T_c(\mu - \mu_c) \int da a^{d-5}$$

no limite  $a \rightarrow 0$ . Para  $d = 4$ , obtemos

$$\begin{aligned} I_2 &= T_c (\mu - \mu_c) \int da a^{-1} \\ &\approx T_c (\mu - \mu_c) \lim_{\epsilon \rightarrow \frac{(T-T_c)}{T_c}} \ln \epsilon, \end{aligned} \quad (4.56)$$

e o comportamento crítico é dado por

$$(\mu - \mu_c) \sim \frac{\tau}{\ln \tau}. \quad (4.57)$$

Para  $d = 3$ , obtemos

$$\begin{aligned} I_2 &= T_c (\mu - \mu_c) \int da a^{-2} \\ &\approx T_c (\mu - \mu_c) \lim_{\epsilon \rightarrow \frac{T-T_c}{T_c}} \epsilon^{-1}, \end{aligned} \quad (4.58)$$

e o comportamento crítico é dada por

$$(\mu - \mu_c) \sim \tau^2. \quad (4.59)$$

**Caso  $p > 1/4$**

Nessa região, temos

$$I_1 \approx \frac{(T - T_c)}{2} \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{J_1(q_1^2 + \dots + q_{d-1}^2) + J_1\left(4p - \frac{1}{4p}\right) (q_d \pm \arccos 1/4p)^2}, \quad (4.60)$$

que converge para  $d > 2$ , como mostrado no estudo da convergência. O segundo termo assume a forma

$$I_2 \approx T_c (\mu - \mu_c) \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{\left[ J_1(q_1^2 + \dots + q_{d-1}^2) + J_1\left(4p - \frac{1}{4p}\right) (q_d \pm \arccos 1/4p)^2 \right]^2}. \quad (4.61)$$

Exatamente como no caso  $p < 1/4$ , a integral  $I_2$  converge para  $d > 4$  e o comportamento crítico obtido é

$$\mu - \mu_c \sim \tau, \quad \text{para } d > 4, \quad (4.62)$$

$$(\mu - \mu_c) \sim \frac{\tau}{\ln \tau}, \quad \text{para } d = 4 \quad (4.63)$$

e

$$(\mu - \mu_c) \sim \tau^2, \quad \text{para } d = 3. \quad (4.64)$$

Podemos verificar que o comportamento crítico do sistema independe do parâmetro de competição quando  $p \neq 1/4$ .

#### 4.2.4 Comportamento Crítico com $T = 0$

Admitindo temperatura nula, a expressão do vínculo esférico é dada por

$$0 = -1 + \frac{H^2}{\left(\mu - \frac{j(0)}{2}\right)^2} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{g}{2w_{\mathbf{q}}}. \quad (4.65)$$

Para  $H = 0$  o sistema apresenta um ponto crítico em  $g = g_c$  e  $\mu = \mu_c$ , tal que

$$0 = -1 + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{g_c}{2w_{c\mathbf{q}}}. \quad (4.66)$$

Subtraindo a equação (4.66) da equação (4.65) podemos estudar o comportamento do sistema nas proximidades do ponto crítico,

$$0 = \frac{H^2}{\left(\mu - \frac{j(0)}{2}\right)^2} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left( \underbrace{\frac{g}{2w_{\mathbf{q}}}}_{n(g,\mu)} - \frac{g_c}{2w_{c\mathbf{q}}} \right). \quad (4.67)$$

Expandindo  $n(g, \mu)$  em série de Taylor em torno do ponto crítico  $\mu = \mu_c$  e  $g = g_c$ , temos

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left( \frac{g}{2w_{\mathbf{q}}} - \frac{g_c}{2w_{c\mathbf{q}}} \right) &\sim \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left( \frac{1}{4w_{c\mathbf{q}}} (g - g_c) - \frac{g_c^2}{2w_{c\mathbf{q}}^3} (\mu - \mu_c) \right) \\ &\sim (g - g_c) \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{\left(\mu_c - \frac{j(\mathbf{q})}{2}\right)^{1/2}} - (\mu - \mu_c) g_c \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{\left(\mu_c - \frac{j(\mathbf{q})}{2}\right)^{3/2}}, \end{aligned}$$

Assim, a expressão que determina o comportamento crítico assume a forma

$$0 \approx (g - g_c) \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{\left(\mu_c - \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{2}\right)^{1/2}} - (\mu - \mu_c) g_c \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{\left(\mu_c - \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{2}\right)^{3/2}}, \quad (4.68)$$

com  $H = 0$ .

Agora vamos expandir os termos das integrais acima em torno do ponto  $\mathbf{q} = \mathbf{q}_c$ .

**Caso  $p < 1/4$**

Nessa região, o primeiro termo assume a forma

$$\begin{aligned} I_1 &\approx \frac{(g - g_c)}{2} \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{(J_1 \mathbf{q}^2 + 4 J_2 q_d^2)^{1/2}} \\ &= (g - g_c) \int_0^\infty dx x^{-1/2} \int d^d \mathbf{q} \exp[-x (J_1 \mathbf{q}^2 + 4 J_2 q_d^2)]. \end{aligned} \quad (4.69)$$

A partir da equação (4.39) com  $\mu = \hat{J}(\mathbf{q}_c)/2$ , podemos dizer que a integral  $I_1$  converge para  $d > 1$ . O segundo termo,

$$\begin{aligned} I_2 &\approx g_c (\mu - \mu_c) \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{(J_1 \mathbf{q}^2 + 4 J_2 q_d^2)^{3/2}} \\ &= g_c (\mu - \mu_c) \int_0^\infty dx x^{1/2} \int d^d \mathbf{q} \exp[-x (J_1 \mathbf{q}^2 + 4 J_2 q_d^2)]. \end{aligned} \quad (4.70)$$

converge para  $d > 3$ . Assim, para  $d > 3$ , obtemos

$$\mu - \mu_c \sim \tau, \quad (4.71)$$

definindo  $\tau = (g - g_c)/g_c$  como a distância do ponto crítico. O comportamento crítico

correspondente às dimensões  $d = 3$  e  $d = 2$  é dado por

$$(\mu - \mu_c) \sim \frac{\tau}{\ln \tau}, \quad \text{para } d = 3, \quad (4.72)$$

e

$$(\mu - \mu_c) \sim \tau^2, \quad \text{para } d = 2, \quad (4.73)$$

**Caso  $p > 1/4$**

Nesse caso, o primeiro termo também converge para  $d > 1$ ,

$$I_1 \approx \frac{(g - g_c)}{2} \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{\left[ J_1(q_1^2 + \dots + d_{d-1}^2) + J_1 \left( 4p - \frac{1}{4p} \right) (q_d \pm \arccos 1/(4p)^2) \right]^{1/2}}.$$

O segundo termo converge para  $d > 3$ ,

$$I_2 \approx g_c \frac{(\mu - \mu_c)}{2} \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{\left[ J_1(q_1^2 + \dots + d_{d-1}^2) + J_1 \left( 4p - \frac{1}{4p} \right) (q_d \pm \arccos 1/(4p)^2) \right]^{3/2}}.$$

As convergências das expressões acima já foram obtidas na análise de convergência. Portanto, o comportamento crítico é dado por

$$\mu - \mu_c \sim \tau, \quad \text{para } d > 3, \quad (4.74)$$

$$(\mu - \mu_c) \sim \frac{\tau}{\ln \tau}, \quad \text{para } d = 3 \quad (4.75)$$

e

$$(\mu - \mu_c) \sim \tau^2 \quad \text{para } d = 2. \quad (4.76)$$

A partir dos resultados acima, concluímos que os expoentes críticos para  $p < 1/4$  e para  $p > 1/4$  são equivalentes tanto para  $T \neq 0$  (transição clássica) quanto para  $T = 0$  (transição

quântica). A única diferença corresponde à dimensão crítica do problema quando admitimos  $T \neq 0$  ou  $T = 0$ . Em resumo, para  $T \neq 0$ , temos

$$(\mu - \mu_c) \sim \begin{cases} \tau, & \text{para } d > 4 \\ \frac{\tau}{\ln \tau}, & \text{para } d = 4 \\ \tau^2, & \text{para } d = 3 \end{cases}, \quad (4.77)$$

com  $\tau = (T - T_c)/T_c$ . Para  $T = 0$ , temos

$$(\mu - \mu_c) \sim \begin{cases} \tau, & \text{para } d > 3 \\ \frac{\tau}{\ln \tau}, & \text{para } d = 3 \\ \tau^2, & \text{para } d = 2 \end{cases}, \quad (4.78)$$

com  $\tau = (g - g_c)/g_c$ . As equações (4.77) e (4.78) definem um expoente crítico dinâmico  $z = 1$ , veja o apêndice D.

A partir das equações (4.77) e (4.78) podemos obter todos os expoentes clássicos e quânticos. Por exemplo, se nós definirmos a “magnetização” como  $m = \partial f / \partial H$ , podemos ver que a suscetibilidade é proporcional ao inverso de  $\mu$ . Logo, o expoente crítico, clássico e quântico, associado a suscetibilidade é obtido diretamente das equações (4.77) e (4.78), respectivamente. Podemos também obter o expoente crítico  $\beta$  a partir de uma equação de estado para a magnetização em função da distância do ponto crítico. Além disso, dado dois expoentes críticos é possível obter todos os outros pelas leis de escala. A tabela 4.1 apresenta alguns expoentes críticos associados ao modelo com interações competitivas entre primeiros e segundo vizinhos ao longo de uma direção. Os resultados obtidos, para  $T \neq 0$  e  $T = 0$ , correspondem aos resultados obtidos do modelo esférico com interações de curto alcance [16] e também com os resultados obtidos da versão clássica do modelo esférico com esse mesmo tipo de competição [22]. Para  $d > 4$  os expoentes críticos são expoentes típicos de campo médio.

No ponto de Lifshitz  $p = 1/4$ , o problema apresenta algumas peculiaridades e precisa

Expoente	$T \neq 0$ (clássico) $d=3$	$T=0$ (quântico) $d=2$	$T \neq 0, T=0$ $d > 4$
$\alpha$	-1	-1	0
$\beta$	1/2	1/2	1/2
$\gamma$	2	2	1

Tabela 4.1: Expoentes críticos do modelo esférico quântico com competição para  $p < 1/4$  e  $p > 1/4$ .

ser analisado de forma cautelosa. Nesse ponto,  $q_c$  também é igual a zero, porém a derivada segunda da energia de interação,  $\hat{J}(\mathbf{q})$ , em torno do ponto  $\mathbf{q} = \mathbf{q}_c$  também é nula na direção em que há competição. Nesse caso, devemos levar em conta o termo quártico na expansão de  $\hat{J}(\mathbf{q})$  em torno do ponto crítico.

#### 4.2.5 Comportamento Crítico para $p = 1/4$

O comportamento crítico, clássico e quântico, também é analisado separadamente.

Para  $T \neq 0$

Quando  $T \neq 0$ , o comportamento crítico é dado pela expressão

$$0 \approx \frac{(T - T_c)}{2} \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{J_1(q_1^2 + \dots + d_{d-1}^2) - J_1(q_1^4 + \dots + d_{d-1}^4) + J_1 q^4} - T_c(\mu - \mu_c) \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{[J_1(q_1^2 + \dots + d_{d-1}^2) - J_1(q_1^4 + \dots + d_{d-1}^4) + J_1 q^4]^2}. \quad (4.79)$$

Vamos calcular as integrais separadamente. Usando a identidade (4.34), a primeira integral da equação (4.79) é escrita na forma

$$\begin{aligned} I_1 &= \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{J_1(q_1^2 + \dots + d_{d-1}^2) - J_1(q_1^4 + \dots + d_{d-1}^4) + J_1 q^4} \\ &= \int_0^\infty dx \left[ \int_{-\pi}^\pi \exp(-x J_1(q^2 - q^4)) \right]^{d-1} \int_{-\pi}^\pi dq_d \exp(-x J_1 q_d^4). \end{aligned} \quad (4.80)$$

Nesse ponto, usamos o resultado gaussiano, equação (1.5), tal que

$$\begin{aligned}
I_1 &= \int_0^\infty dx \left[ \int_{-\pi}^\pi dq \int_{-\infty}^\infty dy e^{-y^2 + 2\sqrt{\frac{J_1 x}{2}} q^2 y - J_1 x q^2} \right]^{d-1} \frac{4\Gamma[\frac{5}{4}] - \Gamma[\frac{1}{4}, J_1 \pi^4 x]}{2(J_1 x)^{1/4}} \\
&= \int_0^\infty dx \left[ \int_{-\infty}^\infty dy e^{-y^2} \int_{-\pi}^\pi e^{-\left(J_1 x - 2\sqrt{\frac{J_1 x}{2}} y\right) q^2} \right]^{d-1} \frac{4\Gamma[\frac{5}{4}] - \Gamma[\frac{1}{4}, J_1 \pi^4 x]}{2(J_1 x)^{1/4}} \\
&= \int_0^\infty dx \left[ \int_{-\infty}^\infty dy e^{-y^2} \left( \frac{\pi}{J_1 x - 2\sqrt{2J_1 x y}} \right)^{1/2} \text{Erf} \left( \pi \left( J_1 x - 2\sqrt{2J_1 x y} \right) \right) \right]^{d-1} \\
&\times \frac{4\Gamma[\frac{5}{4}] - \Gamma[\frac{1}{4}, J_1 \pi^4 x]}{2(J_1 x)^{1/4}}.
\end{aligned}$$

Analisando o comportamento assintótico da equação acima, verificamos que no limite  $x \rightarrow 0$  a integral converge sempre. No limite  $x \rightarrow \infty$ ,

$$I_1 \sim \int dx x^{\frac{1}{4} - \frac{d}{2}}, \quad (4.81)$$

a integral converge para  $d > 2, 5$ .

A segunda integral da equação (4.79) é dada por

$$\begin{aligned}
I_2 &= \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{[J_1(q_1^2 + \dots + d_{d-1}^2) - J_1(q_1^4 + \dots + d_{d-1}^4) + J_1 q^4]^2} \\
&= \int_0^\infty dx x \left[ \int_{-\pi}^\pi dq \int_{-\infty}^\infty dy e^{-y^2 + 2\sqrt{\frac{J_1 x}{2}} q^2 y - J_1 x q^2} \right]^{d-1} \frac{4\Gamma[\frac{5}{4}] - \Gamma[\frac{1}{4}, J_1 \pi^4 x]}{2(J_1 x)^{1/4}} \\
&= \int_0^\infty dx x \left[ \int_{-\infty}^\infty dy e^{-y^2} \left( \frac{\pi}{J_1 x - 2\sqrt{2J_1 x y}} \right)^{1/2} \text{Erf} \left( \pi \left( J_1 x - 2\sqrt{2J_1 x y} \right) \right) \right]^{d-1} \\
&\times \frac{4\Gamma[\frac{5}{4}] - \Gamma[\frac{1}{4}, J_1 \pi^4 x]}{2(J_1 x)^{1/4}}.
\end{aligned}$$

Analisando o comportamento assintótico, a integral  $I_2$  converge sempre no limite  $x \rightarrow 0$ . No limite  $x \rightarrow \infty$ ,

$$I_2 \sim \int dx x^{\frac{5}{4} - \frac{d}{2}}, \quad (4.82)$$

a integral converge para  $d > 4, 5$ . Dessa forma, o comportamento crítico, dado pela expressão



(4.79), para  $d > 4, 5$  é

$$(\mu - \mu_c) \sim \tau, \quad (4.83)$$

sendo  $\tau = (T - T_c)/T_c$  a distância do ponto crítico. Fazemos uma mudança de variável na integral acima,  $x = 1/a^2$ , e analisamos o comportamento crítico nas dimensões entre  $d = 9/2$  e  $d = 5/2$ . De tal modo que, devemos analisar a convergência da integral

$$\int dx x^{\frac{5}{4} - \frac{d}{2}} \sim \int da a^{-\frac{11}{2} + d}, \quad (4.84)$$

no limite  $a \rightarrow 0$ . Finalmente, para  $T \neq 0$ , obtemos

$$(\mu - \mu_c) \sim \begin{cases} \tau, & d > 9/2 \\ \tau/(\ln \tau), & d = 9/2 \\ \tau^{3/2}, & d = 4 \\ \tau^2, & d = 7/2 \\ \tau^{5/2}, & d = 3 \end{cases} . \quad (4.85)$$

As dimensões críticas clássicas obtidas a partir do modelo esférico quântico com competição, com  $T \neq 0$ , estão em concordância com o trabalho apresentado por Hase e Salinas em um estudo sobre a dinâmica do modelo esférico médio com esse mesmo tipo de competição [37]. Além disso, os resultados fracionários são bem conhecidos desde as primeiras aplicações de grupo de renormalização [38].

Para  $T = 0$

Quando  $T = 0$ , o comportamento crítico é dado por

$$0 \approx (g - g_c) \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{[J_1(q_1^2 + \dots + d_{d-1}^2) - J_1(q_1^4 + \dots + d_{d-1}^4) + J_1 q^4]^{1/2}} - (\mu - \mu_c) g_c \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{[J_1(q_1^2 + \dots + d_{d-1}^2) - J_1(q_1^4 + \dots + d_{d-1}^4) + J_1 q^4]^{3/2}}. \quad (4.86)$$

Vamos calcular as integrais separadamente. Usando a identidade (4.34), a primeira integral é reescrita como

$$\begin{aligned} I_1 &= \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{[J_1(q_1^2 + \dots + d_{d-1}^2) - J_1(q_1^4 + \dots + d_{d-1}^4) + J_1 q^4]^{1/2}} \\ &= \int_0^\infty dx x^{-1/2} \int d^d \vec{q} \exp \{ -x J_1 [(q_1^2 + \dots + d_{d-1}^2) - (q_1^4 + \dots + d_{d-1}^4) + q^4] \} \\ &= \int_0^\infty dx x^{-1/2} \left[ \int_{-\pi}^\pi \exp(-x J_1 (q^2 - q^4)) \right]^{d-1} \int_{-\pi}^\pi dq_d \exp(-x J_1 q_d^4). \end{aligned} \quad (4.87)$$

Como no caso  $T \neq 0$ , obtemos

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^\infty dx x^{-1/2} \left[ \int_{-\infty}^\infty dy e^{-y^2} \left( \frac{\pi}{J_1 x - 2\sqrt{2J_1 x y}} \right)^{1/2} \text{Erf} \left( \pi \left( J_1 x - 2\sqrt{2J_1 x y} \right) \right) \right]^{d-1} \\ &\times \frac{4\Gamma[\frac{5}{4}] - \Gamma[\frac{1}{4}, J_1 \pi^4 x]}{2(J_1 x)^{1/4}}. \end{aligned}$$

Podemos calcular o comportamento assintótico da equação acima. No limite  $x \rightarrow 0$ , a integral converge sempre. Já no limite  $x \rightarrow \infty$ ,

$$I_1 \sim \int dx x^{-\frac{1}{4} - \frac{d}{2}}, \quad (4.88)$$

a integral converge para  $d > 1,5$ . A segunda integral fica

$$\begin{aligned}
I_2 &= \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{[J_1(q_1^2 + \dots + d_{d-1}^2) - J_1(q_1^4 + \dots + d_{d-1}^4) + J_1 q^4]^{3/2}} \\
&= \int_0^\infty dx x^{1/2} \left[ \int_{-\pi}^\pi dq \int_{-\infty}^\infty dy e^{-y^2 + 2\sqrt{\frac{J_1 x}{2}} q^2 y - J_1 x q^2} \right]^{d-1} \frac{4\Gamma[\frac{5}{4}] - \Gamma[\frac{1}{4}, J_1 \pi^4 x]}{2(J_1 x)^{1/4}} \\
&= \int_0^\infty dx x^{1/2} \left[ \int_{-\infty}^\infty dy e^{-y^2} \left( \frac{\pi}{J_1 x - 2\sqrt{2J_1 x y}} \right)^{1/2} \text{Erf} \left( \pi \left( J_1 x - 2\sqrt{2J_1 x y} \right) \right) \right]^{d-1} \\
&\times \frac{4\Gamma[\frac{5}{4}] - \Gamma[\frac{1}{4}, J_1 \pi^4 x]}{2(J_1 x)^{1/4}}.
\end{aligned}$$

Analisando o comportamento assintótico, a integral  $I_2$  converge sempre no limite  $x \rightarrow 0$ . No limite  $x \rightarrow \infty$ ,

$$\int dx x^{\frac{3}{4} - \frac{d}{2}}, \quad (4.89)$$

a integral converge para  $d > 3,5$ . Dessa forma, o comportamento crítico, equação (4.86), para  $d > 3,5$  é dado por

$$(\mu - \mu_c) \sim \tau, \quad (4.90)$$

sendo  $\tau = (g - g_c)/g_c$  a distância do ponto crítico. Fazendo a mesma mudança de variável na integral acima,  $x \equiv 1/(a^2)$ ,

$$\int dx x^{\frac{3}{4} - \frac{d}{2}} \sim \int da a^{-\frac{9}{2} + d}, \quad (4.91)$$

calculamos o comportamento crítico nas dimensões entre  $d = 7/2$  e  $d = 3/2$  no limite  $a \rightarrow 0$ .

Portanto, para  $T = 0$ , obtemos

$$(\mu - \mu_c) \sim \begin{cases} \tau, & d > 7/2 \\ \tau/(\ln \tau), & d = 7/2 \\ \tau^{3/2}, & d = 3 \\ \tau^2, & d = 5/2 \\ \tau^{5/2}, & d = 2 \end{cases}. \quad (4.92)$$

A partir das equações (4.85) e (4.92), podemos calcular todos os expoentes críticos, clássicos e quânticos, respectivamente. A tabela 4.2 exhibe alguns expoentes críticos para  $p = 1/4$ .

Expoente	$T \neq 0$ (clássico) $d=3$	$T=0$ (quântico) $d=2$	$T \neq 0, T=0$ $d > 4$
$\alpha$	$-3/2$	$-3/2$	0
$\beta$	$1/2$	$1/2$	$1/2$
$\gamma$	$5/2$	$5/2$	1

Tabela 4.2: Expoentes críticos do modelo esférico quântico com competição para  $p = 1/4$ .

Assim como o modelo esférico de campo médio, o modelo esférico quântico com competição é exatamente solúvel. É possível descrever as propriedades do modelo próximo às transições de fases quânticas ( $g = g_c$  e  $T = 0$ ) e clássicas ( $g = 0$  e  $T = T_c$ ). Mesmo o modelo sendo descrito quânticamente, quando admitimos temperatura finita o sistema apresenta comportamento crítico clássico. As transições de fase quânticas ocorrem a temperatura nula. Elas são causadas pelas flutuações quânticas que são consequências do princípio de incerteza de Heisenberg. Apesar do modelo com competição recuperar os resultados do modelo esférico quântico com interações de curto alcance para  $p \neq 1/4$  [16], o sistema apresenta um comportamento crítico diferente no ponto de Lifshitz,  $p = 1/4$ .

### 4.3 Competição em $m \leq d$ direções

Agora, podemos supor que o modelo esférico quântico apresenta interações ferromagnéticas,  $J_1 > 0$ , entre primeiros vizinhos ao longo de todas as direções da rede hipercúbica e interações antiferromagnéticas,  $J_2 < 0$ , entre segundos vizinhos ao longo de  $m \leq d$  direções. A transformada de Fourier da energia de interação,  $J_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}$ , é dada por

$$\hat{J}(\mathbf{q}) = 2J_1 \sum_{i=1}^d \cos q_i + 2J_2 \sum_{i=1}^m \cos 2q_i \quad (4.93)$$

e o valor de  $\mathbf{q}$  que maximiza essa expressão é dado pelo vetor

$$\mathbf{q}_c = (\underbrace{0, \dots, 0}_{d-m}, \underbrace{q_c, \dots, q_c}_m), \quad (4.94)$$

com

$$q_c = \begin{cases} 0, & \text{para } p \leq \frac{1}{4} \\ \pm \arccos\left(\frac{1}{4p}\right), & \text{para } p > \frac{1}{4} \end{cases}, \quad (4.95)$$

em que  $p \equiv -J_2/J_1$ .

Como a energia de interação depende apenas das distâncias relativas entre os sítios, o comportamento crítico também é determinado pela expressão (4.28). Para  $p \neq 1/4$  a convergência da expressão que determina o vínculo esférico independe do valor de  $m$ . Isso significa que ela converge sempre para  $d > 2$  quando admitimos  $T \neq 0$  e converge sempre para  $d > 1$  quando admitimos  $T = 0$ . Portanto, dado um  $m$  qualquer,  $m \leq d$ , o comportamento crítico do sistema é equivalente ao caso  $m = 1$  (competição em apenas uma direção). No entanto, no ponto  $p = 1/4$  a convergência do vínculo depende explicitamente do valor de  $m$  e o comportamento crítico será apresentado abaixo para  $T \neq 0$  e  $T = 0$ .

(i) Para uma dada temperatura finita,  $T \neq 0$ , o comportamento crítico é determinado pela expressão

$$0 \approx \frac{(T - T_c)}{2} \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{\mu_c - \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{2}} - (\mu - \mu_c) T_c \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{\left(\mu_c - \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{2}\right)^2}. \quad (4.96)$$

Seguindo os cálculos do modelo com  $m = 1$ , verificamos que a primeira integral converge para  $d > (m + 4)/2$  e a segunda converge para  $d > (m + 8)/2$ , conduzindo às seguintes relações

para o comportamento crítico,

$$(\mu - \mu_c) \sim \begin{cases} \tau, & d > \frac{m+8}{2} \\ \frac{\tau}{\ln \tau}, & d = \frac{m+8}{2} \\ \tau^{3/2}, & d = \frac{m+7}{2} \\ \tau^2, & d = \frac{m+6}{2} \\ \tau^{5/2}, & d = \frac{m+5}{2} \end{cases} . \quad (4.97)$$

É claro que, para  $m = 1$ , recuperamos o resultado (4.85).

(ii) Para  $T = 0$ , o comportamento crítico é determinado pela expressão

$$0 \approx \frac{(g - g_c)}{2} \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{\left(\mu_c - \frac{j(\mathbf{q})}{2}\right)^{1/2}} - (\mu - \mu_c) T_c \int d^d \mathbf{q} \frac{1}{\left(\mu_c - \frac{j(\mathbf{q})}{2}\right)^{3/2}}. \quad (4.98)$$

A primeira integral converge para  $d > (m + 2)/2$ , e a segunda converge para  $d > (m + 6)/2$ .

Nesse caso, obtemos

$$(\mu - \mu_c) \sim \begin{cases} \tau, & d > \frac{m+6}{2} \\ \frac{\tau}{\ln \tau}, & d = \frac{m+6}{2} \\ \tau^{3/2}, & d = \frac{m+5}{2} \\ \tau^2, & d = \frac{m+4}{2} \\ \tau^{5/2}, & d = \frac{m+3}{2} \end{cases} , \quad (4.99)$$

recuperando o resultado (4.92) quando tomamos  $m = 1$ .

Em particular, quando  $m < d$  as dimensões críticas clássicas ( $T \neq 0$ ) e quânticas ( $T = 0$ ) diferem de um, pois o expoente crítico dinâmico é igual a um,  $z = 1$ . Quando  $m = d$  as dimensões críticas diferem de dois, pois o expoente crítico dinâmico associado ao modelo com competição em todas as direções é igual a dois,  $z = 2$ . O expoente crítico dinâmico é discutido com mais detalhe no apêndice D.

## 4.4 Diagramas de Fases

Os diagramas de fases clássico e quântico são obtidos a partir da expressão do vínculo no ponto crítico com campo nulo. A análise dos diagramas será feita separadamente:

(i) No caso clássico, ou seja, temperatura finita ( $T \neq 0$ ), a expressão do vínculo no ponto crítico é dada por (4.45). Assim, no limite termodinâmico, é possível obter uma expressão para a temperatura crítica em função dos parâmetro  $p$  e  $m$ ,

$$\frac{k_B T_c}{2J_1} = \frac{1}{I(p, d, m)}, \quad (4.100)$$

tal que

$$I(p, d, m) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d q \frac{1}{\sum_{j=1}^d (1 - \cos q_j) - p \sum_{j=1}^m (1 - \cos 2q_j)} \quad (4.101)$$

para  $p \leq 1/4$  e

$$I(p, d, m) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d q \frac{1}{\sum_{j=1}^d (1 - \cos q_j) - p \sum_{j=1}^m \left( \frac{1}{p} - \frac{1}{8p^2} - 1 - \cos 2q_j \right)} \quad (4.102)$$

para  $p > 1/4$ . As integrais das equações (4.101) e (4.102) divergem para  $d = 1, 2$ , indicando que  $T_c = 0$  para todos os valores de  $m$ . Para  $d \geq 3$  verificamos que  $T_c > 0$  para todos os valores de  $p$  e  $m$ . Calculando a derivada da temperatura crítica em relação ao parâmetro  $p$ , para  $p < 1/4$  e  $p > 1/4$ , mostramos que existe uma tangente comum no ponto de Lifshitz,  $p = 1/4$ . Para exemplificar, consideramos  $d = 3$  e  $m = 1$ , tal que

$$\left. \frac{\partial}{\partial p} \left( \frac{k_B T_c}{2J_1} \right) \right|_{p=1/4} = - \frac{1}{[I(\frac{1}{4}, 3, 1)]^2} \tilde{I}, \quad (4.103)$$

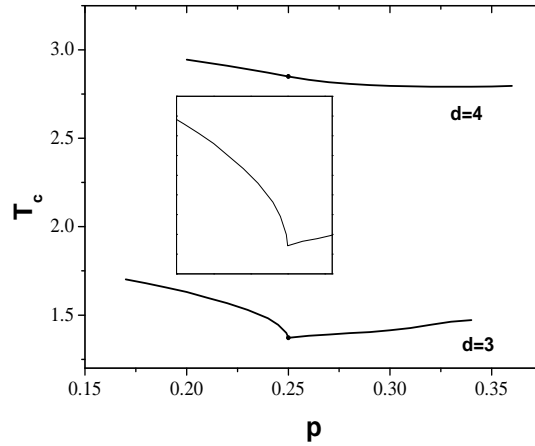


Figura 4.1: Diagrama de fases  $T - p$ , para  $d = 3$  e  $d = 4$ , próximo do ponto de Lifshitz ( $p = 1/4$ ), com  $m = 1$ . A linha crítica separa a fase ordenada e a fase desordenada. Ao longo da linha crítica,  $\mathbf{q}_c = 0$  para  $p \leq 1/4$  e  $\mathbf{q}_c \neq 0$  para  $p > 1/4$ . A inserção mostra uma ampliação da fronteira perto do ponto de Lifshitz em três dimensões.

com

$$\tilde{I} = \frac{1}{4(2\pi)^3} \int d^3q \frac{1 - \cos 2q_1}{\left(\frac{11}{4} - \cos q_1 - \cos q_2 - \cos q_3 + \cos 2q_1\right)^2}. \quad (4.104)$$

Em um caso geral, não é difícil mostrar que existe uma tangente comum no ponto de Lifshitz com uma singularidade nas dimensões  $3 \leq d \leq (m + 6)/2$ . A figura (4.1) ilustra a linha crítica  $T_c = T_c(p)$  obtida numericamente para  $d = 3$  e  $d = 4$ , com  $m = 1$ .

(ii) No caso quântico,  $T = 0$ , a expressão do vínculo no ponto crítico é definida na equação (4.66). No limite termodinâmico, obtemos uma expressão para o parâmetro quântico no ponto crítico,  $g_c$ , em função dos parâmetro  $p$  e  $m$ ,

$$\frac{g_c}{2J_1} = \left[ \frac{2}{I_Q(p, d, m)} \right]^2, \quad (4.105)$$

tal que

$$I_Q(p, d, m) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d q \frac{1}{\left[ \sum_{j=1}^d (1 - \cos q_j) - p \sum_{j=1}^m (1 - \cos 2q_j) \right]^{1/2}} \quad (4.106)$$



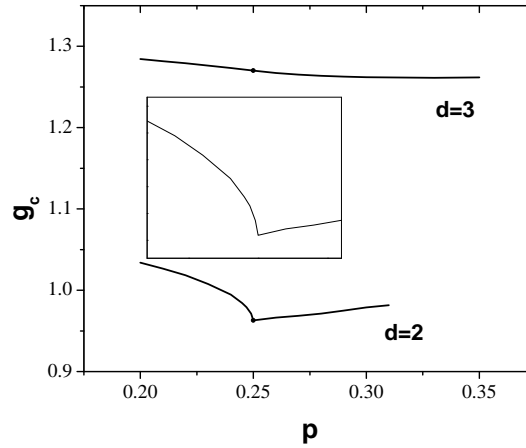


Figura 4.2: Diagrama de fases  $g_c - p$ , para  $d = 2$  e  $d = 3$ , próximo do ponto de Lifshitz ( $p = 1/4$ ), com  $m = 1$ . A linha crítica separa a fase ordenada e a fase desordenada. Ao longo da linha crítica,  $\mathbf{q}_c = 0$  para  $p \leq 1/4$  e  $\mathbf{q}_c \neq 0$  para  $p > 1/4$ . A inserção mostra uma ampliação da fronteira perto do ponto de Lifshitz em duas dimensões.

para  $p \leq 1/4$  e

$$I_Q(p, d, m) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d q \frac{1}{\left[ \sum_{j=1}^d (1 - \cos q_j) - p \sum_{j=1}^m \left( \frac{1}{p} - \frac{1}{8p^2} - 1 - \cos 2q_j \right) \right]^{1/2}} \quad (4.107)$$

para  $p > 1/4$ . A partir de uma análise de convergência semelhante ao caso clássico, é possível mostrar que existe uma transição de fase quântica para  $d \geq 2$ , independente do valor de  $p$  e  $m$ . Em particular, existe uma tangente comum  $\partial g_c / \partial p$  no ponto de Lifshitz, com uma singularidade nas dimensões  $2 \leq d \leq (m + 4)/2$ . A figura (4.2) ilustra a linha crítica no plano  $g_c - p$  obtida numericamente para  $d = 2$  e  $d = 3$ , com  $m = 1$ .

## 4.5 Correlações spin-spin

Introduzindo termos de fontes apropriados na Hamiltoniana quântica,

$$\mathcal{H} = \frac{g}{2} \sum_{\mathbf{r}} p_{\mathbf{r}}^2 - \frac{1}{2} \sum_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} J_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \sigma_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}'} - \sum_{\mathbf{r}} H_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}} + \mu \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}}^2, \quad (4.108)$$

podemos obter uma expressão para a correlação de dois pontos. Nesse caso, a função de partição é dada por

$$Z_N(\beta, H, \mu) = \prod_{\mathbf{q}} \exp \left[ \frac{\beta N \hat{H}(\mathbf{q}) \hat{H}(-\mathbf{q})}{4 \left( \mu - \frac{\hat{J}(\mathbf{q})}{2} \right)} \right] \left[ 2 \sinh \frac{1}{2} \beta w(\mathbf{q}) \right]^{-1}, \quad (4.109)$$

e a função de correlação no espaço de Fourier é definida como

$$\langle \sigma_{\mathbf{q}} \sigma_{-\mathbf{q}} \rangle_N = \frac{4}{(\beta N)^2} \frac{\delta^2 \ln Z}{\delta \hat{H}(\mathbf{q}) \delta \hat{H}(-\mathbf{q})} \Big|_{\hat{H}(\mathbf{q}) = \hat{H}(-\mathbf{q}) = 0} = \frac{2g}{\beta N} \frac{1}{[w(\mathbf{q})]^2}, \quad (4.110)$$

em que  $\hat{H}(\mathbf{q})$  é a transformada de Fourier da variável  $H_{\mathbf{r}}$ . A partir da expressão acima, obtemos a correlação no espaço real,

$$\langle \sigma_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}+\mathbf{h}} \rangle_N = \frac{1}{\beta N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\exp(i\mathbf{q}\mathbf{h})}{2\mu - \hat{J}(\mathbf{q})}. \quad (4.111)$$

Como discutido por Pisani e colaboradores [39], a análise de  $\langle \sigma_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}+\mathbf{h}} \rangle$ , para  $d \geq 3$ , abaixo da crítica temperatura, leva à introdução de um parâmetro de ordem modulado, com oscilações características para  $p > 1/4$ . Existem também alguns estudos sobre a relação entre as interações competitivas e o decaimento das correlações [40, 41].

Nós mostramos agora que essas oscilações da correlação de pares em termos da distância podem ser verificadas na solução unidimensional. No limite termodinâmico, a equação (4.111)

conduz a

$$\langle \sigma_r \sigma_{r+h} \rangle = \frac{1}{2\pi\beta} \int_{-\pi}^{\pi} dq \frac{\exp(iqh)}{[\mu - \cos q + p \cos 2q]}, \quad (4.112)$$

com o vínculo esférico

$$1 = \frac{1}{2\pi\beta} \int_{-\pi}^{\pi} dq \frac{1}{[\mu - \cos q + p \cos 2q]}, \quad (4.113)$$

em que  $p > 0$ ,  $\mu$  e  $\beta$  são escritos em unidades de  $J_1 > 0$ , e  $\mu > \mu_c$ . No caso unidimensional,  $\mu > (1-p)$  para  $p < 1/4$  e  $\mu > [1/(8p) + p]$  para  $p > 1/4$ . De uma forma geral, a equação (4.112) pode ser escrita como

$$\langle S_r, S_{r+h} \rangle = \frac{1}{\pi\beta ip} \oint_C dw \frac{w^{h+1}}{w^4 - \frac{1}{p}w^3 + \frac{2\mu}{p}w^2 - \frac{1}{p}w + 1}, \quad (4.114)$$

em que  $C$  representa um círculo unitário e  $h > 0$ . O polinômio de quarta ordem é facilmente fatorizado, com duas raízes,  $w_1$  e  $w_2$ , dentro do círculo unitário. Depois de algumas manipulações algébricas, obtemos

$$\langle \sigma_r \sigma_{r+h} \rangle = \frac{\cos[h\theta_1 + (\theta_1 - \alpha)]}{\cos(\theta_1 - \alpha)} \exp[h \ln |w_1|], \quad (4.115)$$

em que

$$w_1 = |w_1| \exp(i\theta_1) = \frac{1}{4p}(1 - A - 2B), \quad (4.116)$$

e

$$A = \sqrt{8p^2 - 8p\mu + 1}; \quad B = \sqrt{\frac{1}{2} - 2p(p - \mu) - \frac{1}{2}A}, \quad (4.117)$$

de modo que  $|w_1| < 1$ , conduz ao conhecido decaimento exponencial. A partir da condição esférica, (4.113), eliminamos o potencial químico,  $\mu$ , e escrevemos a correlação em termos dos parâmetros  $T$  e  $p$ . Em particular, as oscilações são suprimidas por  $\theta_1 = 0$ , que é equivalente a

$$\frac{k_B T}{2J_1} = \frac{1}{8p} - 2p, \quad (4.118)$$

tal que  $T = 0$  no ponto  $p = 1/4$ . Na figura (4.5), nós esboçamos essa fronteira e indicamos a

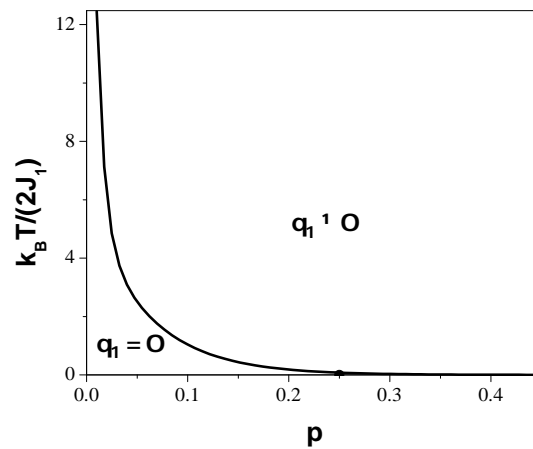


Figura 4.3: Regiões do plano  $T - p$  do modelo unidimensional com um simples decaimento exponencial ( $\theta_1 = 0$ ) e com um decaimento exponencial com um certa oscilação ( $\theta_1 \neq 0$ ) da correlação de depois pontos.

região em que a correlação decai exponencialmente com um certa oscilação ( $\theta_1 \neq 0$ ) no plano  $T - p$ . Um comportamento similar foi encontrado por Stephenson [42] no cálculo para uma cadeia ANNNI.

# Capítulo 5

## Modelo Esférico Quântico com Desordem

No modelo de Sherrington-Kirkpatrick, que é uma espécie de paradigma para o estudo dos vidros de spins, as variáveis de spin são do tipo Ising,  $\sigma_i = \pm 1$ , e as energias de interação  $J_{ij}$  são variáveis aleatórias independentes, idênticas e identicamente distribuídas, com uma distribuição de probabilidades Gaussiana. Esse modelo é resolvido usando o método das réplicas [28] e exibe uma fase paramagnética, uma fase ferromagnética, além de uma fase de vidro de spin. Em 1979, Parisi descreveu a fase de vidro de spin do modelo Sherrington-Kirkpatrick (SK) a partir de um número infinito de quebras de simetria entre réplicas [43].

No análogo esférico do modelo de Sherrington-Kirkpatrick, as energias de interação também são variáveis aleatórias independentes, idênticas e identicamente distribuídas, com distribuição de probabilidades Gaussiana, mas as variáveis de spin são contínuas,  $-\infty < \sigma_i < \infty$ , e estão sujeitas ao vínculo esférico,

$$\sum_{i=1}^N \sigma_i^2 = N, \quad (5.1)$$

em que  $N$  é o número total de spins da rede. Nesse caso, é possível descrever a fase de vidro de spin com a hipótese de “simetria de réplicas”, de acordo com o trabalho de Kosterlitz e

colaboradores [44], que também utilizaram propriedades de matrizes aleatórias.

Apesar do modelo esférico de vidro de spin ser exatamente solúvel, estamos interessados em modelos desordenados que podem ser resolvidos exatamente sem que seja necessário recorrer ao método das réplicas. Existem algumas propostas de modelo esférico clássico com desordem de sítios, do tipo Hopfield com um número finito de padrões, ou do tipo van Hemmen [25, 26], que podem ser resolvidos analiticamente usando a lei dos grandes números. Vamos então analisar a versão quântica do modelo esférico com desordem de sítios, em particular do modelo de Hopfield com um número suficientemente pequeno de padrões, ou o modelo de van Hemmen para um vidro de spin.

## 5.1 Desordem do tipo Hopfield

Antes de analisar a versão quântica do modelo esférico com desordem do tipo Hopfield vamos apresentar a solução do modelo clássico.

### 5.1.1 Modelo Clássico

Proposto no contexto de redes neurais [45], o “modelo de Hopfield” clássico pode ser formulado como um modelo esférico simples e resolvido exatamente com um número pequeno de padrões. Quando o número de padrões é da ordem de  $N$  (número de neurônios), torna-se necessário recorrer ao método das réplicas. O modelo de Hopfield, na ausência de campo externo, é dado pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{1 \leq i < j \leq N} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j, \quad (5.2)$$

em que a soma se estende sobre todos os pares de sítios, e o parâmetro de interação é definido

por

$$J_{i,j} = \frac{J_0}{N} + \frac{J}{pN} \sum_{\alpha=1}^p \xi_i^{(\alpha)} \xi_j^{(\alpha)}, \quad (5.3)$$

em que  $p$  é o número de padrões e  $\{\xi_i^{(\alpha)}\}$  é um conjunto de variáveis aleatórias, independentemente, idênticas e igualmente distribuídas, com  $\langle \xi_i^{(\alpha)} \rangle = 0$  e  $\langle \xi_i^{(\alpha)} \xi_j^{(\gamma)} \rangle = \delta_{i,j} \delta_{\alpha,\gamma}$ . Como já foi dito, para um número de padrões suficientemente pequeno,  $p < \mathcal{O}(\ln N)$ , não é necessário recorrer ao método das réplicas.

A partir das equações (5.2) e (5.3), escrevemos a função de partição da versão de Hopfield do modelo esférico médio clássico,

$$\begin{aligned} \Xi\{\xi^{(\alpha)}\} &= \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_{i=1}^N d\sigma_i \right) \exp \left[ \frac{\beta J_0}{2N} \left( \sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{\beta J}{2pN} \sum_{\alpha=1}^p \left( \sum_{i=1}^N \xi_i^{(\alpha)} \sigma_i \right)^2 + \beta H \sum_{i=1}^N \sigma_i - \beta \mu \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 \right], \end{aligned} \quad (5.4)$$

na presença de um campo externo  $H$ . Introduzindo  $p+1$  identidades gaussianas, podemos diagonalizar a forma quadrática,

$$\begin{aligned} \Xi\{\xi^{(\alpha)}\} &= \left( \frac{1}{\pi} \right)^{\frac{p+1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_{i=1}^N d\sigma_i \right) \exp \left( -\beta \mu \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 + \beta H \sum_{i=1}^N \sigma_i \right) \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2 + 2\left(\frac{\beta J_0}{2N}\right)^{1/2} x \sum_i \sigma_i} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_{\alpha=1}^p dy_{\alpha} \right) e^{-\sum_{\alpha} y_{\alpha}^2 + 2\left(\frac{\beta J}{2pN}\right)^{1/2} \sum_i \sum_{\alpha} \sigma_i \xi_i^{(\alpha)} y_{\alpha}}. \end{aligned}$$

Identificando

$$x \equiv \left( \frac{\beta J_0 N}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \bar{x} \quad \text{e} \quad y_{\alpha} \equiv \left( \frac{\beta J N}{2p} \right)^{\frac{1}{2}} \bar{y}_{\alpha}, \quad (5.5)$$

calculamos as integrais nas variáveis  $\{\sigma\}$  e obtemos a função de partição

$$\begin{aligned} \Xi\{\xi^{(\alpha)}\} &= \left( \frac{\beta J_0 N}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{\beta J N}{2\pi} \right)^{\frac{p}{2}} \left( \frac{\pi}{\beta \mu} \right)^{\frac{N}{2}} \int d\bar{x} e^{-\frac{1}{2} \beta J_0 N \bar{x}^2} \\ &\quad \times \int \left( \prod_{\alpha=1}^p d\bar{y}_{\alpha} \right) \exp \left[ -\frac{\beta J N}{2p} \sum_{\alpha} \bar{y}_{\alpha}^2 + \frac{\beta}{4\mu} \sum_{i=1}^N \left( J_0 \bar{x} + \frac{J}{p} \sum_{\alpha} \xi_i^{(\alpha)} \bar{y}_{\alpha} + H \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (5.6)$$

No limite termodinâmico, considerando  $p$  finito, podemos usar a lei dos grandes números,

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i^{(\alpha)} \rightarrow \langle \xi_i^{(\alpha)} \rangle = 0 \quad (5.7)$$

e

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i^{(\alpha)} \xi_i^{(\gamma)} \rightarrow \langle \xi_i^{(\alpha)} \xi_i^{(\gamma)} \rangle = \delta_{\alpha,\gamma}, \quad (5.8)$$

e calcular as integrais nas variáveis  $\bar{x}$  e  $\{\bar{y}_\alpha\}$  pois são todas gaussianas. Dessa forma, obtemos

$$\begin{aligned} \ln \Xi &= \frac{\beta N H^2}{4\mu \left(1 - \frac{J_0}{2\mu}\right)} + \frac{1}{2} \ln \frac{\beta J_0 N}{2\pi} + \frac{p}{2} \ln \frac{\beta J N}{2\pi p} + \frac{N}{2} \ln \frac{\pi}{\beta\mu} \\ &+ \frac{1}{2} \ln \frac{2\pi}{\beta J_0 N \left(1 - \frac{J_0}{2\mu}\right)} + \frac{p}{2} \ln \frac{2p\pi}{\beta J N \left(1 - \frac{J}{2p\mu}\right)}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Portanto, a condição do vínculo esférico clássico é dada por

$$1 = \frac{H^2}{4 \left(\mu - \frac{J_0}{2}\right)^2} + \frac{1}{2\beta\mu} + \frac{1}{\beta N 4\mu^2} \frac{J_0}{\left(1 - \frac{J_0}{2\mu}\right)} + \frac{1}{\beta N 4\mu^2} \frac{J}{\left(1 - \frac{J}{2p\mu}\right)}. \quad (5.10)$$

O comportamento crítico clássico é obtido a partir da equação (5.10) considerando campo nulo,  $H = 0$ . No limite termodinâmico obtemos dois comportamentos singulares. Quando  $N \rightarrow \infty$  e  $\mu \rightarrow J_0/2$ , temos

$$\mu = \begin{cases} J_0/2; & (\beta > 1/J_0) \\ 1/(2\beta); & (\beta < 1/J_0) \end{cases}. \quad (5.11)$$

Quando  $N \rightarrow \infty$  e  $\mu \rightarrow J/(2p)$ , temos

$$\mu = \begin{cases} J/(2p); & (\beta > p/J) \\ 1/(2\beta); & (\beta < p/J) \end{cases}. \quad (5.12)$$

Portanto, com a notação  $t \equiv 1/(\beta J)$  e  $r \equiv J_0/J$ , temos duas linhas críticas;  $t = r$  e  $t = 1/p$ ,



que se encontram em um ponto característico. Para esboçar um diagrama de fases  $t \times r$  com  $H = 0$  é conveniente definir as variáveis

$$m_N \equiv \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i \right\rangle \quad \text{e} \quad q_{N\alpha} \equiv \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \xi_i^\alpha \sigma_i \right\rangle, \quad (5.13)$$

pois, para um modelo de vidros de spins, no limite termodinâmico  $m_N \rightarrow m$  e  $q_{N\alpha} \rightarrow q_\alpha$ , (i)  $m = q_\alpha = 0$  caracteriza um fase paramagnética (desordenada), (ii)  $m = 0$  e  $q_\alpha \neq 0$  define uma fase vidro de spin (SG), (iii)  $m \neq 0$  e  $q_\alpha = 0$  define uma fase ferromagnética (ordenada), e (iv)  $m \neq 0$  e  $q_\alpha \neq 0$  define uma fase mista.

As variáveis  $m_N$  e  $q_{N\alpha}$  podem ser obtidas a partir da função de partição (5.4) adicionando termos de fontes apropriados

$$\begin{aligned} \Xi\{\xi^{(\alpha)}\} &= \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_{i=1}^N d\sigma_i \right) \exp \left[ \frac{\beta J_0}{2N} \left( \sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^2 + \beta \sum_{\alpha=1}^p \sum_{i=1}^N H^{(\alpha)} \xi_i^{(\alpha)} \sigma_i \right. \\ &\quad \left. + \frac{\beta J}{2pN} \sum_{\alpha=1}^p \left( \sum_{i=1}^N \xi_i^{(\alpha)} \sigma_i \right)^2 + \beta H \sum_{i=1}^N \sigma_i - \beta \mu \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 \right]. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Dessa forma,

$$m_N = \frac{1}{\beta N} \frac{\partial}{\partial H} \ln \Xi \quad \text{e} \quad q_{N\alpha} = \frac{1}{\beta N} \frac{\partial}{\partial H^{(\alpha)}} \ln \Xi \Big|_{H^{(\alpha)}=0}, \quad (5.15)$$

com

$$\begin{aligned} \ln \Xi &= \frac{\beta N H^2}{4\mu \left(1 - \frac{J_0}{2\mu}\right)} + \frac{\beta N \sum_{\alpha} H^{(\alpha)2}}{4\mu \left(1 - \frac{J}{2p\mu}\right)} + \frac{1}{2} \ln \frac{\beta J_0 N}{2\pi} + \frac{p}{2} \ln \frac{\beta J N}{2\pi p} + \frac{N}{2} \ln \frac{\pi}{\beta \mu} \\ &\quad + \frac{1}{2} \ln \frac{2\pi}{\beta J_0 N \left(1 - \frac{J_0}{2\mu}\right)} + \frac{p}{2} \ln \frac{2p\pi}{\beta J N \left(1 - \frac{J}{2p\mu}\right)}. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Nesse caso a expressão para o vínculo esférico é dada por

$$1 = \frac{H^2}{4 \left(\mu - \frac{J_0}{2}\right)^2} + \frac{\sum_{\alpha} H^{(\alpha)2}}{4 \left(\mu - \frac{J}{2p}\right)^2} + \frac{1}{2\beta\mu} + \frac{1}{\beta N 4\mu^2} \frac{J_0}{\left(1 - \frac{J_0}{2\mu}\right)} + \frac{1}{\beta N 4\mu^2} \frac{J}{\left(1 - \frac{J}{2p\mu}\right)}, \quad (5.17)$$

e as grandezas  $m_N$  e  $q_{N\alpha}$ , para  $N$  fixo, dadas por

$$m_N = \frac{H}{2\left(\mu - \frac{J_0}{2}\right)} \quad \text{e} \quad q_{N\alpha} = \frac{H^{(\alpha)}}{2\left(\mu - \frac{J}{2p}\right)}. \quad (5.18)$$

O diagrama de fases obtido é muito semelhante ao diagrama de um modelo de vidros de spins do tipo Sherrington-Kirkpatrick. Para  $H = 0$  e  $H^{(\alpha)} = 0$ , devemos analisar as grandezas  $m$  e  $q_\alpha$  em toda região do diagrama de fases:

(i) Na região  $t > 1/p$  e  $t > r$ , temos  $\mu = 1/(2\beta)$ . Portanto,  $m_N = q_{N\alpha} = 0$  (para todo  $\alpha$ ), caracterizando uma fase paramagnética.

(ii) Na região  $t < 1/p$  e  $r < 1/p$ , temos  $\mu = J/(2p)$ . Portanto,  $m_N = 0$  e a expressão de  $q_{N\alpha}$  pode conduzir a uma indeterminação. Nesse caso, devemos recorrer à equação que determina  $\mu$ , dada pela equação (5.17), que pode ser escrita na forma

$$1 = \sum_{\alpha=1}^p q_\alpha^2 + \frac{1}{2\beta\mu} + \frac{1}{\beta N 4\mu^2} \frac{J_0}{\left(1 - \frac{J_0}{2\mu}\right)} + \frac{1}{\beta N 4\mu^2} \frac{J}{\left(1 - \frac{J}{2p\mu}\right)}, \quad (5.19)$$

No limite termodinâmico, ainda com  $H^{(\alpha)} \neq 0$ , temos  $q_{N\alpha} \rightarrow q_\alpha$ ,

$$q_\alpha^2 = 1 - \frac{1}{2\beta\mu}. \quad (5.20)$$

Para  $H^{(\alpha)} = 0$  e  $\mu = J/(2p)$ , obtemos  $q_\alpha^2 = (1 - pt)$  para todo  $\alpha$ . Assim,  $m = 0$  e  $q_\alpha \neq 0$ , caracterizando uma fase vidros de spins. Como  $q_\alpha^2 = (1 - pt)$  independentemente do valor de  $\alpha$  ( $1 \leq \alpha \leq p$ ), dizemos que o modelo “não guarda padrões”.

(iii) Na região  $t < r$  e  $r > 1/p$ , temos  $\mu = J_0/(2)$ . Portanto,  $q_{N\alpha} = 0$  para todo  $\alpha$  e a expressão de  $m_N$  pode conduzir a uma indeterminação. Assim, devemos recorrer à equação (5.17), tal que

$$1 = m_N^2 + \frac{1}{2\beta\mu} + \frac{1}{\beta N 4\mu^2} \frac{J_0}{\left(1 - \frac{J_0}{2\mu}\right)} + \frac{1}{\beta N 4\mu^2} \frac{J}{\left(1 - \frac{J}{2p\mu}\right)}. \quad (5.21)$$

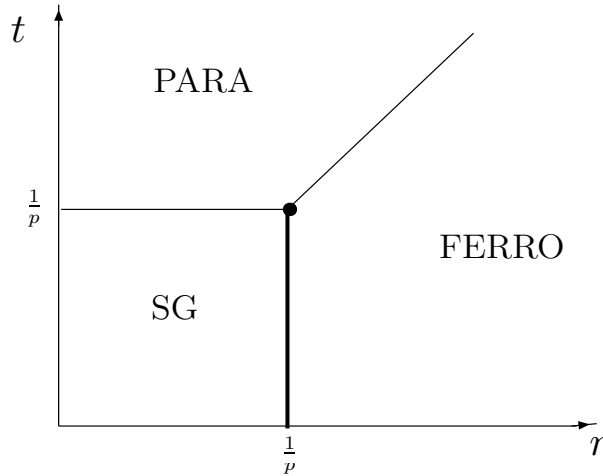


Figura 5.1: Diagrama de fases do modelo esférico clássico com desordem do tipo Hopfield com  $H = H^{(\alpha)} = 0$ , definindo  $t \equiv (\beta J)^{-1}$  e  $r \equiv J_0/J$ . As linhas mais finas representam transições de fase de segunda ordem. A linha mais grossa representa uma transição de fase de primeira ordem, visto que em  $r = J_0/J = 1/p$  a linha corresponde a uma coexistência de fases (indicando também um limite de estabilidade das fases ferromagnéticas e vidro de spin).

No limite termodinâmico, ainda com  $H \neq 0$ , temos  $m_N \rightarrow m$ ,

$$m^2 = 1 - \frac{1}{2\beta\mu}. \quad (5.22)$$

Para  $H = 0$  e  $\mu = J_0/(2)$ , obtemos  $m^2 = 1 - t/r$ . Dessa forma,  $q_\alpha = 0$  e  $m \neq 0$ , caracterizando uma fase ferromagnética.

(iv) Sobre a linha  $r = 1/p$  com  $t < 1/p$  há uma coexistência de fases com  $m \neq 0$  e  $q_\alpha \neq 0$ .

O diagrama de fases está ilustrado na figura 5.1.

No capítulo 1 mostramos a equivalência entre os ensembles a partir da solução do modelo esférico elementar nos ensembles grande canônico e canônico. Nesta seção o modelo esférico clássico com desordem do tipo Hopfield é apresentado apenas pelo formalismo grande canônico, mas a equivalência com o ensemble canônico pode ser verificada a partir da solução de um modelo análogo ao modelo de Hopfield com  $p = 2$  apresentada por Muzy e colaboradores [46]. Esse modelo análogo ao de Hopfield com  $p = 2$  será discutido com mais detalhe na seção 5.2.

### 5.1.2 Modelo Quântico

Apresentamos a versão quântica da hamiltoniana (5.2) usando a formulação de integrais de trajetória. Como já foi mencionado, existem diferentes métodos de quantizar um modelo, mas nesse caso a formulação de integrais de trajetória definida no capítulo 2 é mais apropriada. Ela simplifica o problema permitindo utilizar a lei dos grandes números para obter uma solução analítica.

O hamiltoniano efetivo do modelo esférico quântico com desordem do tipo Hopfield é dado por

$$\mathcal{H} = \frac{g}{2} \sum_{j=1}^N p_j^2 - \frac{J_0}{2N} \left( \sum_{j=1}^N \sigma_j \right)^2 - \frac{J}{2pN} \sum_{\alpha=1}^p \left( \sum_{j=1}^N \xi_j^{(\alpha)} \sigma_j \right)^2 - H \sum_{j=1}^N \sigma_j + \mu \sum_{j=1}^N \sigma_j^2. \quad (5.23)$$

Portanto, a lagrangiana associada ao hamiltoniano (5.23) assume a forma

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \frac{1}{2g} \sum_{j=1}^N \dot{x}_j^2 + \frac{J_0}{2N} \left( \sum_{j=1}^N x_j \right)^2 + \frac{J}{2pN} \sum_{\alpha=1}^p \left( \sum_{j=1}^N \xi_j^{(\alpha)} x_j \right)^2 \\ &- \mu \sum_{j=1}^N x_j^2 + H \sum_{j=1}^N x_j, \end{aligned} \quad (5.24)$$

definindo  $\sigma_j \equiv x_j$ . Dada a lagrangiana, podemos calcular a amplitude de transição

$$K = \int \mathcal{D}x e^{iS[x]}, \quad (5.25)$$

com

$$\begin{aligned} S[x] &= \int_0^T dt \left[ \frac{1}{2g} \sum_{j=1}^N \left( \frac{dx_j}{dt} \right)^2 + \frac{J_0}{2N} \left( \sum_{j=1}^N x_j(t) \right)^2 + \frac{J}{2pN} \sum_{\alpha=1}^p \left( \sum_{j=1}^N \xi_j^{(\alpha)} x_j(t) \right)^2 \right. \\ &- \left. \mu \sum_{j=1}^N x_j(t)^2 + H \sum_{j=1}^N x_j(t) \right]. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Vimos que a contribuição máxima para a amplitude de transição vem da extremização da ação,  $S[x]$ , ou seja, apenas as trajetórias próximas à trajetória clássica contribuem significativamente. Com isso, a expansão da ação em série de Taylor, em torno da trajetória clássica, resulta em

$$S[x] = S[x_{cl}] + \frac{1}{2!} \sum_{k,l=1}^N \int dt_1 dt_2 \eta_k(t_1) \eta_l(t_2) \frac{\delta S[x]}{\delta x_k(t_1) \delta x_l(t_2)}. \quad (5.27)$$

A partir da derivada funcional segunda,

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta x_l(t_2)} \frac{\delta S[x]}{\delta x_k(t_1)} &= -\frac{1}{g} \frac{d^2}{dt_1^2} \frac{\delta x_k(t_1)}{\delta x_l(t_2)} + \frac{J_0}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\delta x_j(t_1)}{\delta x_l(t_2)} \\ &+ \frac{J}{pN} \sum_{\alpha=1}^p \sum_{j=1}^N \xi_j^\alpha \xi_k^\alpha \frac{\delta x_j(t_1)}{\delta x_l(t_2)} - 2\mu \frac{\delta x_k(t_1)}{\delta x_l(t_2)}, \end{aligned} \quad (5.28)$$

calculamos o segundo termo da equação (5.27);

$$\begin{aligned} I &\equiv \frac{1}{2!} \sum_{k,l=1}^N \int dt_1 dt_2 \eta_k(t_1) \eta_l(t_2) \frac{\delta S[x]}{\delta x_k(t_1) \delta x_l(t_2)} \\ &= \frac{1}{2} \int dt_1 \left[ \frac{1}{g} \sum_{k=1}^N \dot{\eta}_k^2(t_1) + \frac{J_0}{N} \left( \sum_{k=1}^N \eta_k(t_1) \right)^2 + \frac{J}{Np} \sum_{\alpha=1}^p \left( \sum_{k=1}^N \xi_k^{(\alpha)} \eta_k(t_1) \right)^2 \right. \\ &\quad \left. - 2\mu \sum_{k=1}^N \eta_k^2(t_1) \right], \end{aligned} \quad (5.29)$$

de modo que

$$S[x] = S[x_{cl}] + \frac{1}{2!} \int dt \left[ \frac{1}{g} \sum_{k=1}^N \dot{\eta}_k^2 - 2\mu \sum_{k=1}^N \eta_k^2 + \frac{1}{N} \sum_{\alpha=0}^p J(\alpha) \left( \sum_{k=1}^N \xi_k^{(\alpha)} \eta_k \right)^2 \right], \quad (5.30)$$

com  $J(0) \equiv J_0$ ,  $\xi_k^0 \equiv 1$  e  $J(\alpha) \equiv J/p$  para  $\alpha \neq 0$ . Por simplicidade, a dependência temporal da variável  $\eta$  foi omitida. Portanto, a amplitude de transição é dada por

$$K = A e^{iS[x_{cl}]} \int \mathcal{D}\eta \exp \left\{ \frac{i}{2} \int_0^T dt \left[ \frac{1}{g} \sum_{k=1}^N \dot{\eta}_k^2 - 2\mu \sum_{k=1}^N \eta_k^2 + \sum_{\alpha=0}^p \frac{J(\alpha)}{N} \left( \sum_{k=1}^N \xi_k^{(\alpha)} \eta_k \right)^2 \right] \right\}. \quad (5.31)$$

Usando a identidade gaussiana,

$$\begin{aligned} \exp \left[ \frac{i}{2} \sum_{\alpha=0}^p \frac{J(\alpha)}{N} \int_0^T dt \left( \sum_{k=1}^N \xi_k^{(\alpha)} \eta_k \right)^2 \right] &= \prod_{\alpha=0}^p \exp \left[ \frac{i}{2} \frac{J(\alpha)}{N} \int_0^T dt \left( \sum_{k=1}^N \xi_k^{(\alpha)} \eta_k \right)^2 \right] \\ &\sim \prod_{\alpha=1}^p \int \mathcal{D}\gamma_\alpha e^{-\int_0^T dt \gamma_\alpha^2(t) + 2 \left( \frac{iJ(\alpha)}{2N} \right)^{\frac{1}{2}} \int_0^T \xi_k^{(\alpha)} \eta_k \gamma_\alpha(t)}, \end{aligned}$$

obtemos

$$\begin{aligned} K &= A' e^{iS[x_{xi}]} \int \mathcal{D}\eta \exp \left[ \frac{i}{2} \int_0^T dt \left( \frac{1}{g} \sum_{k=1}^N \dot{\eta}_k^2 - 2\mu \sum_{k=1}^N \eta_k^2 \right) \right] \\ &\times \prod_{\alpha=0}^p \int \mathcal{D}\gamma_\alpha \exp \left[ -\int_0^T dt \gamma_\alpha^2(t) + 2 \left( \frac{iJ(\alpha)}{2N} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{k=1}^N \xi_k^{(\alpha)} \int_0^T dt \eta_k \gamma_\alpha(t) \right]. \quad (5.32) \end{aligned}$$

## Método da Transformada de Fourier

Admitindo condições periódicas de contorno,  $\eta(0) = \eta(T)$ , usamos o método da transformada de Fourier,

$$\eta_k(t) = \sum_{n=1}^{N'-1} a_n^k \sin \left( \frac{n\pi}{T} t \right) \quad (5.33)$$

e

$$\gamma_\alpha(t) = \sum_{n=1}^{N'-1} b_n^{(\alpha)} \sin \left( \frac{n\pi}{T} t \right), \quad (5.34)$$

para calcular as integrais da amplitude de transição, equação (5.32). Devemos lembrar que existem  $(N' - 1)$  coeficientes  $a_n^k$  e  $(N' - 1)$  coeficientes  $b_n^{(\alpha)}$ , pois a trajetória é dividida em  $N'$  intervalos de tempo e, conseqüentemente,  $(N' - 1)$  tempos intermediários. Note que as equações (5.33) e (5.34) também satisfazem as condições de contorno. Depois de algumas

manipulações algébricas, obtemos

$$\begin{aligned}
K &= A' e^{iS[x_{cl}]} \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow \infty}} \prod_{k=1}^N \prod_{n=1}^{N'-1} \left\{ \frac{4\pi}{T \imath \left[ \frac{1}{g} \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 - 2\mu \right]} \right\}^{\frac{1}{2}} \\
&\times \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow \infty}} \prod_{\alpha=0}^p \prod_{n=1}^{N'-1} \int db_n^{(\alpha)} \exp \left[ -\frac{T}{2} b_n^{(\alpha)2} \right] \\
&\times \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow \infty}} \prod_{n=1}^{N'-1} \exp \left\{ -\frac{T \sum_{k=1}^N \left[ \sum_{\alpha=0}^p \left( \frac{J(\alpha)}{2N} \right)^{\frac{1}{2}} \xi_k^{(\alpha)} b_n^{(\alpha)} \right]^2}{\frac{1}{g} \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 - 2\mu} \right\}. \tag{5.35}
\end{aligned}$$

Visto que a conexão com a mecânica estatística é dada pela função de partição e as propriedades termodinâmicas são analisadas no limite termodinâmico,  $N \rightarrow \infty$ , proseguimos com o cálculo da amplitude de transição, para  $p$  finito, usando a lei dos grandes números, equações (5.7) e (5.8). Dessa forma, a última exponencial da equação (5.35) se reduz a

$$\begin{aligned}
II &\equiv \exp \left\{ -\frac{T \sum_{k=1}^N \left[ \sum_{\alpha=0}^p \sum_{\gamma=0}^p \left( \frac{J(\alpha)}{2N} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{J(\gamma)}{2N} \right)^{\frac{1}{2}} \xi_k^{(\alpha)} b_n^{(\alpha)} \xi_k^{(\gamma)} b_n^{(\gamma)} \right]}{\frac{1}{g} \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 - 2\mu} \right\} \\
&= \exp \left[ -\frac{T \sum_{\alpha=0}^p \frac{J(\alpha)}{2} b_n^{(\alpha)2}}{\frac{1}{g} \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 - 2\mu} \right]. \tag{5.36}
\end{aligned}$$

Usando o fato que  $J(\alpha = 0) = J_0$ ,  $\xi_k^{(0)} = 1$ ,  $J(\alpha \neq 0) = J/p$ , podemos calcular as integrais nas variáveis  $b_n^{(\alpha)}$ . Logo, verificamos que a amplitude de transição obtida para o modelo esférico quântico com desordem corresponde à amplitude de transição de um sistema de  $N$  osciladores harmônicos, sendo que  $N - (p + 1)$  oscilam com frequência  $w$ ,  $p$  oscilam com frequência  $w'$  e um com frequência  $w_0$ ,

$$K = \left( \frac{1}{2\pi \imath g T} \right)^{\frac{N}{2}} e^{iS[x_{cl}]} \left( \frac{\sin wT}{wT} \right)^{-\frac{N-(p+1)}{2}} \left( \frac{\sin w'T}{w'T} \right)^{-\frac{p}{2}} \left( \frac{\sin w_0 T}{w_0 T} \right)^{-\frac{1}{2}}, \tag{5.37}$$

sendo que

$$w^2 = 2g\mu, \quad (5.38)$$

$$w_0^2 = 2g\mu \left(1 - \frac{J_0}{2\mu}\right) \quad (5.39)$$

e

$$w'^2 = 2g\mu \left(1 - \frac{J}{2p\mu}\right). \quad (5.40)$$

A constante  $A'$  foi determinada tomando o limite  $w \rightarrow 0$ ,  $w_0 \rightarrow 0$  e  $w' \rightarrow 0$ . Nesse caso, a amplitude deve se reduzir à amplitude de transição de um conjunto de  $N$  partículas livres, com  $m \equiv 1/g$ .

## Ação Clássica

Vimos que a amplitude obtida para o modelo esférico quântico com desordem corresponde a um sistema de  $N$  osciladores harmônicos, sendo que  $N - (p + 1)$  oscilam com frequência  $w$ ,  $p$  oscilam com frequência  $w'$  e um oscila com frequência  $w_0$ . A lagrangiana desse sistema de  $N$  osciladores pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{OH} = & \sum_{k=1}^{N-(p+1)} \left( \frac{1}{2} m \dot{x}_k^2 - \frac{1}{2} m w^2 x_k \right) + \sum_{k=1}^p \left( \frac{1}{2} m \dot{x}_k^2 - \frac{1}{2} m w'^2 x_k \right) \\ & + \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} m w_0^2 x + A. \end{aligned} \quad (5.41)$$

Deve haver alguma transformação relacionando a lagrangiana do modelo com desordem,  $\mathcal{L}$ , com a lagrangiana de um conjunto de  $N$  osciladores harmônicos,  $\mathcal{L}_{OH}$ ,

$$\mathcal{L} \Leftrightarrow \mathcal{L}_{OH}, \quad (5.42)$$

de tal forma que a ação possa ser obtida da lagrangiana (5.41). Mas para isso precisamos calcular a constante  $A$ . O cálculo é análogo ao que foi feito nos capítulos anteriores. Redefinimos



a coordenada,  $x_i \equiv \tilde{x}_i + f_i$ , na lagrangiana (5.24) e a deixamos na forma

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2g} \sum_i \dot{\tilde{x}}_i^2 + \sum_{i,j} \tilde{x}_i \underbrace{\left( \frac{J_0}{2N} + \frac{J}{2pN} \sum_{\alpha=1}^p \xi_i^{(\alpha)} \xi_j^{(\alpha)} - \mu \delta_{ij} \right)}_{\mathcal{O}_{ij}} \tilde{x}_j + cte, \quad (5.43)$$

sendo que  $f_i$  é solução da equação

$$2 \sum_{ij} \tilde{x}_i \mathcal{O}_{ij} f_j + H \sum_i \tilde{x}_i = 0 \quad (5.44)$$

e a constante é dada por

$$cte = \sum_{i,j} \mathcal{O}_{ij} f_i f_j + H \sum_i f_i. \quad (5.45)$$

Nesse caso,  $f_i$  também deve ter a forma

$$f_i = \sum_k \mathcal{O}_{ik}^{-1} g_k, \quad (5.46)$$

implicando a relação

$$\sum_k (2g_k + H) \tilde{x}_k = 0 \quad \rightarrow \quad g_k = -\frac{H}{2}. \quad (5.47)$$

Admitindo para  $\mathcal{O}_{ik}^{-1}$  a forma

$$\mathcal{O}_{ik}^{-1} = A + B\delta_{ik} + C \sum_{\alpha=1}^p \xi_i^{(\alpha)} \xi_k^{(\alpha)}, \quad (5.48)$$

e levando em conta que  $\sum_k \mathcal{O}_{ik} \mathcal{O}_{kj}^{-1} = \delta_{ij}$ , obtemos

$$\mathcal{O}_{ij}^{-1} = -\frac{J_0}{2N\mu \left( \mu - \frac{J_0}{2} \right)} - \frac{1}{\mu} \delta_{ij} - \frac{J}{2pN\mu \left( \mu - \frac{J}{2p} \right)} \sum_{\alpha=1}^p \xi_i^{(\alpha)} \xi_j^{(\alpha)}. \quad (5.49)$$

A partir dos resultados acima, a constante da expressão (5.43) assume a forma

$$cte = \frac{NH^2}{4\mu \left(1 - \frac{J_0}{2\mu}\right)}. \quad (5.50)$$

Quando identificamos o modelo esférico com desordem com um sistema de  $N$  osciladores harmônicos, a constante  $A$  da lagrangiana (5.41) deve ser identificada com o termo constante que aparece na expressão (5.43), ou seja,  $A = cte$ .

Portanto, considerando um sistema de osciladores harmônicos, a ação do modelo esférico quântico com desordem é equivalente a

$$\begin{aligned} S[x] &\Leftrightarrow \int_0^T dt \mathcal{L}_{OH} \\ &= \bar{S}_{OH}[x] + \frac{NH^2T}{4\mu \left(1 - \frac{J_0}{2\mu}\right)}. \end{aligned} \quad (5.51)$$

A ação clássica de um sistema de  $N$  osciladores harmônicos,  $\bar{S}_{OH}[x_{cl}]$ , em que  $N - (p + 1)$  oscilam com frequência  $w$ ,  $p$  oscilam com frequência  $w'$  e um oscila com frequência  $w_0$ , é dada por

$$\begin{aligned} \bar{S}_{OH}[x_{cl}] &= \frac{1}{2} \frac{w_0}{g \sin w_0 T} \left[ (x_f^2 + x_i^2) \cos w_0 T - 2x_i x_f \right] \\ &+ \sum_{k=1}^p \left\{ \frac{1}{2} \frac{w'}{g \sin w' T} \left[ (x_{k_f}^2 + x_{k_i}^2) \cos w' T - 2x_{k_i} x_{k_f} \right] \right\} \\ &+ \sum_{k=1}^{N-(p+1)} \left\{ \frac{1}{2} \frac{w}{g \sin w T} \left[ (x_{k_f}^2 + x_{k_i}^2) \cos w T - 2x_{k_i} x_{k_f} \right] \right\} \end{aligned} \quad (5.52)$$

## Conexão com a Mecânica Estatística

Dada a amplitude de transição,

$$K = \left( \frac{1}{2\pi i g T} \right)^{\frac{N}{2}} \exp \left[ \frac{i T N H^2}{4 \left( \mu - \frac{J_0}{2} \right)} \right] e^{i \bar{S}_{OH}[x_{cl}]} \\ \times \left( \frac{\sin w T}{w T} \right)^{-\frac{N-(p+1)}{2}} \left( \frac{\sin w' T}{w' T} \right)^{-\frac{p}{2}} \left( \frac{\sin w_0 T}{w_0 T} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (5.53)$$

podemos calcular a função de partição, definida como

$$\mathcal{Z} = \int \left( \prod_{k=1}^N dx_k \right) K(x_k, -i\beta; x_k, 0). \quad (5.54)$$

Após os cálculos das integrais, obtemos a forma explícita da função de partição do modelo esférico quântico com desordem,

$$\mathcal{Z} = \exp \left[ \frac{N\beta H^2}{4\mu \left( 1 - \frac{J_0}{2\mu} \right)} \right] 2^{-N} \left( \sinh \frac{\beta w}{2} \right)^{-[N-(p+1)]} \left( \sinh \frac{\beta w'}{2} \right)^{-p} \left( \sinh \frac{\beta w_0}{2} \right)^{-1}. \quad (5.55)$$

### 5.1.3 Comportamento Crítico Quântico

A função de partição do modelo esférico quântico com desordem do tipo Hopfield é válida apenas para  $\mu > J_0/2$  e  $\mu > J/(2p)$ . A energia livre por sítio associada à função de partição é dada por

$$f(\beta, H, \mu) = -\frac{H^2}{4 \left( \mu - \frac{J_0}{2} \right)} + \frac{1}{\beta} \ln 2 + \frac{1}{N\beta} \ln \sinh \frac{\beta w_0}{2} \\ + \frac{N-(p+1)}{\beta N} \ln \sinh \frac{\beta w}{2} + \frac{p}{N\beta} \ln \sinh \frac{\beta w'}{2}. \quad (5.56)$$

Portanto, o vínculo esférico assume a forma

$$\begin{aligned}
1 &= \frac{H^2}{4\left(\mu - \frac{J_0}{2}\right)^2} + \frac{1}{N} \frac{g}{2\omega_0} \coth\left(\frac{\beta\omega_0}{2}\right) + \frac{N - (p+1)}{N} \frac{g}{2w} \coth\left(\frac{\beta\omega}{2}\right) \\
&+ \frac{p}{N} \frac{g}{2w'} \coth\left(\frac{\beta\omega'}{2}\right).
\end{aligned} \tag{5.57}$$

Como nos outros modelos, no limite  $g \rightarrow 0$ , a expressão do vínculo quântico recupera o caso clássico, dado pela equação (5.10), mas a energia livre é devidamente corrigida (devido à presença de um termo proporcional a  $\ln \beta g$ ).

No limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ), e com  $p$  finito, obtemos

$$1 = \frac{H^2}{4\left(\mu - \frac{J_0}{2}\right)^2} + \frac{g}{2w} \coth\left(\frac{\beta\omega}{2}\right), \tag{5.58}$$

lembrando que  $\mu > J/2$  e  $\mu > J/(2p)$ . Admitindo campo nulo, a equação (5.58) define uma linha crítica em um diagrama de fases  $g \times T$ . É claro que em um diagrama  $t - r - g$  também haverá uma fase paramagnética, uma fase ferromagnética e uma fase de vidro de spin. Como no caso clássico, podemos introduzir campos fictícios na função de partição e definir as variáveis  $m$  e  $q_\alpha$ . Nesse caso a expressão do vínculo assume a forma

$$\begin{aligned}
1 &= \frac{H^2}{4\left(\mu - \frac{J_0}{2}\right)^2} + \frac{\sum_\alpha H^{(\alpha)^2}}{4\left(\mu - \frac{J}{2p}\right)^2} + \frac{1}{N} \frac{g}{2\omega_0} \coth\left(\frac{\beta\omega_0}{2}\right) \\
&+ \frac{N - (p+1)}{N} \frac{g}{2w} \coth\left(\frac{\beta\omega}{2}\right) + \frac{p}{N} \frac{g}{2w'} \coth\left(\frac{\beta\omega'}{2}\right),
\end{aligned} \tag{5.59}$$

que também recupera o caso clássico, dado pela equação (5.17). Assim, no limite  $g \rightarrow 0$  recuperamos o diagrama representado na figura (5.1).

## 5.2 Desordem do tipo van Hemmen

Uma pergunta natural seria de que maneira a desordem do tipo van Hemmen influenciaria o diagrama de fases do modelo esférico. Para responder essa pergunta apresentamos a solução clássica e quântica do modelo esférico de van Hemmen na ausência de campo externo.

### 5.2.1 Modelo Clássico

A hamiltoniana clássica do modelo esférico de vidro de spin sugerida por van Hemmen é dada por

$$\mathcal{H} = - \sum_{1 \leq i < j \leq N} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i + \mu \sum_{i=1}^N \sigma_i^2, \quad (5.60)$$

em que  $N$  é o número de sítios de uma rede cristalina, a primeira soma deve ser realizada sobre todos os pares de sítios da rede,  $H$  é o campo externo, e  $J_{ij}$  é uma energia de interação definida por

$$J_{ij} = \frac{J_0}{N} + \frac{J}{2N} \left( \xi_i^{(1)} \xi_j^{(2)} + \xi_i^{(2)} \xi_j^{(1)} \right). \quad (5.61)$$

A solução do modelo de van Hemmen com uma distribuição de probabilidades duplo-delta associada às variáveis aleatórias  $\{\xi^{(\alpha)}\}$  no ensemble canônico, assim como um estudo do diagrama de fases são discutidos em [46]. Nesse trabalho, os autores analisam também o modelo na presença de uma configuração de campos aleatórios.

A função de partição grande canônica associada ao modelo de van Hemmen na ausência de campo externo assume a forma

$$\Xi = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_{i=1}^N d\sigma_i \right) \exp \left[ \frac{\beta J_0}{2N} \left( \sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^2 - \beta \mu \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 + \frac{\beta J}{2N} \left( \sum_{i=1}^N \xi_i^{(1)} \sigma_i \right) \left( \sum_{j=1}^N \xi_j^{(2)} \sigma_j \right) \right]. \quad (5.62)$$

Definindo as grandezas

$$\begin{aligned} q_1 &\equiv \sum_{i=1}^N \xi_i^{(1)} \sigma_i \\ q_2 &\equiv \sum_{j=1}^N \xi_j^{(2)} \sigma_j \end{aligned} \quad (5.63)$$

e usando o fato que  $4q_1q_2 = (q_1 + q_2)^2 - (q_1 - q_2)^2$ , a função de partição pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \Xi &= \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_{i=1}^N d\sigma_i \right) \exp \left\{ \frac{\beta J_0}{2N} \left( \sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^2 \right. \\ &\quad \left. - \beta \mu \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 + \frac{\beta J}{8N} [(q_1 + q_2)^2 - (q_1 - q_2)^2] \right\}. \end{aligned} \quad (5.64)$$

Usando identidades gaussianas,

$$\begin{aligned} \exp \left[ \frac{\beta J_0}{2N} \left( \sum_i \sigma_i \right)^2 \right] &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left[ -x^2 + 2 \left( \frac{\beta J_0}{2N} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_i \sigma_i x \right] \\ \exp \left[ \frac{\beta J}{8N} (q_1 + q_2)^2 \right] &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp \left[ -y^2 + 2 \left( \frac{\beta J}{8N} \right)^{\frac{1}{2}} (q_1 + q_2) y \right] \\ \exp \left[ -\frac{\beta J}{8N} (q_1 - q_2)^2 \right] &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz \exp \left[ -z^2 + 2 \left( \frac{\beta J}{8N} \right)^{\frac{1}{2}} (q_1 - q_2) z \right], \end{aligned}$$

e fazendo uma mudanças de variáveis,

$$\begin{aligned} x &= \left( \frac{\beta J_0 N}{2} \right)^{\frac{1}{2}} m \\ y &= \left( \frac{\beta J N}{8} \right)^{\frac{1}{2}} \bar{y} \\ z &= \left( \frac{\beta J N}{8} \right)^{\frac{1}{2}} \bar{z}, \end{aligned} \quad (5.65)$$

podemos calcular a integral nas variáveis  $\{\sigma\}$ ,

$$\begin{aligned} I_\sigma &= \prod_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} d\sigma_i \exp \left\{ -\beta\mu\sigma_i^2 + \left[ \beta J_0 m + \frac{\beta J}{4}(\bar{y} + i\bar{z})\xi_i + \frac{\beta J}{4}(\bar{y} - i\bar{z})\eta_i \right] \sigma_i \right\} \\ &= \left( \frac{\pi}{\beta\mu} \right)^{\frac{N}{2}} \exp \left\{ \frac{1}{4\beta\mu} \sum_i \left[ \beta J_0 m + \frac{\beta J}{4}(\bar{y} + i\bar{z})\xi_i + \frac{\beta J}{4}(\bar{y} - i\bar{z})\eta_i \right]^2 \right\}. \end{aligned} \quad (5.66)$$

Usando novamente a lei dos grande números, a expressão final da função de partição é dada por

$$\Xi = \left( \frac{\pi}{\beta\mu} \right)^{\frac{N}{2}} \left( \frac{\beta J_0 N}{2\pi} \right) \left[ \frac{4\pi}{\beta J_0 N \left( 1 - \frac{J_0}{2\mu} \right)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{4\pi}{\beta J N \left( 1 - \frac{J}{4\mu} \right)}, \quad (5.67)$$

conduzindo à expressão

$$1 = \frac{1}{2\beta\mu} + \frac{1}{\beta N 4\mu^2} \frac{J_0}{\left( 1 - \frac{J_0}{2\mu} \right)} + \frac{1}{\beta N 4\mu^2} \frac{J}{\left( 1 - \frac{J}{4\mu} \right)} \quad (5.68)$$

para o vínculo esférico clássico. A diferença entre o modelo de van Hemmen e o modelo de Hopfield com  $p = 2$  é que no modelo de van Hemmen as variáveis aleatórias correspondentes aos sítios interagentes na energia de interação, equação (5.61), são diferentes  $(\xi_i^{(1)} \xi_j^{(2)}$  e  $\xi_i^{(2)} \xi_j^{(1)})$  e no modelo de Hopfield as variáveis aleatórias envolvidas na energia de interação, que também são entre os sítios interagentes, são as mesmas  $(\xi_i^{(1)} \xi_j^{(1)}$  e  $\xi_i^{(2)} \xi_j^{(2)})$ , equação (5.3). No entanto, essa diferença não interfere no comportamento crítico do sistema, visto que a expressão do vínculo, dado pela equação (5.68), é exatamente a expressão do vínculo obtida para o modelo de Hopfield com  $p = 2$ , equação (5.10). Portanto, o diagrama de fases do modelo de van Hemmen clássico é exatamente o diagrama apresentado na figura 5.1 com  $p = 2$ .

### 5.2.2 Modelo Quântico

No mesmo estilo da versão quântica do modelo de Hopfield, a lagrangiana do modelo esférico de van Hemmen na ausência de campo externo é definida como

$$\mathcal{L} = \frac{g}{2} \sum_{i=1}^N p_i^2 + \frac{J_0}{2N} \left( \sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^2 + \frac{J}{2N} \left( \sum_{i=1}^N \xi_i^{(1)} \sigma_i \right) \left( \sum_{j=1}^N \xi_j^{(2)} \sigma_j \right) - \mu \sum_{i=1}^N \sigma_i^2. \quad (5.69)$$

Esse modelo é resolvido analiticamente pela formulação de integrais de trajetória aplicando a lei dos grandes números, equações (5.7) e (5.8). Seguindo a solução quântica do modelo de Hopfield, a amplitude de transição obtida é dada por

$$K = \left( \frac{1}{2\pi i g T} \right)^{\frac{N}{2}} e^{iS[x_{cl}]} \left( \frac{\sin wT}{wT} \right)^{-\frac{N-3}{2}} \left( \frac{\sin w'T}{w'T} \right)^{-1} \left( \frac{\sin w_0 T}{w_0 T} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (5.70)$$

com as frequências  $w$  e  $w_0$  e  $w'$  definidas nas equações (5.38), (5.39) e (5.40). O resultado (5.70) corresponde exatamente à amplitude de transição do modelo quântico de Hopfield com  $p = 2$ . Assim a expressão para o vínculo também corresponde à expressão do modelo de Hopfield com  $p = 2$ ,

$$1 = \frac{1}{N} \frac{g}{2\omega_0} \coth \left( \frac{\beta\omega_0}{2} \right) + \frac{N-3}{N} \frac{g}{2w} \coth \left( \frac{\beta\omega}{2} \right) + \frac{2}{N} \frac{g}{2w'} \coth \left( \frac{\beta\omega'}{2} \right), \quad (5.71)$$

Dessa forma, a desordem do tipo Hopfield com  $p = 2$  e a desordem do tipo van Hemmen nas versões clássica e quântica são equivalentes.



# Conclusões

Ao longo deste trabalho apresentamos soluções exatas de algumas versões do modelo esférico quântico utilizando os métodos de quantização canônica e de integrais de trajetória. O modelo esférico quântico elementar constitui talvez o exemplo mais simples de uma transição de fase quântica. Apesar de sua simplicidade, foi possível mostrar analiticamente a formação de uma singularidade, além da correção do comportamento divergente da entropia no limite  $T \rightarrow 0$  da versão clássica do modelo. Ainda no contexto de campo médio, analisamos a versão quântica do modelo esférico na presença de uma configuração de campos aleatórios, obtendo um diagrama de fases em termos da temperatura  $T$ , do parâmetro quântico  $g$  e da variância das flutuações do campo  $\Delta$ . No limite de  $T \rightarrow 0$ , obtemos a linha de transição  $g = g(\Delta)$ . A desordem de sítios é introduzida no modelo esférico quântico a partir das propostas de Hopfield e de van Hemmen. Para um número fixo de padrões,  $p = 2$ , o modelo esférico quântico com desordem do tipo Hopfield corresponde à versão quântica com desordem do tipo van Hemmen. Em analogia com o modelo ANNI, também apresentamos a versão quântica do modelo esférico com interações competitivas de curto alcance em um rede hipercúbica  $d$  dimensional. Definindo a competição ao longo de  $m \leq d$  direções, esse modelo apresenta um ponto multicrítico de Lifshitz.

Versões quânticas de modelos de vidro de spin que necessitam da utilização do método das réplicas não foram abordadas nesse trabalho, pois não podem ser resolvidos exatamente. No futuro pretendemos analisar a versão quântica do análogo esférico do modelo de Sherrington-

---

Kirkpatrick, pelo menos na aproximação réplica simétrica, que deve ser exata para o modelo clássico. Como o método das réplicas induz um termo quártico de interação, pretendemos também analisar os efeitos de interações quárticas nos modelos apresentados. De especial interesse, verificar se a introdução desse tipo de termo pode induzir uma distinção entre padrões no modelo de Hopfield.

# Apêndice A

## Equação de Schrödinger

A partir da amplitude de transição definida na formulação de integrais de trajetória, podemos mostrar a sua equivalência com a equação de Schrödinger. Para isso, consideramos o movimento de uma partícula em um potencial em uma dimensão. A lagrangiana desse sistema é dada por

$$\mathcal{L}(x, \dot{x}) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x), \quad (\text{A.1})$$

sendo que  $x$  e  $\dot{x}$  definem a posição e a velocidade da partícula. A ação é definida como

$$S[x] = \int_{x_i}^{x_f} dt \mathcal{L}(x, \dot{x}) \quad (\text{A.2})$$

e amplitude de transição como

$$K(t_f = \epsilon, x_f; t_i = 0, x_i) = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \int \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar} S[x]}. \quad (\text{A.3})$$

A equação de Schrödinger pode ser obtida da amplitude de transição. Admitindo uma evolução temporal infinitesimal,  $\epsilon$ , temos

$$K(t_f = \epsilon, x_f; t_i = 0, x_i) = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{x_f - x_i}{\epsilon} \right)^2 - V \left( \frac{x_f - x_i}{2} \right) \right] \right\}. \quad (\text{A.4})$$

A amplitude de transição nada mais é que um propagador. Sendo assim, podemos calcular a propagação de uma função de onda em um tempo infinitesimal  $\epsilon$ , definida por

$$\psi(x, \epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' K(\epsilon, x; 0, x') \psi(x', 0). \quad (\text{A.5})$$

Admitindo a mudança de variável,

$$\eta = x' - x, \quad (\text{A.6})$$

podemos escrever a função de onda  $\psi(x, \epsilon)$  na forma

$$\psi(x, \epsilon) = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{\frac{im}{2\hbar\epsilon}\eta^2 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x + \frac{\eta}{2})} \psi(x + \eta, 0). \quad (\text{A.7})$$

Para  $\eta$  suficientemente grande e  $\epsilon$  suficientemente pequeno, o primeiro termo da exponencial conduz a rápidas oscilações, de contribuição nula. A máxima contribuição desse termo é dada na região

$$0 \leq |\eta| \leq \left( \frac{2\pi\hbar\epsilon}{m} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (\text{A.8})$$

Portanto, expandindo o integrando em série de Taylor até primeira ordem em  $\epsilon$ , temos

$$\begin{aligned} \psi(x, \epsilon) &= \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{\frac{im}{2\hbar\epsilon}\eta^2} \left[ 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V\left(x + \frac{\eta}{2}\right) \right] \psi(x + \eta, 0) \\ &= \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{\frac{im}{2\hbar\epsilon}\eta^2} \left[ 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \right] \\ &\times \left( \psi(x, 0) + \eta\psi'(x, 0) + \frac{\eta^2}{2} \psi''(x, 0) + \mathcal{O}(\eta^3) \right). \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Agora todas as integrais contêm um integrando oscilante. Uma maneira de calculá-las é admitir a regularização

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{\frac{im}{2\hbar\epsilon}\eta^2} &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{(\frac{im}{2\hbar\epsilon} - \delta)\eta^2} \\ &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left( \frac{\pi}{\delta - \frac{im}{2\hbar\epsilon}} \right)^{\frac{1}{2}} = \left( \frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m} \right)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Calculando todas as integrais, obtemos

$$\psi(x, \epsilon) = \psi(x, 0) + \frac{i\hbar\epsilon}{2m} \psi''(x, 0) - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x)\psi(x, 0) + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (\text{A.11})$$

que pode ser reescrita como

$$\psi(x, \epsilon) - \psi(x, 0) = \frac{i\epsilon}{\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x, 0) + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (\text{A.12})$$

Dessa forma, no limite  $\epsilon \rightarrow 0$  mostramos que é possível obter a equação de Schrödinger, dependente do tempo, partindo da propagação de uma função de onda dada pela amplitude de transição,

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x, t). \quad (\text{A.13})$$

Isso significa que a formulação de integrais de trajetória é equivalente à equação de Schrödinger.

# Apêndice B

## Energia de Interação

Em problemas da física da matéria condensada, admitimos que a energia de interação,  $J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$  depende apenas das diferenças relativas entre as posições  $\mathbf{r}$  e  $\mathbf{r}'$ . Nesse caso, a transformada de Fourier é dada por

$$\hat{J}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{h}} J(\mathbf{h}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{h}}, \quad (\text{B.1})$$

com  $\mathbf{h} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$  e  $\mathbf{q}$  pertencente a primeira zona de Brillouin. Para o modelo esférico quântico em que existem apenas interações ferromagnéticas entre primeiros vizinhos, isto é,  $J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = J > 0$ , temos

$$\hat{J}(\mathbf{q}) = 2J \sum_{i=1}^d \cos q_i. \quad (\text{B.2})$$

Entretanto, se considerarmos um modelo em que em  $(d - 1)$  dimensões existem interações de primeiros vizinhos e em uma dimensão existe uma competição entre primeiros e segundos vizinhos, a energia de interação assume a forma

$$\hat{J}(\mathbf{q}) = 2J_1 \sum_{i=1}^d \cos q_i + 2J_2 \cos 2q_d. \quad (\text{B.3})$$

Supondo interações ferromagnéticas entre primeiros vizinhos,  $J_1 > 0$ , e antiferromagnéticas

entre segundos vizinhos,  $J_2 < 0$ , podemos encontrar o vetor  $\mathbf{q}$  que maximiza a equação (B.3). Nas direções em que não há competição as componentes do vetor que maximiza a energia de interação são nulas,  $q_{ic} = 0$  com  $i = 1, \dots, (d-1)$ . Na direção  $d$  que ocorre a competição, analisamos com cuidado os valores possíveis da componente  $q_{dc}$  que maximiza a energia. A componente que maximiza a expressão

$$\hat{J}(q_d) = 2J_1 \cos q_d + 2J_2 \cos 2q_d, \quad (\text{B.4})$$

é aquela que satisfaz as condições  $\hat{J}'(q_d) = 0$  e  $\hat{J}''(q_d) < 0$ , derivada primeira e segunda respectivamente. Definindo  $p \equiv -J_2/J_1$ , existem duas possibilidades:

(i) Para  $p \leq 1/4$ , temos

$$q_{dc} = q_c = \begin{cases} 0, & \text{for } J_1 > 0 \\ \pi, & \text{for } J_1 < 0 \end{cases}. \quad (\text{B.5})$$

(ii) Para  $p > 1/4$  o valor é  $q_c = \pm \arccos 1/(4p)$ . Assim, considerando interações ferromagnéticas entre primeiros vizinhos e antiferromagnéticas entre segundos vizinhos, o vetor que maximiza a expressão (B.3) é dado por

$$\mathbf{q}_c = (\underbrace{0, 0, 0, 0, \dots}_{d-1}, q_c), \quad (\text{B.6})$$

com

$$q_c = \begin{cases} 0, & \text{for } p \leq \frac{1}{4} \\ \pm \arccos \frac{1}{4p}, & \text{for } p > \frac{1}{4} \end{cases}. \quad (\text{B.7})$$

# Apêndice C

## Integrais de Trajetória - Modelo com Competição

Nesse apêndice mostramos como a função de partição do modelo esférico com competição, equação (4.25), pode ser obtida a partir do formalismo de tempo imaginário. Na verdade, como não é necessário usar a forma explícita da energia de interação, a função de partição obtida descreve todos os modelos com energia dependente apenas das distâncias relativas entre dois sítios,  $J_{ij} = J(|i - j|)$ .

No formalismo de tempo imaginário a função de partição é dada por

$$\mathcal{Z} = \int \left( \prod_j \mathcal{D}\sigma_j(t) \right) \exp \left[ i \int_0^T dt \mathcal{L} \right], \quad (\text{C.1})$$

sendo  $\mathcal{L}$  a lagrangiana associada ao modelo,  $T \rightarrow -i\beta$  e  $\sigma_{j_i} = \sigma_{j_f} = \sigma$ . A integração funcional é restrita sobre as configurações que satisfazem as condições periódicas de contorno,  $\sigma_j(\beta) = \sigma_j(0)$ . Assim, a partir da lagrangiana associada à hamiltoniana do modelo esférico



com competição, equação (4.6), obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = & \int \left( \prod_j \mathcal{D}\sigma_j(\tau) \right) \exp \left\{ \int_0^\beta dt \left[ \frac{1}{2g} \sum_j \left( \frac{\partial \sigma_j(\tau)}{\partial \tau} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{j,k} J_{j,k} \sigma_j(\tau) \sigma_k(\tau) \right. \right. \\ & \left. \left. + H \sum_j \sigma_j(\tau) - \mu \sum_j \sigma_j^2(\tau) + \mu N \right] \right\}, \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

com a mudança de variável  $t \equiv -i\tau$ .

Para calcular explicitamente a função de partição é conveniente usar a transformada de Fourier

$$\sigma_j(\tau) = \left( \frac{\beta}{N} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{q,w} e^{ijq} e^{i\tau w} \sigma_q(w). \quad (\text{C.3})$$

Como  $\sigma_j(\tau)$  deve satisfazer a condição periódica de contorno,  $\sigma_j(0) = \sigma_j(\beta)$ , verificamos que  $w \equiv w_n = (2n\pi)/\beta$ , sendo  $n$  um inteiro,  $-\infty < n < \infty$ . Portanto, a função de partição no espaço de Fourier pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = & e^{\beta N \mu} \int \left( \prod_{q,n} d\sigma_q(w_n) \right) \\ & \times \exp \left\{ \sum_{q,n} \left[ -\frac{\beta^2 w_n^2}{2g} + \frac{\beta^2}{2} \hat{J}(q) - \beta^2 \mu \right] \sigma_q(w_n) \sigma_q(-w_n) + \left( \frac{\beta}{N} \right)^{\frac{1}{2}} N \beta \sigma_0(0) \right\}, \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

em que  $\hat{J}(q)$  é a transformada de Fourier da energia de interação e  $q$  é um vetor pertencente a primeira zona de Brillouin. De uma forma geral, calculando as integrais gaussianas da função de partição, obtemos

$$\mathcal{Z} = \exp \left[ \frac{\beta N H^2}{4 \left( \mu - \frac{1}{2} \hat{J}(0) \right)} + \beta N \mu \right] \prod_{q,n} \left\{ \frac{\pi}{\frac{\beta^2}{2g} \left[ w_n^2 + 2g \left( \mu - \frac{1}{2} \hat{J}(q) \right) \right]} \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (\text{C.5})$$

A partir da relação (2.40), a função de partição do modelo esférico com competição, ou qualquer modelo esférico quântico com energia de interação dependendo apenas das distâncias

relativas entre dois sítios, é dada por

$$\mathcal{Z} = \exp \left[ \frac{\beta N H^2}{4 \left( \mu - \frac{1}{2} \hat{J}(0) \right)} + \beta N \mu \right] \prod_q \left[ 2 \sinh \frac{1}{2} \beta w_q \right]^{-1}, \quad (\text{C.6})$$

sendo  $w_q$  definido na equação (4.23). Portanto, a expressão da função de partição obtida a partir da formulação de integração funcional é exatamente igual à função de partição obtida pelo método de quantização canônica, equação (4.25).

# Apêndice D

## Expoente Crítico Dinâmico

Uma transição de fase de segunda ordem pode ser caracterizada por uma grandeza denominada parâmetro de ordem. Esse parâmetro é escolhido adequadamente para cada sistema físico, sendo nulo em uma das fases (desordenada) e não nulo em outra fase (ordenada). Nas transições de segunda ordem, o parâmetro de ordem é pequeno na região crítica, justificando o desenvolvimento da energia livre como uma série de potências dos invariantes desse parâmetro de ordem, conhecida como expansão de Landau [3], que fornece uma descrição geral do comportamento crítico, independente de um sistema específico.

Nesse ponto surge a ideia de universalidade do comportamento crítico, que não deve depender das particularidades e características microscópicas de cada sistema. Nas vizinhanças do ponto crítico, certas grandezas termodinâmicas, como o calor específico e a suscetibilidade, apresentam um comportamento peculiar, com divergências que são caracterizadas por um conjunto de expoentes. Nesse sentido, os expoentes críticos descrevem a natureza das singularidades e caracterizam a transição de fase. Todas as transições que possuem o mesmo conjunto de expoentes pertencem à mesma classe de universalidade. O fato mais importante é que as classes de universalidade são determinadas por poucos fatores, essencialmente a dimensão espacial do sistema e as simetrias envolvidas. O que está por trás da universalidade

é o fato de que na região crítica o comprimento de correlação é a única escala de comprimento da teoria. Distante do ponto crítico, o comprimento de correlação é da ordem do espaçamento entre os sítios da rede (no caso de um sólido). Nessa situação as propriedades microscópicas são importantes e conduzem a características muito distintas entre diferentes materiais. Porém, nas proximidades do ponto crítico, o comprimento de correlação diverge (torna-se da ordem do tamanho do sistema), e as características microscópicas dos sistemas passam a ser irrelevantes.

Muito próximo do ponto crítico, a escala de comprimento típico, isto é, o comprimento de correlação  $\xi$  associado ao parâmetro de ordem, tem um comportamento divergente,

$$\xi \propto |t|^{-\nu}, \quad (\text{D.1})$$

sendo  $\nu$  o expoente crítico associado ao comprimento de correlação e  $t$  uma grandeza adimensional que representa a “distância” em relação ao ponto crítico. Por exemplo, numa transição que ocorre quando o sistema passa por uma temperatura crítica  $T_c$ , o parâmetro  $t$  é usualmente escolhido como  $t \equiv (T - T_c)/T_c$ . Além disso, em adição às correlações espaciais, um sistema físico também exhibe correlações temporais. A escala de tempo típica para o decaimento das flutuações é determinada pelo tempo de correlação  $\tau_c$ . Muito próximo do ponto crítico seu comportamento é dado por

$$\tau \propto \xi^z \propto |t|^{-\nu z}, \quad (\text{D.2})$$

em que  $z$  é o expoente crítico dinâmico e determina a anisotropia entre o espaço e o tempo.

Em um sistema clássico a função de partição se fatoriza,

$$Z = Z_{\text{cinético}} Z_{\text{potencial}}. \quad (\text{D.3})$$

Em outras palavras, a estática e a dinâmica se desacoplam. Nesse caso, o parâmetro de ordem

associado ao comportamento crítico é independente do tempo, apresentando apenas uma dependência espacial. Em um sistema quântico, o desacoplamento não ocorre. Dessa forma, além de apresentar uma dependência espacial, o parâmetro de ordem depende explicitamente do tempo. Para exemplificar, vamos considerar o modelo de Landau-Ginzburg com um “parâmetro de ordem local”,  $m = m(\mathbf{r}, \tau)$ , dependendo da posição e do tempo. Então temos a expansão da densidade de energia livre,

$$f[m] = a_2 m^2 + a_4 m^4 + \dots + m \left( c_1 \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + c_2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + c_3 \left( \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} \right)^2 \right) m + \dots \quad (\text{D.4})$$

Os termos que acompanham os coeficientes  $a_2, a_4, c_1$  e  $c_2$  são suficientes para descrever um ponto crítico ferromagnético usual. Nesse caso não há anisotropia entre o espaço e o tempo, ou seja,  $z = 1$ . Por outro lado, no ponto de Lifshitz (LP) [21], que ocorre quando  $c_2 = 0$ , o termo que acompanha o coeficiente  $c_3$  passa a ser relevante. No ponto de Lifshitz existe uma anisotropia entre o espaço e o tempo, conduzindo ao expoente crítico dinâmico  $z = 2$ . Esse expoente crítico dinâmico é inerente ao estudo de transições de fase quânticas.

# Referências Bibliográficas

- [1] E. Ising, Z. Physik **31**, 253, 1925.
- [2] Stephen G. Brush, Rev. of Mod. Phys. **39**, 883, 1967.
- [3] J.J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher e M.E. J. Newman, em *The Theory of Critical Phenomena*, editado pela Oxford Univ. Press, New York, 1992.
- [4] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117, 1944.
- [5] Kerson Huang, em *Statistical Mechanics*, editado por John Wiley and Sons, Inc., New York, 1987.
- [6] R. J. Baxter, em *Exacty Solved Models in Statistical Mechanics*, editado por Dover Publications, New York, 2007.
- [7] Silvio R. A. Salinas, em *Introdução à Física Estatística*, editado pela Edusp, São Paulo, 1999.
- [8] M. Kac, Phys. Today **17**, 40, 1964.
- [9] C. C. Yan e G. H. Wannier, J. Math. Phys. **6**, 1833, 1965.
- [10] G. S. Joyce Phys. Rev. **146**, 349, 1966.
- [11] T. H. Berlin e M. Kac, Phys. Rev. **86**, 821, 1952.
- [12] G. S. Joyce, em *Phase Transitions and Critical Phenomena*, editado por C. Domb e M. S. Green, vol. 2, Academic Press, New York, 1972.

- [13] H. W. Lewis e G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **88**, 682, 1952.
- [14] H. W. Lewis e G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **90**, 1131, 1953.
- [15] G. Obermair, em *Dynamical Aspects of Critical Phenomena*, editado por J. I. Budnick e M. P. Kawatra, Gordon and Breach, New York, 1972.
- [16] T. Vojta, *Phys. Rev. B* **53**, 710, 1996.
- [17] M. H. Oliveira, E. P. Raposo e M. D. Coutinho-Filho, *Phys. Rev. B* **74**, 184101, 2006.
- [18] Th. M. Nieuwenhuizen, *Phy. Rev. Lett.* **74**, 4293, 1995.
- [19] R. Serral Gracià e Th. M. Nieuwenhuizen, *Phy. Rev. B* **69**, 056119, 2004.
- [20] M. Kastner e O. Schnetz, *J. Stat. Phys.* **122**, 1195, 2006.
- [21] R. M. Hornreich, *J. Magn. Magn. Mat.*, **15**, 387, 1980.
- [22] L. Kalok e G. M. Obermair, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **9**, 819, 1972.
- [23] C. S. O. Yokoi, M. D. Coutinho-Filho e S. R. Salinas, *Phys. Rev. B* **24**, 4047, 1981.
- [24] T. Vojta e M. Schreiber, *Phys. Rev. B* **53**, 8211, 1996.
- [25] D. Bollé, Th. M. Nieuwenhuizen, I. Pérez Castilho e T. Verbeiren, *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**, 10269, 2003.
- [26] J. L. van Hemmen, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 409, 1982.
- [27] David Sherrington e Scott Kirkpatrick, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1792, 1975.
- [28] S. F. Edwards e P. W. Anderson, *J. Phys. F* **5**, 965, 1975.
- [29] Pedro Castro Menezes e Alba Theumann, *Phys. Rev. B* **75**, 024433, 2007; **78**, 054444, 2008; **79**, 094412, 2009.
- [30] A. J. Bray e M. A. Moore, *J. Phys. C: Solid St. Phys.* **13**, L655, 1980.

- [31] Ashok Das, em *Field Theory: A Path Integral of Approach*, editado por World Scientific, Singapore, 2006.
- [32] T. Scheneider e E. Pytte, *Phys. Rev. Lett.* **15**, 1519, 1977.
- [33] A. Aharony, Y. Gefen e Y. Shapir, *J. Phys. C* **15**, 673, 1982.
- [34] D. P. Belanger e A. P. Young, *J. Magn. Magn. Mater.* **100**, 272, 1991.
- [35] J. M. Yeomans, em *Solid State Physics*, editado por H. Ehrenreich e D. Turnbull, Academic Press, California, 1988.
- [36] M. M. Tamashiro, C. S. Yokoi e S. R. Salinas, *Phys. Rev. B* **56**, 8204, 1997.
- [37] M. O. Hase e S. R. Salinas, *J. Phys. A: Math. Gen.* **39**, 4875, 2006.
- [38] C. Mergulhão, Jr. e C. E. I. Carneiro, *Phys Rev. B* **59**, 13 954, 1999.
- [39] C. Pisani, E. R. Smith and C. J. Thompson, *Physica A* **139**, 585, 1986.
- [40] L. Frachebourg and M. Henkel, *Physica A* **195**, 577, 1993.
- [41] S. Chakrabarty and Z. Nussinov, *Phys. Rev. B* **84**, 144402, 2011.
- [42] J. Stephenson, *Can. J. Phys.* **48**, 1724, 1970.
- [43] G. Parisi, *Phys. Lett.* **73A**, 203, 1979.
- [44] J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless e Raymund C. Jones, *Phys. Rev. Lett.* **36**, 1217, 1976.
- [45] J. J. Hopfield, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **79**, 2554, 1982.
- [46] P. T. Muzy, A. P. Vieira e S. R. Salinas, *Physica A*, **359**, 469, 2005.