

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS
Instituto de Física e Matemática
Curso de Bacharelado em Física



Trabalho de Conclusão de Curso

Vidro de Spin e o Modelo Hopfield

Arthur Krindges

Pelotas, 2021

Arthur Krindges

Vidro de Spin e o Modelo Hopfield

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto de Física e Matemática da Universidade Federal de Pelotas, como requisito parcial à obtenção do título de Bacharel em Física.

Orientador: Carlos Alberto Vaz de Moraes Junior

Pelotas, 2021

Universidade Federal de Pelotas / Sistema de Bibliotecas
Catalogação na Publicação

K89v Krindges, Arthur

Vidro de spin e o modelo Hopfield / Arthur Krindges ;
Carlos Alberto Vaz de Moraes Junior, orientador. — Pelotas,
2021.

77 f. : il.

Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Física)
— Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de
Pelotas, 2021.

1. Vidro de spin. 2. Hopfield. 3. Frustração. I. Moraes
Junior, Carlos Alberto Vaz de, orient. II. Título.

CDD : 538

Arthur Krindges

Vidro de Spin e o Modelo Hopfield

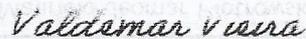
Trabalho de Conclusão de Curso aprovado, como requisito parcial para obtenção do grau de Bacharel em Física, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas.

Data da defesa: 11 de fevereiro de 2021

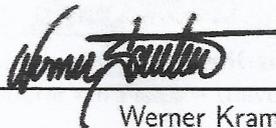
Banca Examinadora:



Maurício Jeomar Piotrowski
Doutor em Física – Universidade Federal de Pelotas



Valdemar das Neves Vieira
Doutor em Física – Universidade Federal de Pelotas



Werner Krambeck Sauter
Doutor em Física – Universidade Federal de Pelotas

AGRADECIMENTOS

Um agradecimento especial a minha família, minha mãe Neiva e meu pai Rui, por participarem do meu aprendizado, com exemplo, dando apoio e ajuda em todos os momentos na minha formação, para que mesmo em tempos difíceis eu seguisse meu caminho.

Aos meus irmãos Rafael e Ritieli por estarem presentes e sempre dispostos para qualquer contratempo ou apoio que eu precisasse, bem como minha namorada Júlia que esteve ao meu lado neste percurso.

Ao professor Carlos que permaneceu comigo nesta jornada e sempre estava disposto a ajudar e contribuir em qualquer coisa.

Aos vários professores do IFM que me ajudaram a desenvolver o conhecimento que eu tenho hoje.

Aos meus amigos de formação Alex, Leonardo e Eduardo pelas boas conversas e conselhos.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

RESUMO

KRINDGES, Arthur. **Vidro de Spin e o Modelo Hopfield**. Orientador: Carlos Alberto Vaz de Moraes Junior. 2021. 77 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Curso de Bacharelado em Física) – Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2021.

Este trabalho apresenta uma revisão sobre o ordenamento magnético vidro de spin, discutindo as principais características experimentais e teóricas dessa fase. Posteriormente uma análise do modelo Hopfield é feita, com ênfase na metodologia e no ferramental matemático e computacional utilizados. Alguns métodos experimentais para identificar a fase vidro de spin são apontados, entre eles os protocolos ZFC e FC (“Zero Field Cooling” e “Field Cooling”, respectivamente). O protocolo ZFC mostrou o pico da susceptibilidade magnética na temperatura de transição T_f e o comportamento condizente com a lei de Curie para temperaturas acima de T_f . Através do protocolo FC, temos o surgimento de uma magnetização remanente. Estas características indicam a existência de uma desordem congelada própria da fase vidro de spin. Adicionalmente, outros aspectos experimentais da fase vidro de spin são discutidos, como a dependência da frequência na amplitude da susceptibilidade magnética e a influência das impurezas para o aparecimento da fase vidro de spin. A descrição teórica para a fase vidro de spin é feita introduzindo as noções de interação de troca. A partir da discussão acerca de interações de troca aleatórias, a competição de interações que leva a frustração é apresentada. Essa característica citada de frustração é fundamental para o aparecimento da fase vidro de spin. Logo, alguns modelos estatísticos que incorporam a aleatoriedade na interação de troca são mostrados, entre eles os modelos Sherrington-Kirkpatrick (SK) e Hopfield. A ênfase no modelo Hopfield é dada por apresentar peculiaridades em relação ao modelo SK. A peculiaridade mais importante do modelo Hopfield diz respeito a uma variável de controle da frustração (α). No decorrer do trabalho, os métodos analíticos e computacionais para solução do modelo Hopfield são exibidos. Para a parte analítica, são utilizadas a teoria de campo médio, o método das réplicas e a réplica de simetria. Como resultado dos métodos computacionais são mostrados os comportamentos dos parâmetros de ordem, a susceptibilidade magnética e a energia livre para diferentes regimes de frustração, bem como o diagrama de fases do modelo. Em particular, verifica-se que o modelo apresenta o comportamento de quantidades físicas condizentes com um ordenamento vidro de spin para diferentes regimes de frustração e temperatura. Adicionalmente, percebe-se que o modelo, devido a sua abordagem de campo médio, permite um estado fundamental ferromagnético em $T = 0$ dependendo do nível de frustração.

Palavras-chave: Vidro de Spin. Hopfield. Frustração.

ABSTRACT

KRINDGES, Arthur. **Spin glass and the Hopfield Model**. Advisor: Carlos Alberto Vaz de Moraes Junior. 2021. 77 p. Monography (Bachelor in Physics) – Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, 2021.

This work presents a review on the magnetic ordering of spin glass, discussing the main experimental and theoretical characteristics of this phase. Subsequently, an analysis of the Hopfield model is performed, with emphasis on the methodology and the mathematical and computational tools used. Some experimental methods to identify the spin glass phase are pointed out, including the ZFC and FC protocols (Zero Field Cooling and Field Cooling, respectively). The ZFC protocol showed the peak magnetic susceptibility at the transition temperature T_f and the behavior consistent with Curie's law for temperatures above T_f . Through the FC protocol, there is the emergence of a remnant magnetization. These characteristics indicate the existence of a frozen disorder typical of the spin glass phase. In addition, other experimental aspects of the spin glass phase are discussed, such as the frequency dependence on the amplitude of the magnetic susceptibility and the influence of impurities for the appearance of the spin glass phase. The theoretical description for the spin glass phase is made by introducing the notions of exchange interaction. From the discussion about random exchange interactions, the competition of interactions that leads to frustration is presented. This characteristic of frustration is fundamental to the appearance of the spin glass phase. Therefore, some statistical models that incorporate randomness in the exchange interaction are shown, including the Sherrington-Kirkpatrick (SK) and the Hopfield models. The emphasis on the Hopfield model is given by its peculiarities in relation to the SK model. The most important peculiarity of the Hopfield model concerns a frustration control variable (α). During the work, the analytical and computational methods for solving the Hopfield model are shown. For the analytical part, the mean field theory, the replica and the symmetry replica methods are used. As a result of the computational methods, the behavior of the order parameters, the magnetic susceptibility and the free energy for different frustration regimes are displayed, as well as the phase diagram of the model. In particular, it appears that the model displays the behavior of physical quantities consistent with a spin glass order for different frustration and temperature regimes. Additionally, it is noticed that the model, due to the mean field approach, allows a ferromagnetic ground state at $T = 0$ depending on the level of frustration.

Keywords: Spin Glass. Hopfield. Frustration.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Susceptibilidade CA para ligas de Cu-0,1% Mn (×), Ag-0,5% Mn (●), Au-0,5% Mn (+), Au-0,2% Cr (△) e Ag-1,0% Mn (□) em função da temperatura, com um campo $h = 20$ Oe em 100 Hz.	24
Figura 2.2 – a) Susceptibilidade magnética do Cu%Mn em função da temperatura (T) para as concentrações de Mn 1,08% e 2,02%. b) Dependência da frequência na susceptibilidade em função da temperatura, frequência menor resulta em uma amplitude maior.	25
Figura 3.1 – Magnetização depende da temperatura.	29
Figura 3.2 – Interação de troca RKKY com J_{ij} em função da distância R	32
Figura 3.3 – Rede quadrada com competição entre interações, gerando frustração no sistema.	32
Figura 3.4 – Distribuição de probabilidade P em função de J_{ij} para valores de $J_0/J = 0$ e $J_0/J = 2$	33
Figura 3.5 – (a) Magnetização (m) e parâmetro vidro de spin ($q^{1/2}$) em função de T/T_c , onde as linhas sólidas é m para valores de J_0/J de ∞ , 2, 1,5, 1,3 e 1,1, de cima para baixo e $q^{1/2}$, linhas pontilhadas, com valores de 2 e 0 para J_0/J . (b) Diagrama de fases do modelo SK em função de $k_B T/J$ e J_0/J	35
Figura 3.6 – Susceptibilidade magnética (χ) em função da temperatura (kT), linhas sólidas a campo zero, linhas pontilhadas a $h = 0,1J$, na curva (a) para $J_0/J = 0$ e na curva (b) para $J_0/J = 0,5$	36
Figura 3.7 – Diagrama de fases em função de T/J e J_k/J para diferentes valores de J_0/J , com o aparecimento da fase Kondo, descrito por Magalhães <i>et al.</i>	36
Figura 3.8 – Diagrama de fases em função de T/J e J_k/J para $\alpha = 0,04$, com o aparecimento da fase Kondo, descrito por Magalhães <i>et al.</i>	37
Figura 4.1 – Comportamento dos parâmetros m e q em função de T/J para $\alpha = 0,15$	48
Figura 4.2 – Energia livre f em função de T/J para $\alpha = 0,15$	49
Figura 4.3 – Susceptibilidade magnética linear χ_1 em função de T/J para $\alpha = 0,15$	49
Figura 4.4 – Comportamento dos parâmetros m e q em função de T/J para $\alpha = 0$	50
Figura 4.5 – Comportamento de f em função de T/J para $\alpha = 0$	50
Figura 4.6 – Comportamento de χ_1 em função de T/J para $\alpha = 0$	51
Figura 4.7 – Comportamento de f em função de T/J para $\alpha = 0$	52
Figura 4.8 – Comportamento de m em função de T/J para $\alpha = 0$	52
Figura 4.9 – Comportamento de χ_1 em função de T/J para $\alpha = 0$	53
Figura 4.10 – Comportamento dos parâmetros m e q em função de T/J para $\alpha = 0,03$	53
Figura 4.11 – Comportamento de f em função de T/J para $\alpha = 0,03$	54
Figura 4.12 – Comportamento de χ_1 em função de T/J para $\alpha = 0,03$	55

Figura 4.13–Diagrama do modelo em função de α e da temperatura. 55

Figura 4.14–Energia livre da solução FM $f(FM/VS)$ e energia livre da solução VS
 $f(VS)$ em função de T/J para $\alpha = 0,03$ 56

LISTA DE CÓDIGOS

Código C.1 – Parte da sub-rotina do método de Newton.	73
Código C.2 – Parte da sub-rotina para calcula da matriz jacobiana.	73
Código C.3 – Parte da sub-rotina da fatoraçoão LU.	74
Código C.4 – Parte da sub-rotina para intergral por Quadratura de Gauss-Legendre. . . .	75
Código C.5 – Parte da sub-rotina para determinar os parâmetros de ordem em função da temperatura.	75
Código C.6 – Parte da sub-rotina para determinar a susceptibilidade em função da temperatura.	76
Código C.7 – Parte da função energia livre.	76
Código C.8 – Parte da função dos parâmetros de ordem m e q.	77

ABREVIATURAS

VS - Vidros de spin

CA - Campo externo alternado

PM - Paramagnética

FM - Ferromagnética

AFM - Antiferromagnética

ZFC - Zero Field Cooling

FC - Field Cooling

RKKY - Ruderman Kittel Kasuya Yosida

SK - Sherrington Kirkpatrick

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
2	VIDRO DE SPIN	23
2.1	Características Experimentais	23
3	DESCRIÇÃO DE MUITOS CORPOS E SUAS INTERAÇÕES	27
3.1	Mecânica Estatística	28
3.2	Modelo de Ising e parâmetros de ordem	28
3.2.1	Modelo de alcance infinito - Teoria de campo médio	30
3.3	Desordem e Frustração	31
3.3.1	Modelo SK	33
3.3.1.1	Teoria de réplica de simetria	33
4	MODELO HOPFIELD	39
4.0.1	Regra de Hebb	39
4.1	Teoria de Campo Médio	40
4.2	Teoria de Réplicas	41
4.3	Métodos Numéricos e Comportamento do Modelo	47
4.3.1	Alta Frustração	47
4.3.2	Zero Frustração	49
4.3.2.1	Zero Frustração Analítico	51
4.3.3	Baixa Frustração	53
4.3.4	Diagrama de Fases	54
5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	57
	REFERÊNCIAS	61
	APÊNDICES	63
	APÊNDICE A – CÁLCULOS DA TEORIA DE RÉPLICAS	65
A.1	Média sobre a desordem	65
A.2	Inserção dos parâmetros q e r	65
A.3	Independência dos índices	66
A.4	Ponto de sela para ϕ	66
A.5	Expansão de primeira ordem em n	67
A.6	Traço da matriz A	67
	APÊNDICE B – MÉTODOS NUMÉRICOS	69
B.1	Método de Newton–Raphson	69

B.2	Fatoração LU	69
B.3	Derivada por diferenças finitas	70
B.4	Metodo de Gauss-Legendre	70
	APÊNDICE C – CÓDIGOS	73

1 INTRODUÇÃO

O campo da matéria condensada objetiva a compreensão e reprodução dos mais variados efeitos e comportamentos de materiais constituídos por um grande número de indivíduos (partículas). Esta área vem sendo amplamente estudada por físicos e químicos do mundo todo (CALLISTER, 2002). Em especial, neste campo de atuação as propriedades magnéticas de materiais são de grande utilidade na vida moderna. A partir de diversos estudos experimentais e teóricos, os fenômenos relacionados ao magnetismo têm sido empregados na criação de equipamentos médicos, dispositivos de armazenamento de dados, entre outros (THAKUR *et al.*, 2020). No que diz respeito ao conhecimento acerca de materiais magnéticos, registros datam de pelo menos 2500 anos, onde fragmentos de ferro imantados, apresentando essa mesma idade, foram encontrados na cidade de Manisa, na Turquia (OZCEP, 2018). O estado imantado acontece quando um material sem características magnéticas é exposto a um campo magnético e acaba por apresentar uma magnetização preferencial (ZEMANSKY, 1978). A consequente resposta do material a fontes de magnetização, em particular por campos magnéticos, gera a classificação dos materiais. Como por exemplo, sistemas que respondem fracamente a campos magnéticos podem ser, dependendo do material, ditos paramagnéticos. Por outro lado, forte resposta do material ao campo pode indicar um sistema ferromagnético (NUSSENZVEIG, 2015). Ressalta-se que existem inúmeros outros tipos de materiais com propriedades magnéticas distintas (JILES, 1998).

Do ponto de vista microscópico, na descrição de sistemas magnéticos é considerado o momento magnético orbital, que consiste no movimento de translação dos elétrons em torno do núcleo, o momento magnético de spin, uma característica intrínseca das partículas e momento magnético induzido por um campo magnético externo (EISBERG; RESNICK, 1979). Consequentemente, os materiais podem apresentar duas magnetizações possíveis, as quais têm como origem o momento magnético orbital e de spin: a magnetização espontânea e a induzida. Primeiramente, se verifica que na magnetização espontânea de um material, a soma dos momentos magnéticos elementares é diferente de zero a campo nulo. Por outro lado, existe a magnetização induzida, onde os momentos do sistema reagem a um campo magnético externo a fim de se orientar preferencialmente. Portanto, a resposta dos materiais ao campo magnético aplicado pode ser identificada por meio do comportamento dos momentos magnéticos, caracterizando assim em que fase magnética o material se encontra. No caso de um material paramagnético, os spins não possuem uma direção preferencial. Como resultado, a magnetização é nula e o material responde fracamente a alinhamentos com campos externos. No caso de materiais ferromagnéticos, os spins têm uma direção preferencial (alinhamento paralelo). Com isso, existe uma magnetização espontânea com orientação bem definida. Consequentemente, verifica-se que o material responde fortemente ao campo. No caso da fase antiferromagnética, os spins estão alinhados paralelamente e antiparalelamente, resultando em ausência de uma magnetização preferencial. Finalmente, tem-se ainda a fase ferrimagnética, em que os spins estão tanto alinhados paralelamente e antiparalelamente, mas com intensidades

de momento distintas, tendo assim uma magnetização espontânea não nula (JILES, 1998).

O constante avanço na área permitiu a descoberta de diversos outros materiais magnéticos com propriedades únicas (DELFT; KES, 2010), além dos anteriormente citados. Particularmente interessante, tanto do ponto de vista experimental quanto teórico, são os sistemas vidros de spin (VS) (CANNELLA; MYDOSH, 1972). Tais sistemas apresentam uma grande complexidade de descrição desde sua descoberta na década de 70, e até hoje apresentam diversos desafios em seu entendimento, principalmente no que diz respeito ao papel da desordem e frustração nesses sistemas (BINDER; YOUNG, 1986). Basicamente, um VS pode ser identificado como um conjunto de momentos magnéticos, em que para certo requisito de baixa temperatura, apresentam um estado congelado e desordenado. Tal comportamento é muito diferente dos padrões uniformes vistos em sistemas magnéticos convencionais, como os discutidos nos parágrafos anteriores. Particularmente, sugerem-se duas condições a serem satisfeitas para obtenção de tais estados congelados. Primeiramente, as interações entre os momentos devem competir, resultando na ausência de uma configuração de spins que satisfaça todas as interações (frustração). Segundo, deve haver aleatoriedade parcial destas interações (desordem) (FISCHER; HERTZ, 1991).

A fase VS foi observada primeiramente a partir da introdução de impurezas de metais de transição em metais nobres hospedeiros (BINDER; YOUNG, 1986). Como resultado, ao redor deles, os momentos das impurezas geram uma polarização magnética dos elétrons de condução do metal hospedeiro. Esta polarização pode ser positiva em certas distâncias e negativa em outras. Em adição, os momentos das impurezas restantes então sofrem a ação do campo magnético local produzido pelo elétron de condução polarizado e tendem a se alinhar com este. Considerando a colocação aleatória das impurezas, parte das interações são positivas e favorecem o alinhamento paralelo dos momentos. Por outro lado, parte é negativa, favorecendo o alinhamento antiparalelo. Portanto, verifica-se claramente em sistemas VS a existência de interações aleatórias e competitivas. Experimentalmente, um dos sistemas VS mais investigados foi o CuMn (WENGER; KEESOM, 1976).

Durante a investigação experimental de sistemas VS, como o CuMn, observaram-se algumas características não usuais. Por exemplo, a susceptibilidade¹ linear χ , que é a primeira derivada da magnetização pelo campo externo, apresenta um pico na temperatura de transição (FISCHER; HERTZ, 1991). Ainda que esse comportamento possa ser similar aquele observado em antiferromagnetos, outras características se somam a questão do pico em χ para definição do ordenamento VS. Por exemplo, verifica-se também que em tais sistemas o comportamento da susceptibilidade é dependente da forma com que o experimento é realizado (BINDER; YOUNG, 1986). Em adição, a susceptibilidade não linear χ_3 , que é a derivada terceira da magnetização pelo campo externo, apresenta uma divergência na temperatura de transição (MULDER; DUYNEVELDT; MYDOSH, 1981).

Teoricamente, para a descrição de sistemas magnéticos podem ser empregados modelos

¹ Susceptibilidade magnética determina a capacidade de magnetização de um material sob ação de um campo magnético externo.

de Ising, onde o hamiltoniano é dado pela soma das interações aos pares de spin. Particularmente, aos spins são atribuídos valores positivos ou negativos, mediante um parâmetro de interação (SALINAS, 2005). Portanto, em modelos do tipo Ising, os spins assumem o valor binário $S = \pm 1$ e uma interação de troca aos pares. Salienta-se que esses modelos teóricos têm como base características microscópicas, em que os materiais possuem uma grande quantidade de partículas (NISHIMORI, 2001). Portanto, nestes a Mecânica Estatística vem exercendo um papel fundamental na explicação fenomenológica. Nela, o entendimento de propriedades macroscópicas, como a magnetização, é dado por uma teoria estatística de interações microscópicas, como a interação entre spins.

No caso dos VS, as características gerais desses sistemas indicam a possibilidade do emprego de modelos que agregam as características citadas de presença de momentos magnéticos, desordem e interações que competem. Neste contexto, podem-se destacar os modelos de Edwards–Anderson (EDWARDS; ANDERSON, 1975) e o Ising Sherrington–Kirkpatrick (SK) (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1975), os quais introduzem a competição de interações via parâmetro de interação, sendo dado por meio de uma variável aleatória. Nestes, o mecanismo que introduz interações que competem é característica fundamental para o surgimento da fase VS (FISCHER; HERTZ, 1991).

Em especial para o ordenamento VS, o modelo Hopfield apresenta características únicas na obtenção desse estado (HOPFIELD, 1982). Neste modelo, que pode ser usado para a descrição de interações binárias, os spins interagem aos pares com uma variável de interação aleatória que segue a regra de Hebb (HEBB, 1949). Com isso, é possível obter um estado de desordem e frustração que é a característica dos VS. Salienta-se que este modelo possibilita, em contrapartida a modelos como o SK, por exemplo, a introdução de um parâmetro de ajuste da frustração (AMIT; GUTFREUND; SOMPOLINSKY, 1987). Devido a esta característica, o modelo proposto apresenta bons resultados na descrição de compostos desordenados de cério (MAGALHÃES *et al.*, 2006) quando comparado a contraparte SK (MAGALHÃES *et al.*, 2002). Adicionalmente, o modelo Hopfield pode ainda fornecer uma descrição termodinâmica rica, com transições de fase contínua (segunda ordem) e não contínua (primeira ordem), bem como um diagrama de fases que depende da temperatura e da variável de intensidade da frustração (peculiaridade do modelo).

Portanto, o presente trabalho tratará de uma revisão bibliográfica acerca da descrição vidro de spin, e o entendimento do papel da desordem e frustração nesses sistemas, através do modelo Hopfield. Na análise, serão empregados métodos analíticos e aproximações termodinâmicas, bem como a criação de um programa computacional na linguagem FORTRAN. Com base em ferramentas numéricas da literatura, quantidades termodinâmicas relevantes, como a magnetização, parâmetro vidro de spin e susceptibilidade linear, a energia livre de Helmholtz e o diagrama de fases serão calculadas e discutidas.

Com isso, o TCC está organizado na seguinte forma: no capítulo 2, uma descrição detalhada da fase VS, tanto do ponto de vista experimental como teórico. No capítulo 3, uma breve revisão sobre a interação de troca e de Mecânica Estatística para modelos magnéticos

do tipo Ising. O capítulo 4, apresenta detalhadamente todos os passos da teoria por trás do modelo Hopfield e apresentar os resultados obtidos para diferentes regimes de frustração.

2 VIDRO DE SPIN

Para realizar a discussão sobre o estado VS, um levantamento das principais características experimentais desta fase VS é mostrado. Posteriormente, é discutido um modelo que pode incorporar as características para produção teórica da fase VS.

Como discutido anteriormente, uma das maneiras de obter o ordenamento VS tem sido a partir da adição de impurezas de metais de transição em metais nobres hospedeiros (CuMn, AgMn, CuFe, etc) (FISCHER; HERTZ, 1991). Os momentos das impurezas geram uma polarização dos elétrons de condução dos metais nobres. Esta polarização, dependente da distância, pode ser positiva ou negativa. Os momentos magnéticos de impurezas vizinhas percebem o campo magnético local produzido pelos elétrons de condução polarizados. Devido a adição aleatória de impurezas, os alinhamentos podem ser paralelos ou antiparalelos. Em particular, a característica de aleatoriedade nas interações não é exclusiva dos VS. Esta pode ser verificada em sistemas com dipolos elétricos, os quais podem apresentar esta mesma propriedade de aleatoriedade, sendo encontrada em isolantes magnéticos e ligas amorfas, em que o análogo ao VS pode ser feito com os momentos de dipolo elétrico (FISCHER; HERTZ, 1991). Nos VS, este aspecto de aleatoriedade cria a chamada **frustração**, que será apresentada na seção 3.3, onde temos o aparecimento da desordem congelada nestes sistemas. Na frustração, encontramos uma magnetização espontânea local diferente de zero, entretanto a magnetização espontânea global é zero.

Inicialmente, sistemas VS eram considerados antiferromagnetos (AFM), com ambos apresentando um comportamento semelhante para susceptibilidade magnética. Entretanto, experimentos de espalhamento de nêutrons mostraram a não existência de picos de Bragg, não indicando uma ordem de longo alcance, que a fase AFM apresenta (FISCHER; HERTZ, 1991). Adicionalmente, investigações detalhadas para caracterização dos VS foram realizadas (FISCHER; HERTZ, 1991; BINDER; YOUNG, 1986). A seguir são destacados algumas destes atributos notáveis que dizem respeito ao comportamento VS.

2.1 Características Experimentais

Uma das assinaturas experimentais de sistemas VS é verificada a partir da presença de um pico na susceptibilidade linear como mostrado por Fischer e Hertz (1991). A susceptibilidade magnética é a resposta da magnetização em relação ao campo magnético h aplicado em uma dada temperatura, tal que

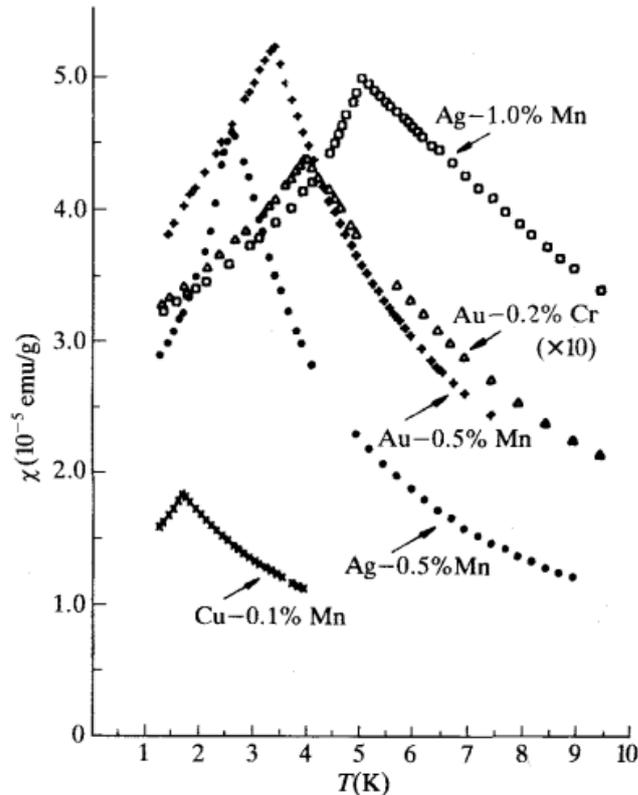
$$\chi = \frac{m}{h}, \quad (2.1)$$

podendo ser descrita também por uma expansão da magnetização em função do campo externo, onde

$$m = m_0 + \frac{1}{1!} \frac{\partial m}{\partial h} h + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 m}{\partial h^2} h^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 m}{\partial h^3} h^3 + \dots \quad (2.2)$$

$$= m_0 + \chi_1 h + \chi_2 h^2 + \chi_3 h^3 + \dots \quad (2.3)$$

Figura 2.1 – Susceptibilidade CA para ligas de Cu-0,1% Mn (\times), Ag-0,5% Mn (\bullet), Au-0,5% Mn ($+$), Au-0,2% Cr (\triangle) e Ag-1,0% Mn (\square) em função da temperatura, com um campo $h = 20$ Oe em 100 Hz.



Fonte: (FISCHER; HERTZ, 1991).

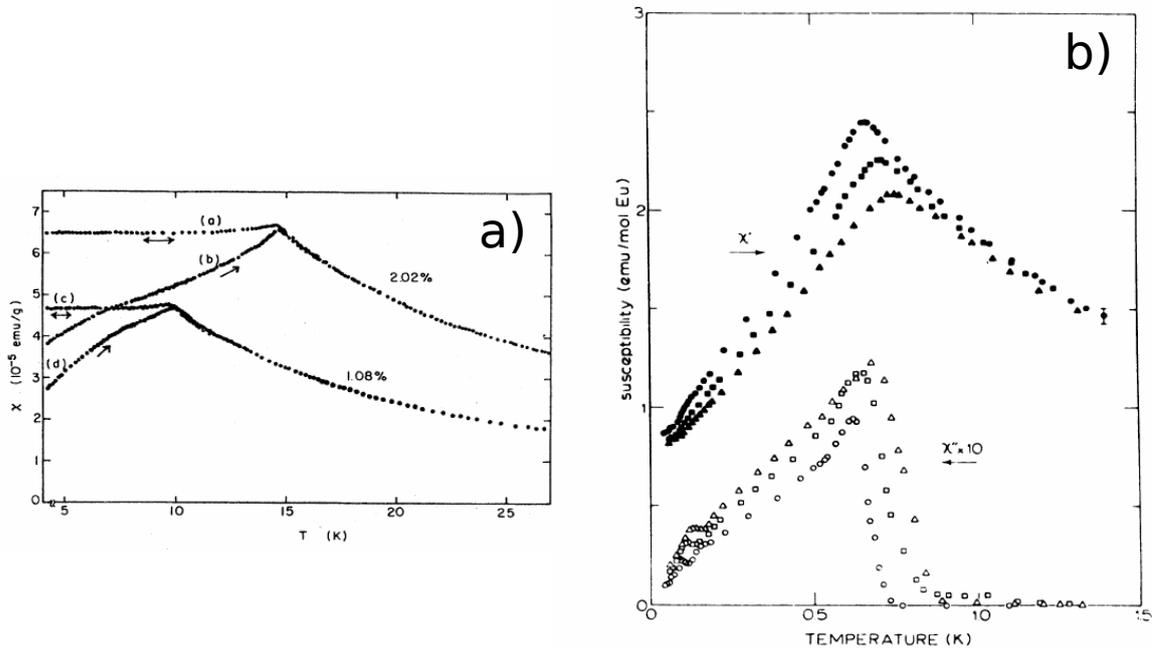
Logo, temos a susceptibilidade linear χ_1 como uma grandeza de interesse.

Essencialmente, a resposta magnética da fase VS é dada em função da magnetização local congelada. Basicamente, o aumento da temperatura na fase VS proporciona o aumento de χ até seu pico na temperatura de transição. Conforme indicado na Figura 2.1, temos a χ_{ca} (χ medido em um campo externo alternado) a qual é importante para a detecção de transições. Em adição, verifica-se que para altas temperaturas, a χ dos sistemas CuMn, AgMn, AuMn e AuCr tem comportamento similar a lei de Curie¹, com aumento de χ conforme decréscimo de temperatura $T > T_f$ na fase paramagnética (PM), onde $\chi \sim 1/T$. Tal aumento de χ com decréscimo de T ocorre até o pico da susceptibilidade em uma temperatura conhecida como temperatura de transição T_f . Para $T < T_f$, uma fase VS é obtida. Mais importante, a fase VS é assinalada por uma modificação no comportamento de χ para $T < T_f$, onde χ diminui do decréscimo de T . Resumidamente, este pico marcado indica uma transição VS/PM caracterizada por uma magnetização local espontânea não nula, atribuída a existência de momentos congelados em decorrência da frustração.

Em adição, a partir da figura 2.2, uma discussão acerca do comportamento de χ

¹ Temperatura a qual o material perde a magnetização permanente, ficando somente com a magnetização induzida.

Figura 2.2 – a) Susceptibilidade magnética do Cu%Mn em função da temperatura (T) para as concentrações de Mn 1,08% e 2,02%. b) Dependência da frequência na susceptibilidade em função da temperatura, frequência menor resulta em uma amplitude maior.



Fonte: a) (NAGATA; KEESOM; HARRISON, 1979), b) (HÜSER *et al.*, 1983).

para $T < T_f$ e em torno de T_f é realizada em detalhes. Na figura 2.2a) observam-se outras características experimentais VS importantes: a remanência² e dependência do experimento. Nos experimentos são utilizados os protocolos ZFC e FC (“Zero Field Cooling” e “Field Cooling”, respectivamente). No protocolo ZFC, inicialmente a amostra é resfriada a campo magnético nulo, para posterior aplicação do campo magnético externo fixo, em meio a elevação da temperatura do sistema. Já no protocolo FC, a amostra é resfriada com campo magnético externo aplicado. Em particular para o sistema CuMn, é visto na figura 2.2a) o comportamento de χ para os protocolos ZFC (com setas com uma direção) e FC (com setas em duas direções) em duas concentrações de Mn (2,02% e 1,08%). Podemos ver que para campo zero (ZFC) e com campo aplicado (FC) para $T > T_f$, é apresentado um comportamento correspondente a lei de Curie, em que χ é igual a aproximadamente o inverso da temperatura ou $\chi \sim 1/T$, o que assinala uma fase paramagnética. Adicionalmente, uma análise mais cuidadosa deve ser realizada para $T < T_f$. Na curva ZFC o sistema foi resfriado abaixo da temperatura T_f na ausência de um campo magnético externo. Entretanto, à medida que aumentamos a temperatura com campo aplicado, a χ do sistema também aumenta até T_f , conforme indicado pelas linhas (b) e (d). Já no protocolo FC, o material em certa temperatura $T > T_f$ é colocado sob ação de um campo magnético externo aplicado, e posteriormente resfriado até uma temperatura $T < T_f$. Em seguida, retira-se o campo magnético anteriormente aplicado, verificando-se assim uma magnetização remanente no material usando o protocolo FC, dada

² A indução magnética que permanece no sistema após a remoção do campo externo aplicado.

pelas linhas (a) e (c). Nesse caso, susceptibilidade permanece relativamente inalterada com a mudança de temperatura para $T < T_f$. Isso sugere um congelamento dos momentos magnéticos em uma determinada direção. Basicamente, podemos concluir que na fase PM os momentos foram alinhados com o campo externo. A partir do resfriamento até abaixo de T_f , houve o congelamento dos momentos, com as orientações sendo preservadas, como indica o protocolo FC.

Para finalizar a discussão acerca das características experimentais associadas a fase VS, a figura 2.2b) é apresentada. Nesta, é discutida a dependência da frequência. Para isso, consideramos um campo externo oscilatório $h = h_0 \cos(\omega t)$, onde h_0 é a amplitude do campo e ω a frequência, esse campo induz uma magnetização no material que pode ser dada por

$$m = m_0 \cos(\omega t + \phi) \quad (2.4)$$

$$= m_0 \cos(\omega t) \cos(\phi) - m_0 \sin(\omega t) \sin(\phi), \quad (2.5)$$

sendo m_0 a amplitude da magnetização, ϕ uma constante de fase e t o tempo. Em termos do campo externo aplicado sobre o material, a equação se torna

$$m = h_0 \chi' \cos(\omega t) - h_0 \chi'' \sin(\omega t), \quad (2.6)$$

sendo a susceptibilidade real e imaginária dada por

$$\chi' = \frac{m}{h_0} \cos(\phi), \quad \chi'' = \frac{m}{h_0} \sin(\phi), \quad (2.7)$$

ou a magnetização na forma complexa

$$m = h \chi_0 e^{i\omega t}. \quad (2.8)$$

Conforme podemos observar nas componentes real (χ'), responsável pela resposta dos momentos, e imaginária (χ''), atribuída a absorção térmica do material, $\chi(\omega, T) = \chi'(\omega, T) + i\chi''(\omega, T)$. Este tipo de análise está ligada a dos sistemas VS. Particularmente, observa-se que o pico das componentes é alterado de acordo com a frequência aplicada no sistema. A partir da diminuição da frequência ω a amplitude da parte real aumenta, enquanto a da parte imaginária diminui. Para frequências suficientemente baixas, a dependência da frequência de χ' tende a desaparecer, indicando que um limite de equilíbrio para χ pode ser alcançado. Logo, as condições em que o experimento é realizado são importantes para definição da fase VS em determinados compostos (BINDER; YOUNG, 1986).

3 DESCRIÇÃO DE MUITOS CORPOS E SUAS INTERAÇÕES

Para entendermos os aspectos da desordem e frustração para a fase VS, faremos uma pequena revisão acerca dos métodos estatísticos para descrição de sistemas de muitos corpos. Essencialmente, o discernimento das interações entre elementos microscópicos permite a compreensão das propriedades macroscópicas. Em outras palavras, a mecânica estatística tem como objetivo calcular a média térmica de uma quantidade física usando distribuição de probabilidade (NISHIMORI, 2001). Um ponto importante dessa discussão diz respeito a descrição de transições de fases magnéticas dentro de um formalismo de campo médio, em que todas as interações de muitos corpos são substituídas por uma única interação efetiva. Neste contexto, primeiramente a descrição de um material PM, ferromagnético (FM) ou antiferromagnético (AFM) é realizada por meio da orientação dos momentos magnéticos (spins) e das interações de troca entre os momentos (J). Estes sistemas procuram minimizar a energia, com isso para diferentes interações J surgem diferentes orientações de spin. Por exemplo, em uma rede quadrada, cada spin representado por S_i pode ter orientação \uparrow ou \downarrow . Um spin pode então interagir com o seu vizinho j mediante a variável de interação J_{ij} , tal que o sistema tende a minimizar a energia

$$E_{ij} = -J_{ij}S_iS_j. \quad (3.1)$$

Por exemplo, em um material dito paramagnético os spins S_i não interagem com seus vizinhos S_j . Com isso, a variável de interação J desta rede quadrada é igual a zero

$$J = (J_{12}, J_{23}, J_{34}, J_{41}) = (0, 0, 0, 0). \quad (3.2)$$

Logo, os spins estão livres em sua orientação, as quais flutuam com o tempo. Em função da desordem térmica essa orientação é aleatória e acaba por resultar em uma magnetização total nula.

Em materiais FM a interação J entre os spins é dita positiva, logo a forma de J é

$$J = (+, +, +, +), \quad (3.3)$$

com isso os spins tendem a se orientar paralelamente em uma determinada direção, criando uma magnetização não nula, onde os spins podem assumir as configurações

$$S = (S_1, S_2, S_3, S_4) = \{(\uparrow, \uparrow, \uparrow, \uparrow), (\downarrow, \downarrow, \downarrow, \downarrow)\}. \quad (3.4)$$

Na fase AFM essa interação J entre os spins vizinhos acontece em caráter negativo, com J igual

$$J = (-, -, -, -). \quad (3.5)$$

Para minimizar a energia acontece um alinhamento antiparalelo entre os spins, criando uma inversão entre as orientações, nas formas

$$S = \{(\uparrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow), (\downarrow, \uparrow, \downarrow, \uparrow)\}. \quad (3.6)$$

A partir do entendimento do papel das interações de troca, diversos modelos foram criados para entendimento dos fenômenos magnéticos. Como uma das principais áreas da Física, a Mecânica Estatística tem sido responsável pela introdução dos conceitos previamente discutidos, bem como é capaz de apresentar bons resultados para diversos problemas de muitos corpos. Logo, a seguir diversos detalhes acerca da Mecânica Estatística são apresentados. Adicionalmente, um dos modelos mais utilizados na descrição de sistemas de muitos corpos, o **Modelo de Ising** (ISING, 1925) com interação fixa, é examinado.

3.1 Mecânica Estatística

Para a descrição de sistemas magnéticos, onde temos um grande número de entidades, como os sítios magnéticos, utilizamos de teorias estatísticas para a descrição destes sistemas em contato com um reservatório térmico. Na Mecânica Estatística, o objetivo central é o cálculo das médias térmicas de uma quantidade física, por meio da distribuição de probabilidade

$$P(S) = \frac{e^{-\beta H}}{Z}, \quad (3.7)$$

em que H representa o hamiltoniano do sistema de interesse como, por exemplo, magnético. Adicionalmente, $\beta = 1/k_B T$ e Z é a função de partição do sistema, a qual equaciona a forma com que as probabilidades são divididas entre microestados distintos, levando em consideração suas energias individuais. Matematicamente, Z é expresso como:

$$Z = \sum_{S_1=\pm} \sum_{S_2=\pm} \dots \sum_{S_N=\pm} e^{-\beta H} = \text{Tr} e^{-\beta H}, \quad (3.8)$$

sendo chamada de **função de partição normalizada**, pois a constante de Boltzmann (k_B) é tomada como um.

Com a função de partição é possível fazer a conexão com a Termodinâmica a partir da obtenção da energia livre de Helmholtz F . Na Mecânica Estatística, essa quantidade é dada por

$$F = -T \ln Z. \quad (3.9)$$

Por meio de F , as quantidades termodinâmicas desejadas podem ser encontradas, como os parâmetros de ordem, susceptibilidades, calor específico, entropia entre outros.

3.2 Modelo de Ising e parâmetros de ordem

O modelo de Ising, muito conhecido na Física em Mecânica Estatística (SALINAS, 2005), se propõe, entre outros, a modelar transições de fase FM/PM separadas por uma temperatura crítica T_c . No modelo, utilizado para a descrição da abordagem microscópica, as características associadas de representação de momentos magnéticos, e a interação entre os momentos (J fixo), são incorporadas. Nesse caso, utiliza-se de um hamiltoniano dado pela

soma sobre todos os pares de sítios diferentes (i,j) , $(i = 1, \dots, N; j = 1, \dots, N; i \neq j)$ e da soma de spins acoplados ao termo de campo externo, dada por

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_{i=1}^N S_i, \quad (3.10)$$

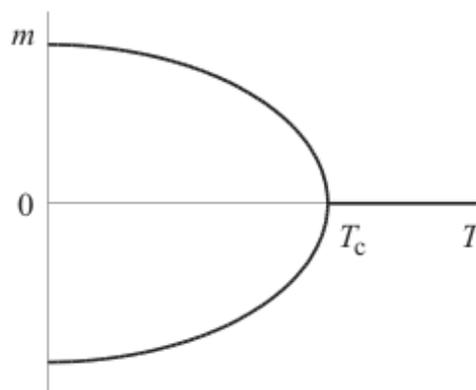
onde J é a variável de interação, podendo ser ela positiva, $J > 0$, ou negativa, $J < 0$, h é o campo externo, N o número total de spins do sistema e S é o valor do spin, podendo ser $+1$ ou -1 . O primeiro termo da a energia do acoplamento entre os sítios, que pode gerar o estado ferromagnético com $J > 0$ e o segundo termo é a energia do acoplamento dos sítios com o campo externo.

Basicamente, na abordagem da Mecânica Estatística, se procura a descrição de medidas macroscópicas por meio de grandezas microscópicas. Por exemplo, o parâmetro de ordem procura relacionar a média de uma certa quantidade microscópica, tal como os momentos magnéticos, com uma medida macroscópica. Essencialmente, a magnetização total do sistema m é definida como

$$m = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N S_i \right\rangle = \frac{1}{N} \text{Tr} \left(\left(\sum_i S_i \right) P(S) \right). \quad (3.11)$$

A partir da determinação do parâmetro de ordem, o comportamento da magnetização é mostrado na figura 3.1. A partir da interpretação do resultado, observa-se que em uma dada temperatura $T < T_c$, existe uma magnetização espontânea do sistema ($m \neq 0$), representando um estado ferromagnético, e quando $T > T_c$ a magnetização total se anula ($m = 0$), obtendo-se uma fase paramagnética. Em particular, o modelo de Ising pode ser resolvido por meio da aproximação de alcance infinito, a qual é discutida a seguir.

Figura 3.1 – Magnetização depende da temperatura.



Fonte: (NISHIMORI, 2001).

3.2.1 Modelo de alcance infinito - Teoria de campo médio

A teoria de campo médio consiste em negligenciar flutuações das variáveis microscópicas, focando a atenção em seus valores médios. Nessa situação, o problema de muitos corpos é reduzido ao problema de um único corpo sob ação de um campo efetivo. Esta aproximação, levando em conta que no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, permite que o traço possa ser aplicado para o cálculo de Z e posteriormente da energia livre.

Quando consideramos o modelo de Ising de alcance infinito, essa teoria aproximativa acaba por fornecer uma solução exata para o problema (NISHIMORI, 2001). O hamiltoniano do modelo de alcance infinito é dado por

$$H = -\frac{J}{2N} \sum_{i \neq j} S_i S_j - h \sum_i S_i. \quad (3.12)$$

Na equação (3.12), $i \neq j$ implica que um mesmo spin não pode interagir com ele mesmo, e o fator 2 é colocado no denominador para não contabilizar a dupla interação, $(S_1 S_2 + S_2 S_1)/2 = S_1 S_2$. Na abordagem de campo médio, o somatório de dois sítios é reduzido a um somatório ao quadrado de um único sítio, o que resulta em

$$H = -\frac{J}{2N} \left(\sum_i S_i \right)^2 + \frac{J}{2} - h \sum_i S_i. \quad (3.13)$$

Aplicando esse hamiltoniano na função de partição, como expresso na equação (3.8), obtemos

$$Z = \text{Tr} \exp \left(\frac{J\beta}{2N} \left(\sum_i S_i \right)^2 - \frac{J\beta}{2} + h\beta \sum_i S_i \right). \quad (3.14)$$

Para que a soma sobre todas as configurações de spin (traço) possa ser realizada, o somatório elevado ao quadrado é analisado cuidadosamente. Basicamente, o termo quadrado é linearizado por meio da transformação de Hubbard-Stratonovich (HUBBARD, 1959), que consiste na definição da integral dada pela equação

$$e^{ax^2/2} = \sqrt{\frac{aN}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dm e^{-Nam^2/2 + \sqrt{N}amx}, \quad (3.15)$$

$$a = \beta J, \quad x = \sum_i \frac{S_i}{\sqrt{N}}. \quad (3.16)$$

Logo, é introduzido o campo auxiliar m , também conhecido como parâmetro de ordem, e a função de partição, depois de aplicar o traço sobre a configuração de spins se reduz para

$$Z = \sqrt{\frac{\beta J N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dm \exp \left(-\frac{N\beta J m^2}{2} + N \ln 2 \cosh \beta(Jm + h) \right). \quad (3.17)$$

Levando em consideração o limite termodinâmico, onde $N \rightarrow \infty$, e a aproximação do integrando no seu mais alto valor (método ponto de sela (ZILL, 2016)), temos que

$$\frac{\partial}{\partial m} \left(-\frac{\beta J m^2}{2} + \ln 2 \cosh \beta(Jm + h) \right) = 0. \quad (3.18)$$

Fazendo isto, chegamos ao resultado exato para o valor de m ,

$$m = \tanh \beta(Jm + h). \quad (3.19)$$

Conforme discutido, fica clara a importância da abordagem estatística para a descrição de transições de fase magnética. A partir da utilização de conceitos microscópicos, foi possível a obtenção da descrição de uma transição de fase FM/PM com uma teoria que envolve uma interação de troca fixa. O comportamento do parâmetro de ordem m pode ser visto na figura 3.1. Neste resultado, observa-se uma transição FM/PM em $T_c/J = 1$.

Para abordar a fase VS, no contexto de um modelo estatístico as noções de interação de troca aleatória, desordem e frustração devem ser entendidas.

3.3 Desordem e Frustração

A característica especial da fase VS pode ser associada a uma interação de troca aleatória (BINDER; YOUNG, 1986). Como visto anteriormente, as interações das fases FM e AFM são ditas de longo alcance. Nestes sistemas, a mediação é realizada por uma variável de interação J dita fixa para qualquer distância ou direção. Na fase VS essa variável J tem caráter oscilatório, podendo depender da distância e direção $J = J(\vec{r})$. Como foi visto na seção 2.1, esse tipo de variação da interação tem origem nas impurezas do material. Por meios teóricos, esta interação de troca é dada pela interação RKKY (RUDERMAN; KITTEL, 1954), que oscila em função da distância

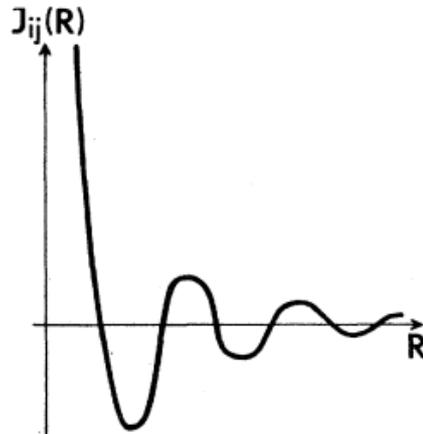
$$J(\vec{r}) = J_0 \frac{\cos(2k_F \vec{r} + \phi_0)}{(k_F \vec{r})^3}, \quad \vec{r} \rightarrow \infty, \quad (3.20)$$

onde J_0 é a constante de troca, ϕ_0 uma constante de fase e k_F o número de onda de Fermi do metal (BINDER; YOUNG, 1986).

Como podemos ver pela Figura 3.2, a interação de troca entre os sítios ij é dependente da distância entre os sítios, em certa distância a interação possui um sinal positivo, indicando uma orientação paralela dos sítios. Em outra distância a interação possui um sinal negativo, mostrando uma orientação antiparalela e por fim em certas distâncias J_{ij} é zero, mostrando uma não interação dos sítios. Esse tipo de **desordem** da interação de troca é o aspecto essencial para o cenário em que se obtém a fase VS, pois desordem pode induzir a ocorrência da chamada frustração.

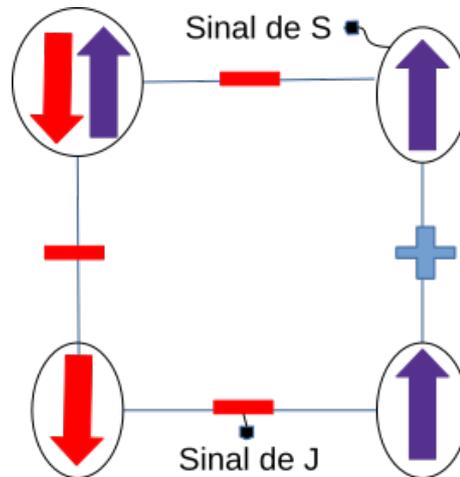
Essencialmente, esta frustração é fruto da competição entre as interações, como mostra a figura 3.3, a qual gera um congelamento do sistema. Tomando a figura 3.3 como exemplo para entender o papel da desordem na frustração. Temos a representação da rede quadrada, em que seus vértices representam os sítios, com momentos definidos por \uparrow ou \downarrow . Em adição, são apresentadas as interações entre os sítios da rede, que podem ser positivas $+$ e negativas $-$, gerando alinhamentos paralelos ($\uparrow\uparrow$, $\downarrow\downarrow$) e/ou antiparalelos ($\uparrow\downarrow$, $\downarrow\uparrow$) entre os momentos dos sítios. Pode ser verificado que dependendo do momento de um dado sítio, e considerando

Figura 3.2 – Interação de troca RKKY com J_{ij} em função da distância R .



Fonte: (BINDER; YOUNG, 1986)

Figura 3.3 – Rede quadrada com competição entre interações, gerando frustração no sistema.



Fonte: o autor (2021).

um número ímpar de interações, um dos sítios não consegue satisfazer todas as interações. Nesse caso, há uma competição de interações a qual é devida à aleatoriedade ou desordem das interações. Conseqüentemente, verifica-se que o spin de um dado sítio é frustrado, sendo incapaz de satisfazer simultaneamente todas as interações.

A fase VS é, então, uma fase em que a soma líquida dos momentos é zero, como na fase PM. Novamente, as orientações dos sítios são aleatórias. Mas o mais importante: estas não flutuam no tempo, em função do congelamento dos sítios causado pela frustração. Para o entendimento teórico, alguns modelos estatísticos introduziram competição via interação de troca, mostrando a ocorrência do congelamento dos sítios e o aparecimento da fase VS (FISCHER; HERTZ, 1991). Como veremos, a descrição dessa fase pode ser feita pelos

ditos modelos de Ising desordenados. Entre eles, está o modelo Sherrington-Kirkpatrick (SK) (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1975), um dos mais conhecidos modelos para descrever a fase VS.

3.3.1 Modelo SK

O modelo SK proposto por Sherrington e Kirkpatrick (1975) considera um modelo de interações infinitas, como visto na seção anterior, levando agora em conta uma variável de interação aleatória J_{ij} , que segue uma distribuição de probabilidade gaussiana. Em particular, a interação aleatória é aquela responsável pela introdução da desordem no sistema. Neste modelo, o hamiltoniano é

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N J_{ij} S_i S_j - h \sum_i^N S_i, \quad S_i = \pm 1, \quad (3.21)$$

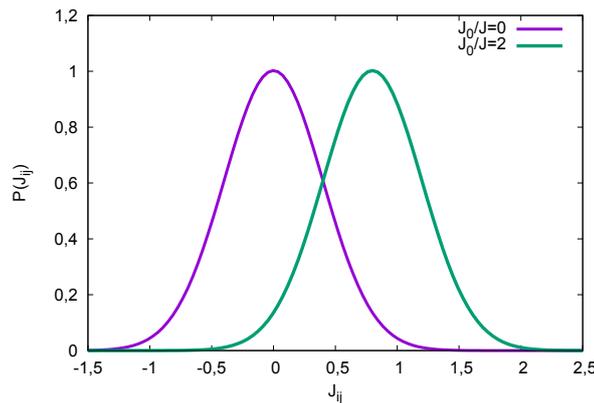
onde a distribuição de probabilidade, do tipo gaussiana como mostra a Figura 3.4, é dado por

$$P(J_{ij}) = \frac{\exp\left(-\frac{(J_{ij} - J_0)^2}{2J^2}\right)}{\sqrt{2\pi}J}, \quad (3.22)$$

sendo a média e a variância da distribuição, proporcional a $1/N$,

$$[J_{ij}] = \frac{J_0}{N}, \quad [(\Delta J_{ij})^2] = \frac{J^2}{N}. \quad (3.23)$$

Figura 3.4 – Distribuição de probabilidade P em função de J_{ij} para valores de $J_0/J = 0$ e $J_0/J = 2$.



Fonte: o autor (2021).

3.3.1.1 Teoria de réplica de simetria

O tratamento da desordem, visto no modelo SK, e faturamento empregado no modelo Hopfield neste TCC, faz emprego do método das réplicas, que consiste no uso da identidade

$$\ln x = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{x^n - 1}{n}. \quad (3.24)$$

O objetivo é o cálculo da quantidade $[Z^n]$ no lugar da quantidade $[\ln Z]$, tecnicamente mais complicada de se resolver. Neste caso, a definição da energia livre se torna

$$[F] = -T \lim_{n \rightarrow 0} \frac{[Z]^n - 1}{n}, \quad (3.25)$$

em que a função de partição com n réplicas $[Z^n]$ para o problema SK é

$$[Z^n] = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\prod_{i < j} dJ_{ij} P(J_{ij}) \right) \text{Tr} \exp \left(\beta \sum_{i < j} J_{ij} \sum_{\alpha=1}^n S_i^\alpha S_j^\alpha + \beta h \sum_i \sum_{\alpha=1}^n S_i^\alpha \right). \quad (3.26)$$

A partir da redução do problema de dois sítios para um único sítio, e colocando $[Z^n]$ na equação (3.25) da energia livre obtém-se

$$F = -T \lim_{n \rightarrow 0} n^{-1} \left(\exp \left[\frac{J^2 N^2 n}{4T^2} \right] \times \text{Tr}_n \exp \left[\frac{J^2}{2T^2} \sum_{\alpha\beta} (\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta)^2 + \frac{J_0}{2T} \sum_\alpha (\sum_i S_i^\alpha)^2 + \frac{hN}{T} \sum_i \sum_\alpha S_i^\alpha \right] - 1 \right), \quad (3.27)$$

onde α e β são os índices das réplicas para o rótulo n . Em seguida, outro passo importante envolve a redução dos termos quadráticos através das integrais gaussianas, resultando em

$$[Z^n] = \exp \left(\frac{N\beta^2 J^2 n}{4} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{\alpha < \beta} dq_{\alpha\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_\alpha dm_\alpha \times \exp \left(\frac{-N\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{N\beta J_0}{2} \sum_\alpha m_\alpha^2 + N \ln \text{Tr} e^L \right), \quad (3.28)$$

onde L é dado por

$$L = \beta^2 J^2 \sum_{\alpha < \beta} q_{\alpha\beta} S^\alpha S^\beta + \beta \sum_\alpha (J_0 m_\alpha + h) S^\alpha. \quad (3.29)$$

No limite $N \rightarrow \infty$, e a partir do método ponto de sela, as integrais são resolvidas, obtendo então a energia livre

$$\begin{aligned} -\beta[f] &= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{[Z^n] - 1}{nN} \\ &= \lim_{n \rightarrow 0} \left\{ -\frac{\beta^2 J^2}{4n} \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{\beta J_0}{2n} \sum_\alpha m_\alpha^2 + \frac{1}{4} \beta^2 J^2 + \frac{1}{n} \ln \text{Tr} e^L \right\}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

As condições ponto de sela que geram a minimização da energia livre em acordo com as variáveis m_α e $q_{\alpha\beta}$ são

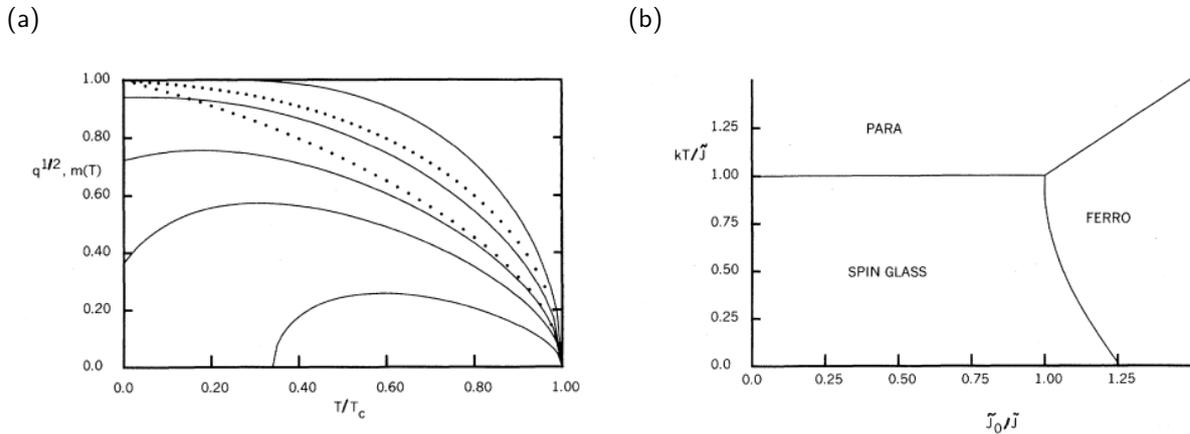
$$m_\alpha = \frac{\text{Tr} S^\alpha e^L}{\text{Tr} e^L} = \langle S^\alpha \rangle_L \quad (3.31)$$

e

$$q_{\alpha\beta} = \frac{\text{Tr} S^\alpha S^\beta e^L}{\text{Tr} e^L} = \langle S^\alpha S^\beta \rangle_L, \quad (3.32)$$

sendo m o parâmetro de magnetização do sistema e q o parâmetro VS. O resultado dos parâmetros $q^{1/2}$, m em função da temperatura, dado para diferentes valores de J_0/J , são apresentados na figura 3.5(a). Com a descrição dos parâmetros de ordem para diferentes valores de temperatura e J_0/J , é obtido o diagrama de fases, dada pela figura 3.5(b). Salienta-se que a partir do ferramental teórico proposto, o modelo SK pode apresentar as fases VS, PM e FM dependendo do ajuste dos parâmetros J_0/J e T/J . Pelo diagrama é possível identificar transições do tipo VS/PM, VS/FM/PM e FM/PM, sendo o estado fundamental do modelo SK a fase VS para $J_0 < 1,25J$. Em particular, no formalismo Sherrington e Kirkpatrick obtemos

Figura 3.5 – (a) Magnetização (m) e parâmetro vidro de spin ($q^{1/2}$) em função de T/T_c , onde as linhas sólidas é m para valores de J_0/J de ∞ , 2, 1,5, 1,3 e 1,1, de cima para baixo e $q^{1/2}$, linhas pontilhadas, com valores de 2 e 0 para J_0/J . (b) Diagrama de fases do modelo SK em função de $k_B T/J$ e J_0/J .



Fonte: (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1975).

um pico da susceptibilidade magnética na temperatura de transição, característica de sistemas vidro de spin, como mostra a figura 3.6.

Este modelo foi amplamente usado para descrições de compostos e outras fases, entre eles está o composto de Cério ($CeNi_{1-x}Cu_x$, $x \leq 0,8$) (SAL *et al.*, 1997). Um modelo Ising SK fermiônico com o hamiltoniano dado por

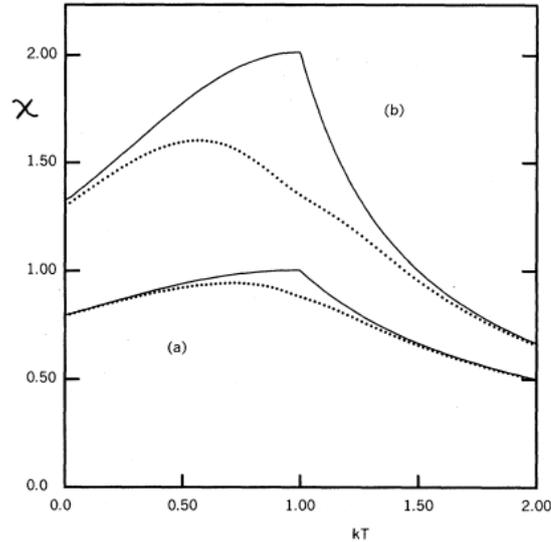
$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k n_{k\sigma} + \epsilon_0 \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma}^f \quad (3.33)$$

$$+ J_K \sum_i [S_{fi}^+ s_i^- + S_{fi}^- s_i^+] - \sum_{i,j} J_{ij} S_{fi}^z S_{fj}^z, \quad (3.34)$$

onde o termo com J_K é responsável pela fase Kondo e os spins são escritos como operadores (MAGALHÃES *et al.*, 2002). A fase Kondo ou efeito Kondo surge quando a resistência elétrica de um composto aumenta com a diminuição da temperatura, a partir de uma temperatura crítica T_K , por consequência da existência de impurezas magnéticas no sistema.

Como podemos ver na figura 3.7, o modelo SK fermiônico é utilizado para produzir as fase VS, FM, PM e Kondo. Conforme o aumento de J_0/J é observado o aparecimento da fase FM e uma região mista (FM+VS). Entretanto, para $J_0/J = 2,2$, a fase VS não esta mais

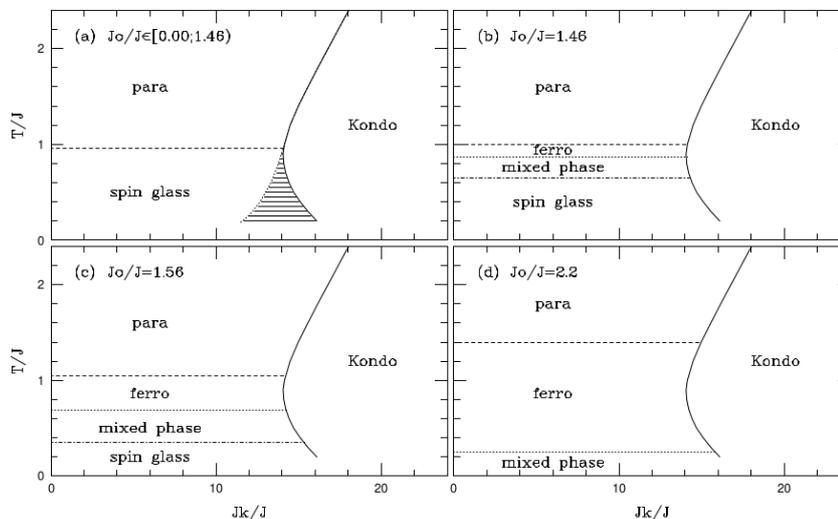
Figura 3.6 – Susceptibilidade magnética (χ) em função da temperatura (kT), linhas sólidas a campo zero, linhas pontilhadas a $h = 0,1J$, na curva (a) para $J_0/J = 0$ e na curva (b) para $J_0/J = 0,5$.



Fonte: (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1975).

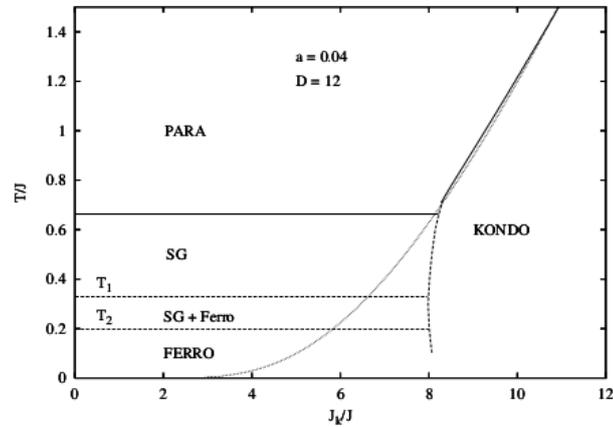
presente. Contudo, tendo em vista que a fase VS é o estado fundamental neste modelo para baixos J_0/J , é necessária uma abordagem diferente para a descrição do composto de Cério (MAGALHÃES *et al.*, 2002). Para isso foi investigado o modelo Hopfield fermiônico. Neste modelo, um estado fundamental FM com transição para VS é encontrado. Logo, o modelo Hopfield apresenta um estado fundamental compatível com a descrição do composto de Cério.

Figura 3.7 – Diagrama de fases em função de T/J e J_k/J para diferentes valores de J_0/J , com o aparecimento da fase Kondo, descrito por Magalhães *et al.*.



Fonte: (MAGALHÃES *et al.*, 2002).

Figura 3.8 – Diagrama de fases em função de T/J e J_k/J para $\alpha = 0,04$, com o aparecimento da fase Kondo, descrito por Magalhães *et al.*.



Fonte: (MAGALHÃES *et al.*, 2006).

Apresentado por Magalhães *et al.*, a partir do modelo Hopfield fermiônico, foi possível a obtenção de uma fase fundamental FM com transições FM/VS, como mostra a Figura 3.8. A inserção de uma variável de ajuste de frustração α mostrou resultados compatíveis com a descrição experimental do composto de Cério (SAL *et al.*, 1997). A partir das informações discutidas, verifica-se a importância do estudo e entendimento características do modelo Hopfield, para posterior aplicação na descrição de compostos reais.

4 MODELO HOPFIELD

O modelo Hopfield, desenvolvido em 1982 (HOPFIELD, 1982), tinha como primeira funcionalidade modelar interações binárias, objetivando criar um modelo de interações em uma rede neural. Neste sistema, as entidades fundamentais podem apresentar valores de ± 1 , sendo interligadas por uma rede com padrão de troca também com valores ± 1 .

Entretanto, devido as características binárias, este mesmo modelo tem sido empregado para entendimento e modelagem de sistemas magnéticos. Por exemplo, este modelo tem sido usado, inclusive recentemente (MORAIS *et al.*, 2014), para o entendimento da fase VS. Basicamente, a este modelo é incorporado a competição de interações, levando ao surgimento da desordem que gera frustração, uma das características da fase VS.

O modelo tem um hamiltoniano dado pela equação (4.1)

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N J_{ij} S_i S_j - h \sum_i^N S_i, \quad (4.1)$$

onde S representa o estado do sítio, sendo ele $+1$ ou -1 , h o campo externo aplicado sobre todos os sítios, N o número total de sítios e J_{ij} a variável de interação entre os sítios ij . No modelo Hopfield essa variável J_{ij} é dada em função da regra de *Hebb*.

4.0.1 Regra de Hebb

A regra de Hebb (HEBB, 1949) ou teoria hebbiana indica que interações de troca que ativam juntas tendem a permanecer ativas. No modelo, essa regra é introduzida pela variável J_{ij} dada por

$$J_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu}^P \xi_i^{\mu} \xi_j^{\mu}, \quad (4.2)$$

sendo ξ a variável aleatória de padrão da troca entre os sítios, podendo ser $+1$ ou -1 e P o número máximo de padrões. Quando ξ_i^{μ} e ξ_j^{μ} são ativos juntos e com mesmo sinal

$$(\xi_i^{\mu}, \xi_j^{\mu}) = \{(+,+); (-,-)\}, \quad (4.3)$$

a interação é dita positiva. Logo, os sítios se orientam paralelamente. Para padrões ativos de forma simultânea, e com sinais diferentes

$$(\xi_i^{\mu}, \xi_j^{\mu}) = \{(+,-); (-,+)\}, \quad (4.4)$$

tal que a interação é negativa. Com isso, os sítios tendem a se orientar antiparalelamente. Quando os padrões não são ativos simultaneamente, a interação não acontece. Com essa nova variável, temos um modelo em que é possível o controle da desordem que gera frustração. Como veremos posteriormente, tal controle é dado por meio do parâmetro $\alpha = P/N$, que resulta do tratamento analítico do modelo, sendo demonstrado nas próximas seções.

4.1 Teoria de Campo Médio

O tratamento analítico do modelo Hopfield é similar ao modelo de Ising de alcance infinito. Com o hamiltoniano dado por

$$H = -\frac{1}{2N} \sum_{i \neq j}^N \sum_{\mu}^P \xi_i^{\mu} \xi_j^{\mu} S_i S_j, \quad (4.5)$$

é o acoplamento entre sítios, dado por meio dos padrões ξ .

Aplica-se o campo médio, reduzindo-se o somatório de dois sítios para um único sítio. Consequentemente, obtemos a expressão

$$H = -\frac{1}{2N} \sum_{\mu}^P \left(\sum_{i=1}^N \xi_i^{\mu} S_i \right)^2 + \frac{P}{2}, \quad (4.6)$$

em que o termo adicional $P/2$ é adicionado para cancelar os termos $i = j$.

Utilizando do formalismo da Mecânica Estatística obtemos a expressão para a função de partição

$$Z = \text{Tr} \exp \left(\frac{\beta}{2N} \sum_{\mu}^P \left(\sum_{i=1}^N \xi_i^{\mu} S_i \right)^2 - \frac{P\beta}{2} \right). \quad (4.7)$$

para aplicação do traço sobre os sítios, e com auxílio da integral gaussiana, linearizamos o termo quadrático, obtendo assim

$$Z = \left(\frac{\beta N}{2\pi} \right)^{P/2} e^{-\beta P/2} \text{Tr} \prod_{\mu}^P \int_{-\infty}^{+\infty} dm^{\mu} \exp \left(-\frac{1}{2} N \beta \sum_{\mu}^P m_{\mu}^2 + \beta \sum_{\mu}^P m_{\mu} \sum_{i=1}^N S_i \xi_i^{\mu} \right). \quad (4.8)$$

Aplicando agora o traço sobre os estado de $S = \pm 1$, a nossa função de partição fica

$$Z = \left(\frac{\beta N}{2\pi} \right)^{P/2} e^{-\beta P/2} \prod_{\mu}^P \int_{-\infty}^{+\infty} dm^{\mu} \exp \left(-\frac{1}{2} N \beta \sum_{\mu}^P m_{\mu}^2 + \sum_{i=1}^N \ln 2 \cosh \left(\beta \sum_{\mu}^P m_{\mu} \xi_i^{\mu} \right) \right), \quad (4.9)$$

escrevendo de forma compacta para os termos com μ , onde $\mathbf{m} = (m^1, m^2, \dots, m^P)^t$ e $\xi_{\mathbf{i}} = (\xi_{\mathbf{i}}^1, \xi_{\mathbf{i}}^2, \dots, \xi_{\mathbf{i}}^P)^t$, logo

$$Z = \left(\frac{\beta N}{2\pi} \right)^{P/2} e^{-\beta P/2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{m} \exp \left(-\frac{1}{2} N \beta \mathbf{m}^2 + \sum_{i=1}^N \ln 2 \cosh(\beta \mathbf{m} \cdot \xi_{\mathbf{i}}) \right). \quad (4.10)$$

Levando em consideração o limite termodinâmico onde $N \rightarrow \infty$ e P finito, como mostra Müller e Reinhardt (1990), a função de partição é da forma

$$Z = e^{-\beta F} = \left(\frac{\beta N}{2\pi} \right)^{P/2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{m} e^{-N\beta f(\mathbf{m})}. \quad (4.11)$$

Logo, a equação fundamental do sistema é

$$f(\mathbf{m}) = \frac{1}{2} \mathbf{m}^2 - \frac{1}{\beta N} \sum_{i=1}^N \ln 2 \cosh(\beta \mathbf{m} \cdot \xi_{\mathbf{i}}), \quad (4.12)$$

sendo ela a energia livre de Helmholtz. Aplicando a minimização da energia em função do parâmetro de ordem \mathbf{m}

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{m}} = 0 \quad (4.13)$$

$$= \mathbf{m} - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{2\xi_i \sinh(\beta \mathbf{m} \cdot \xi_i)}{2 \cosh(\beta \mathbf{m} \cdot \xi_i)} \quad (4.14)$$

$$= \mathbf{m} - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i \tanh(\beta \mathbf{m} \cdot \xi_i), \quad (4.15)$$

$$\rightarrow \mathbf{m} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i \tanh(\beta \mathbf{m} \cdot \xi_i). \quad (4.16)$$

Comparativamente ao campo médio usual, sabemos que o parâmetro de ordem \mathbf{m} corresponde ao vetor magnetização dos diferentes padrões. Portanto, podemos afirmar que

$$m^\mu = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i \xi_i^\mu. \quad (4.17)$$

Segundo Nishimori essa soma na eq (4.16) é chamada média sobre a desordem na teoria de VS. Adota-se a notação [...] para a média da desordem. Logo, temos que

$$f(\mathbf{m}) = \frac{1}{2} \mathbf{m}^2 - \frac{1}{\beta} [\ln 2 \cosh(\beta \mathbf{m} \cdot \xi)], \quad (4.18)$$

$$\mathbf{m} = [\xi \tanh(\beta \mathbf{m} \cdot \xi)]. \quad (4.19)$$

Fazendo a análise de um único padrão da rede $P = 1$ e sabendo que o padrão pode assumir $\xi = \pm 1$ a equação de estado fica da forma

$$m = [\xi^1 \tanh(\beta m \xi^1)] \quad (4.20)$$

$$= \frac{1}{2} \{ (+1) \tanh(\beta m) + (-1) \tanh(-\beta m) \} \quad (4.21)$$

$$= \tanh(\beta m). \quad (4.22)$$

Pode ser observado assim que recaímos na mesma equação de estado do modelo de Ising, onde temos a solução não trivial $m \neq 0$ para $T < 1$, assinalando a fase ferromagnética. Por outro lado, a solução trivial $m = 0$ para $T > 1$ indica a fase paramagnética.

Para tratar o modelo Hopfield onde o número de padrões é alto, sendo ele proporcional a N , a utilização de métodos mais sofisticados se torna presente.

4.2 Teoria de Réplicas

Analisado por Amit, Gutfreund e Sompolinsky (1987) o modelo Hopfield em regime de alto número de padrões P mostrou o aparecimento da fase VS, onde por meio do métodos das réplicas é possível o tratamento da desordem.

Utilizando da identidade do logaritmo, o método das réplicas consiste em substituir a média do $\ln Z$ por uma média de Z replicada n vezes. Consequentemente, a energia livre de Helmholtz pode ser escrita na forma

$$f = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1 - [Z^n]}{nN\beta}, \quad (4.23)$$

onde o cálculo da média da desordem, dado pela notação $[\dots]$, é feita sobre a função de partição levando em consideração as réplicas. Com isso, temos

$$[Z^n] = \text{Tr} \left[\exp \left(\frac{\beta}{2N} \sum_{i,j}^N \sum_{\mu}^P \sum_a^n \xi_i^\mu \xi_j^\mu S_i^a S_j^a + \beta h \sum_i^N \sum_a^n S_i^a \right) \right]. \quad (4.24)$$

Utilizando do mesmo método para reduzir a soma de dois sítios para um único sítio, como visto anteriormente, obtemos

$$[Z^n] = \text{Tr} \exp \left[\frac{\beta}{2N} \sum_{\mu}^P \sum_a^n \left(\sum_i^N \xi_i^\mu S_i^a \right)^2 - \frac{Pn\beta}{2} + \beta h \sum_i^N \sum_a^n S_i^a \right]. \quad (4.25)$$

Separando a função de partição em

$$\begin{aligned} [Z^n] &= e^{-\frac{Pn\beta}{2}} \text{Tr} \exp \left[\frac{\beta}{2N} \sum_{\mu}^{P-1} \sum_a^n \left(\sum_i^N \xi_i^\mu S_i^a \right)^2 \right] \\ &\quad \times \exp \left[\frac{\beta}{2N} \sum_a^n \left(\sum_i^N \xi_i^1 S_i^a \right)^2 + \beta h \sum_i^N \sum_a^n S_i^a \right], \end{aligned} \quad (4.26)$$

onde o primeiro termo é sobre os $P-1$ padrões e o segundo de um padrão $\mu=1$, a fim de calcular a energia livre em função de um único padrão. Usamos agora a integral gaussiana do tipo:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dm \exp(-ym^2 + xm) = \sqrt{\frac{\pi}{y}} \exp\left(\frac{x^2}{4y}\right), \quad (4.27)$$

com $x = \beta \sum_i^N S_i^a \xi_i^\mu$, $y = \frac{N\beta}{2}$ para a parte separada $x = \beta \sum_i^N S_i^a \xi_i^1$ linearizamos os termos quadráticos. Usando a propriedade $e^{x_1+x_2+\dots} = e^{x_1} e^{x_2} \dots$, os somatórios nas exponenciais são reescritos na forma de produtórios, resultando na forma

$$\begin{aligned} [Z^n] &= e^{-\frac{Pn\beta}{2}} \text{Tr} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{N\beta}{2\pi} \right)^{\frac{nP}{2}} \left(\prod_{\mu}^{P-1} \prod_a^n dm_{\mu}^a \right) \exp \left(\frac{-N\beta}{2} \sum_{\mu}^{P-1} \sum_a^n (m_{\mu}^a)^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \beta \sum_{\mu}^{P-1} \sum_a^n m_{\mu}^a \sum_i^N \xi_i^\mu S_i^a \right) \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\prod_a^n dm_1^a \right) \exp \left(\frac{-N\beta}{2} \sum_a^n (m_1^a)^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \beta \sum_a^n m_1^a \sum_i^N \xi_i^1 S_i^a + \beta h \sum_i^N \sum_a^n S_i^a \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Aplicando a média da desordem em ξ^μ (apêndice A.1) e fazendo a expansão do $\ln \cosh(x) = 1 + \frac{x^2}{2}$, obtemos

$$\begin{aligned}
[Z^n] &= e^{-\frac{Pn\beta}{2}} \text{Tr} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{N\beta}{2\pi} \right)^{\frac{nP}{2}} \left(\prod_{\mu}^{P-1} \prod_a^n dm_{\mu}^a \right) \exp \left[\frac{-N\beta}{2} \sum_{\mu}^{P-1} \sum_a^n (m_{\mu}^a)^2 \right. \\
&\quad \left. + \frac{\beta^2}{2} \sum_{\mu}^{P-1} \sum_i^N \left(\sum_a^n m_{\mu}^a S_i^a \right)^2 \right] \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\prod_a^n dm_1^a \right) \\
&\quad \times \exp \left(\frac{-N\beta}{2} \sum_a^n (m_1^a)^2 + \beta \sum_a^n m_1^a \sum_i^N \xi_i^1 S_i^a + \beta h \sum_i^N \sum_a^n S_i^a \right). \tag{4.29}
\end{aligned}$$

Reescrevendo os somatórios de m_{μ}^a como $(\sum_a^n)^2 = \sum_a^n \sum_b^n$ e $\sum_a^n (m^a)^2 = \sum_a^n \sum_b^n m^a \delta_{ab} m^b$, a função de partição é dada por

$$\begin{aligned}
[Z^n] &= e^{-\frac{Pn\beta}{2}} \text{Tr} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{N\beta}{2\pi} \right)^{\frac{nP}{2}} \left(\prod_{\mu}^{P-1} \prod_a^n dm_{\mu}^a \right) \\
&\quad \times \exp \left(\frac{-N\beta}{2} \sum_{\mu}^{P-1} \sum_a^n \sum_b^n B_{ab} m_{\mu}^a m_{\mu}^b \right) \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\prod_a^n dm_1^a \right) \\
&\quad \times \left[\exp \left(\frac{-N\beta}{2} \sum_a^n (m_1^a)^2 + \beta \sum_a^n m_1^a \sum_i^N \xi_i^1 S_i^a + \beta h \sum_i^N \sum_a^n S_i^a \right) \right], \tag{4.30}
\end{aligned}$$

onde B_{ab} é

$$B_{ab} = \delta_{ab} - \frac{\beta}{N} \sum_i^N S_i^a S_i^b. \tag{4.31}$$

Agora com essa matriz podemos usar a Integral Gaussiana em M dimensões

$$\int \left(\prod_i^M dz_i \right) \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{i,j} z_i B_{ij} z_j \right) = (2\pi)^{M/2} (\det B)^{-1/2}, \tag{4.32}$$

como a matriz B apresenta termos de $\sum S_a S_b$ é impossível aplicar seu determinante. Para reorganizar a soma entre as réplicas ab recorreremos a função delta

$$\begin{aligned}
1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dq_{ab} \delta \left(q_{ab} - \frac{1}{N} \sum_i^N S_i^a S_i^b \right) \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dq_{ab} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dr'_{ab}}{2\pi} \exp \left[ir'_{ab} \left(q_{ab} - \frac{1}{N} \sum_i^N S_i^a S_i^b \right) \right]. \tag{4.33}
\end{aligned}$$

Feito isso juntamos a função delta com os termos $\sum S_a S_b$ da função de partição e aplicando a transformação linear (encontrado no apêndice A.2), o termo com dois sítios foi substituído por q criando uma nova matriz

$$A = (1 - \beta)I - \beta q. \tag{4.34}$$

Feito isso a Integral Gaussiana em M dimensões fica

$$\begin{aligned}
&\int \left(\prod_{\mu}^{P-1} \prod_a^n dm_{\mu}^a \right) \exp \left(-\frac{1}{2} N\beta \sum_{\mu}^{P-1} \sum_{a,b} m_{\mu}^a A_{ab} m_{\mu}^b \right) \\
&= \left(\frac{2\pi}{N\beta} \right)^{\frac{1}{2}n(P-1)} (\det A)^{-\frac{P-1}{2}}. \tag{4.35}
\end{aligned}$$

Sabendo que $\det A = \exp(\text{Tr} \ln A)$, logo $[Z^n]$ fica

$$\begin{aligned}
[Z^n] &= e^{-\frac{Pn\beta}{2}} \text{Tr} \left(\frac{N\beta}{2\pi} \right)^{\frac{n}{2}} \int \left(\prod_{ab}^{a<b} dq_{ab} d\bar{r}_{ab} \right) \exp \left(-i \sum_{ab}^{a<b} \bar{r}_{ab} q_{ab} \right. \\
&+ \frac{i}{N} \sum_{ab}^{a<b} \bar{r}_{ab} \sum_i^N S_i^a S_i^b - \frac{p-1}{2} \text{Tr}_n \ln A \left. \right) \int \left(\prod_a^n dm_1^a \right) \left[\exp \left(\frac{-N\beta}{2} \sum_a^n (m_1^a)^2 \right. \right. \\
&\left. \left. + \beta \sum_a^n m_1^a \sum_i^N \xi_i^1 S_i^a + \beta h \sum_i^N \sum_a^n S_i^a \right) \right]. \quad (4.36)
\end{aligned}$$

Agrupando os termos com S para aplicar o Tr

$$\begin{aligned}
[Z^n] &= e^{-\frac{Pn\beta}{2}} \left(\frac{N\beta}{2\pi} \right)^{\frac{n}{2}} \int \left(\prod_a^n dm_1^a \right) \int \left(\prod_{ab}^{a<b} dq_{ab} d\bar{r}_{ab} \right) \\
&\times \exp \left[\frac{-N\beta}{2} \sum_a^n (m_1^a)^2 - i \sum_{ab}^{a<b} \bar{r}_{ab} q_{ab} - \frac{p-1}{2} \text{Tr}_n \ln A \right] \\
&\times \text{Tr} \left[\exp \left(\beta \sum_a^n m_1^a \sum_i^N \xi_i^1 S_i^a + \frac{i}{N} \sum_{ab}^{a<b} \bar{r}_{ab} \sum_i^N S_i^a S_i^b + \beta h \sum_i^N \sum_a^n S_i^a \right) \right]. \quad (4.37)
\end{aligned}$$

Como agora os S_i não dependem mais de seu índice (cálculo no apêndice A.3), a energia livre fica

$$\begin{aligned}
f &= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{nN\beta} (1 - [Z^n]) \\
&= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{nN\beta} \left(1 - \left(\frac{N\beta}{2\pi} \right)^{\frac{n}{2}} \int \left(\prod_a^n dm_1^a \right) \int \left(\prod_{ab}^{a<b} dq_{ab} d\bar{r}_{ab} \right) e^{-\beta N \phi} \right) \quad (4.38)
\end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
\phi &= \frac{Pn}{2N} + \frac{1}{2} \sum_a^n (m_1^a)^2 + \frac{i}{\beta N} \sum_{ab}^{a<b} \bar{r}_{ab} q_{ab} + \frac{p-1}{2\beta N} \text{Tr}_n \ln A \\
&- \frac{1}{\beta} \ln \text{Tr} \left[\exp \left(\beta \sum_a^n m_1^a \xi^1 S^a + \frac{i}{N} \sum_{ab}^{a<b} \bar{r}_{ab} S^a S^b + \beta h \sum_a^n S^a \right) \right]. \quad (4.39)
\end{aligned}$$

Utilizando o método de ponta de sela e levando em conta o limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$ temos

$$\frac{\partial \phi}{\partial m_1^a} = 0, \quad \frac{\partial \phi}{\partial q_{ab}} = 0, \quad \frac{\partial \phi}{\partial \bar{r}_{ab}} = 0 \quad (4.40)$$

logo

$$f = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \phi. \quad (4.41)$$

Aplicando $\frac{\partial \phi}{\partial m_1^a} = 0$ temos que $m_1^a = \xi^1[\langle S^a \rangle]$, fazendo para \bar{r}_{ab} obtemos $q_{qb} = [\langle S^a \rangle \langle S^b \rangle]$ (cálculo no apêndice A.4), no ponto de sela para q_{ab} , obtemos

$$\frac{\partial \phi}{\partial q_{ab}} = \frac{i}{\beta N} \sum_{ab}^{a<b} \bar{r}_{ab} + \frac{p-1}{2\beta N} \frac{\partial}{\partial q_{ab}} (\text{Tr}_n \ln A) = 0 \quad (4.42)$$

logo $\bar{r}_{ab} = i\frac{p-1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial q_{ab}} (\text{Tr}_n \ln A) \right]$. Como não podemos fazer essa derivada usando a matriz, voltamos para a representação gaussiana, onde na equação (4.35) encontramos a derivada $\beta^2 N \sum_{\mu}^{P-1} m_a^{\mu} m_b^{\mu}$. Como o determinante é elevado a $-\frac{1}{2}(p-1)$, $\bar{r}_{ab} = -i\beta^2 N \left[\sum_{\mu}^{P-1} m_a^{\mu} m_b^{\mu} \right]$. Usando a relação do parâmetro $r_{ab} = \frac{N}{P} \left[\sum_{\mu>1}^P m_a^{\mu} m_b^{\mu} \right]$, logo

$$\bar{r}_{ab} = -iP\beta^2 r_{ab}. \quad (4.43)$$

Assumindo que as réplicas m_a , q_{ab} e r_{ab} não dependem do índice das réplicas e dizemos que elas são simétricas ($q_{ab} = q_{ba}$), temos a chamada simetria de réplicas

$$m_a = m, \quad q_{ab} = q, \quad r_{ab} = r. \quad (4.44)$$

Logo

$$\begin{aligned} \phi = & \frac{Pn}{2N} + \frac{1}{2}nm^2 + \frac{P\beta n(n-1)}{2N}rq + \frac{P-1}{2\beta N} \text{Tr}_n \ln A \\ & - \frac{1}{\beta} \ln \text{Tr} \exp \left(\beta m \xi^1 \sum_a^n S^a + \frac{P\beta^2 r}{N} \sum_{ab}^{a<b} S^a S^b + \beta h \sum_a^n S^a \right), \end{aligned} \quad (4.45)$$

abrindo o somatório $S^a S^b$ em um único somatório

$$\sum_{ab}^{a<b} S^a S^b = \frac{1}{2} \left[\sum_{ab}^n S^a S^b - \sum_a^n (S^a)^2 \right] = \frac{1}{2} \left[\left(\sum_a^n S^a \right)^2 - n \right]. \quad (4.46)$$

Usando agora

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2 + bz + c} dz = \sqrt{\pi} e^{b^2/4 + c}, \quad (4.47)$$

ficamos com

$$\begin{aligned} \phi = & \frac{n\alpha}{2} + \frac{1}{2}nm^2 + \frac{\beta\alpha n(n-1)}{2}rq + \frac{\alpha}{2\beta} \text{Tr}_n \ln A \\ & - \frac{1}{\beta} (2\pi)^{-1/2} \ln e^{-\frac{\alpha\beta^2 rn}{2}} \text{Tr} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{2}} \prod_a^n e^{\beta(z\sqrt{\alpha r} + m\xi^1 + h)S^a}. \end{aligned} \quad (4.48)$$

Introduzimos agora a variável $\alpha = P/N$, onde $P \gg 1$, como o Tr é feito em S^a e $S = \pm 1$ ficamos com

$$\begin{aligned} \phi = & \frac{n\alpha}{2} + \frac{1}{2}nm^2 + \frac{\beta\alpha n(n-1)}{2}rq + \frac{\alpha}{2\beta} \text{Tr}_n \ln A - \frac{1}{\beta} (2\pi)^{-1/2} \ln e^{-\frac{\alpha\beta^2 rn}{2}} \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{2}} [2 \cosh \beta(z\sqrt{\alpha r} + m\xi^1 + h)]^n, \end{aligned} \quad (4.49)$$

aplicando o logaritmo obtemos

$$\begin{aligned} \phi = & \frac{n\alpha}{2} + \frac{1}{2}nm^2 + \frac{\beta\alpha n(n-1)}{2}rq + \frac{\alpha}{2\beta} \text{Tr}_n \ln A + \frac{\alpha\beta rn}{2} \\ & - \frac{1}{\beta\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{2}} \ln [2 \cosh \beta(z\sqrt{\alpha r} + m\xi^1 + h)]^n. \end{aligned} \quad (4.50)$$

Abrindo agora o $\text{Tr}_n \ln A$ e aplicando uma expansão de primeira ordem (cálculo detalhado no apêndice A.6), temos que

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \text{Tr}_n \ln A = \frac{-\beta q}{1 - \beta + \beta q} + \ln[1 - \beta + \beta q]. \quad (4.51)$$

Expandindo até primeira ordem o termo elevado a n para aplicar o limite em ϕ (encontrado no apêndice A.5), a nossa energia livre é dada por

$$\begin{aligned} f &= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \phi \\ &= \frac{m^2}{2} + \frac{\alpha}{2} \left(1 + \beta r(1 - q) - \frac{q}{1 - \beta + \beta q} + \frac{1}{\beta} \ln[1 - \beta + \beta q] \right) \\ &\quad - \frac{1}{\beta \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{2}} \ln[2 \cosh \beta(z\sqrt{\alpha r} + m\xi^1 + h)]. \end{aligned} \quad (4.52)$$

Aplicando o método de ponta de sela para minimizar a energia livre

$$\frac{\partial f}{\partial m} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial q} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial r} = 0 \quad (4.53)$$

fazendo isso obtemos para m

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial m} &= m - \frac{\beta \xi^1}{\beta \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{2}} \frac{2 \sinh \beta(z\sqrt{\alpha r} + m\xi^1 + h)}{2 \cosh \beta(z\sqrt{\alpha r} + m\xi^1 + h)} = 0 \\ &\rightarrow m = \frac{\xi^1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{2}} \tanh \beta(z\sqrt{\alpha r} + m\xi^1 + h), \end{aligned} \quad (4.54)$$

Chegando no parâmetro da magnetização m .

Calculando para o q

$$\frac{\partial f}{\partial q} = \frac{\alpha}{2} \left(-r\beta - \frac{1}{1 - \beta + \beta q} + \frac{\beta q^2}{(1 - \beta + \beta q)^2} + \frac{1}{1 - \beta + \beta q} \right) = 0 \quad (4.55)$$

$$\rightarrow r = \frac{q^2}{(1 - \beta + \beta q)^2}, \quad (4.56)$$

com isso obtemos o parâmetro r , parâmetro dos padrões não recuperado, sendo ele outra forma de medir a frustração. Para r temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial r} &= \frac{\alpha \beta}{2} (1 - q) - \frac{\alpha}{2\sqrt{2\pi}\sqrt{\alpha r}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{2}} z \tanh \beta(z\sqrt{\alpha r} + m\xi^1 + h) \\ &\rightarrow q = 1 - \frac{1}{\sqrt{2\pi}\beta\sqrt{\alpha r}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{2}} z \tanh \beta(z\sqrt{\alpha r} + m\xi^1 + h). \end{aligned} \quad (4.57)$$

Usando udv onde $u = \tanh \beta(z\sqrt{\alpha r} + m\xi^1 + h) \rightarrow du = \beta\sqrt{\alpha r} \text{sech}^2 \beta(z\sqrt{\alpha r} + m\xi^1 + h) dz$ e $dv = z e^{-\frac{z^2}{2}} dz \rightarrow v = -e^{-\frac{z^2}{2}}$, logo q fica

$$\begin{aligned} q &= 1 + \frac{1}{\sqrt{2\pi}\beta\sqrt{\alpha r}} e^{-\frac{z^2}{2}} \tanh \beta(z\sqrt{\alpha r} + m\xi^1 + h) \Big|_0^{\infty} \\ &\quad - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{2}} \text{sech}^2 \beta(z\sqrt{\alpha r} + m\xi^1 + h) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{2}} [1 - \text{sech}^2 \beta(z\sqrt{\alpha r} + m\xi^1 + h)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{2}} \tanh^2 \beta(z\sqrt{\alpha r} + m\xi^1 + h), \end{aligned} \quad (4.58)$$

Assim obtemos o parâmetro q , denominado de parâmetro vidro de spin.

Com isso, obtemos três equações de estado para o modelo Hopfield, onde o número de padrões é proporcional ao número de sítios $P/N = \alpha$. Utilizando de métodos numéricos é possível determinar os valores dos parâmetros de ordem e a energia livre para determinada temperatura e valor de α .

4.3 Métodos Numéricos e Comportamento do Modelo

Para um entendimento do problema proposto, uma análise gráfica dos parâmetros de ordem m, q, r , energia livre f e susceptibilidade magnética χ_1 é realizada. Esta tem como intuito o entendimento do comportamento das quantidades de interesse em diferentes regimes. Com isso, o uso de métodos numéricos é empregado para cálculo dos parâmetros em diferentes valores de temperatura e frustração α .

Os parâmetros de ordem m, q e r dados pelas equações (4.54), (4.58) e (4.56) formam um sistema de equações acopladas transcendentais. Assim, é necessário resolver um sistema de funções não lineares, a fim de determinar o zero de função. Como os parâmetros m e q dependem de um único padrão, atribuímos o valor de $\xi^1 = 1$ para esse padrão. Assim nosso sistema não linear fica

$$\begin{aligned} F_1(m, q) &= m - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{2}} \tanh \beta(z\sqrt{\alpha r} + m + h) \\ F_2(m, q) &= q - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{2}} \tanh^2 \beta(z\sqrt{\alpha r} + m + h). \end{aligned} \quad (4.59)$$

Como o parâmetro r não é uma função transcendental e não representa uma grandeza física pertinente, não é necessário calculá-lo diretamente.

Usando o método de Newton para zero de função, linearizamos as funções F_1 e F_2 , usando de uma solução tentativa para os parâmetros de ordem fazemos convergirem para a solução do sistema. Pela equação

$$\mathbf{L}(\mathbf{x}^{k+1}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}^k) + \mathbf{J}(\mathbf{x}^k)(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k) = 0, \quad (4.60)$$

onde \mathbf{L} são as funções linearizadas e \mathbf{J} a matriz jacobiana. Para resolver o sistema linear é utilizado do escalonamento LU. No cálculo das integrais, a quadratura de Gauss-Legendre foi utilizada. Para as derivadas, foi empregado o método de diferenças finitas de segunda ordem (métodos no apêndice B).

Com os métodos numéricos empregados em linguagem *FORTTRAN* (conforme o apêndice C), foi possível a obtenção do comportamento dos parâmetros de ordem em função da temperatura para diferentes regimes de frustração.

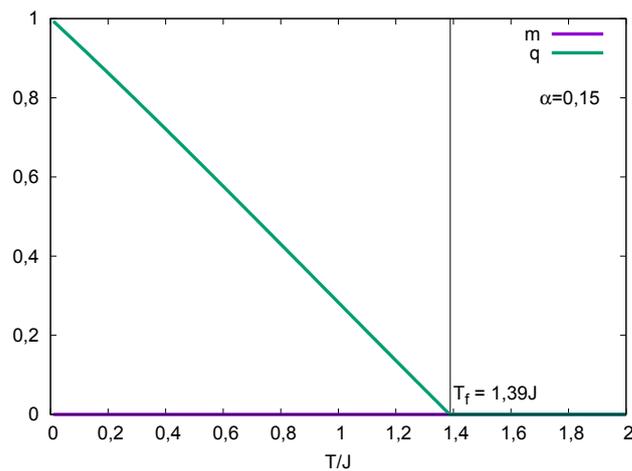
4.3.1 Alta Frustração

O regime de alta frustração do modelo acontece quando existe um alto grau de competição entre as interações, causado pelo grande número de padrões de conexão. Isso

acontece quando a variável de controle da frustração α é superior a 0,15. Nesse regime, só são identificadas as fases VS e PM.

Analisando o comportamento dos parâmetros de ordem em função da temperatura no regime de $\alpha = 0,15$, dado pela figura 4.1, podemos notar que para qualquer valor de

Figura 4.1 – Comportamento dos parâmetros m e q em função de T/J para $\alpha = 0,15$.



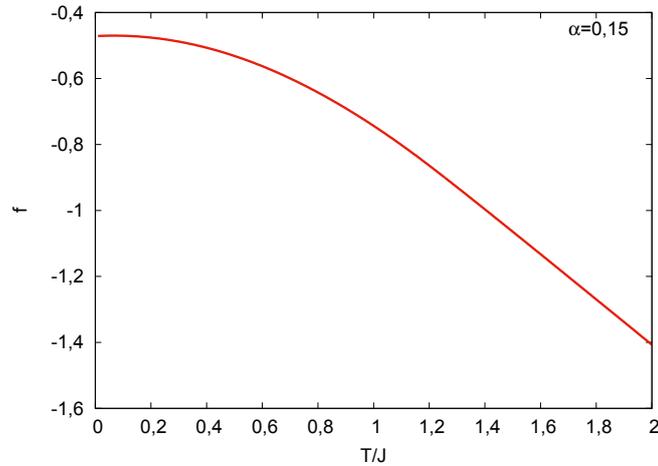
Fonte: o autor (2021).

temperatura o parâmetro m da magnetização é zero. Isso mostra que não existe uma magnetização espontânea para nenhum valor de temperatura neste regime de frustração. Logo não é identificada a fase FM. Analisando o parâmetro vidro de spin q , podemos ver um decréscimo no seu valor com o aumento da temperatura, até que para $T_f \approx 1,39J$ assume o valor zero. Para valores superiores a $T > T_f$ não é identificada a fase VS. Com isso, neste regime de frustração temos a fase VS, quando $m = 0$ e $q \neq 0$ até T_f onde ocorre a transição de fase para PM, quando $m = q = 0$.

Verificando a energia livre f em função da temperatura dada pela figura 4.2, é possível notar um comportamento contínuo de f para qualquer valor de temperatura. Mesmo ao redor de T_f , onde é identificada uma transição de fase, a energia não sofre uma descontinuidade. Tal comportamento é característico de uma transição de segunda ordem, que poderá ser melhor identificada a partir da susceptibilidade magnética.

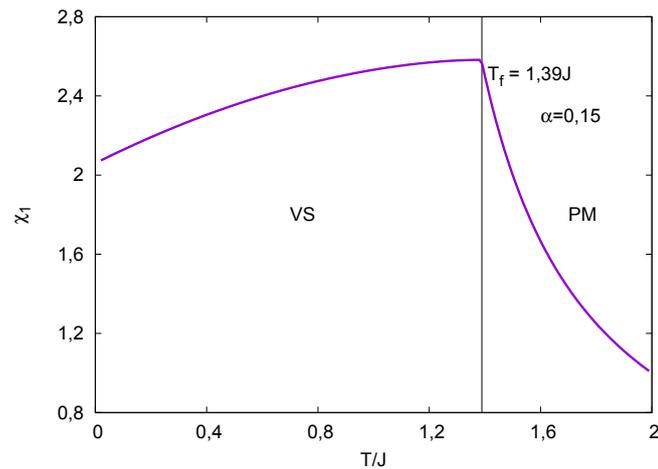
Aplicando o método de diferenças finitas no parâmetro m em função do campo externo h foi possível a obtenção do comportamento da susceptibilidade magnética χ_1 em função da temperatura para o regime de alta frustração dada pela figura 4.3. Podemos identificar um aumento da susceptibilidade com o aumento da temperatura, um comportamento característico da fase VS como visto nos capítulos anteriores. O aumento de χ_1 com T_f ocorre até obtenção de um pico da susceptibilidade. Para $T > T_f$, χ_1 apresenta um decréscimo para temperaturas superiores. Essa descontinuidade da susceptibilidade magnética em T_f aponta uma transição de segunda ordem. Nesse contexto, para valores de $T < T_f$ temos a fase VS e para $T > T_f$ a fase PM é obtida.

Figura 4.2 – Energia livre f em função de T/J para $\alpha = 0,15$.



Fonte: o autor (2021).

Figura 4.3 – Susceptibilidade magnética linear χ_1 em função de T/J para $\alpha = 0,15$.

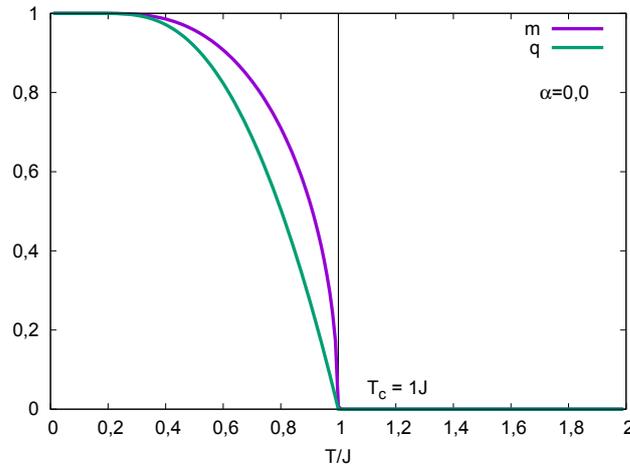


Fonte: o autor (2021).

4.3.2 Zero Frustração

No regime de zero frustração, o sistema se encontra em um estado onde o número de padrões é zero, tal que a frustração não se sobrepõe à magnetização. Neste cenário, não é obtida competição entre as interações dos sítios, uma vez que a variável $\alpha = 0$. Como visto, neste regime o modelo Hopfield assemelha-se ao modelo de Ising tradicional, conforme cálculos da seção 3.1. Isto indica a presença das fases FM ($m \neq 0$; $q \neq 0$) e PM ($m = 0$; $q = 0$). Utilizando os métodos numéricos para $\alpha = 0$, obtemos os resultados discutidos a seguir. Na figura 4.4, o comportamento dos parâmetros de ordem em função da temperatura no regime de zero frustração é observado. Podemos notar que os parâmetros de magnetização e vidro de spin para valores de temperaturas abaixo de T_c são diferentes de zero, isso mostra uma magnetização espontânea neste regime (neste contexto, m e q se desacoplam, tal que $m(m,0)$

Figura 4.4 – Comportamento dos parâmetros m e q em função de T/J para $\alpha = 0$.

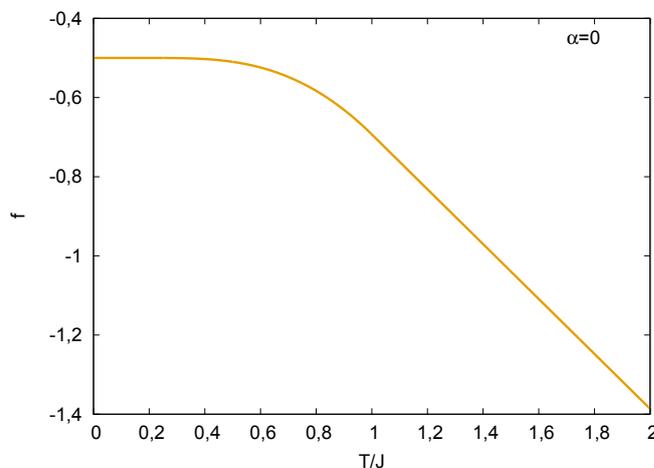


Fonte: o autor (2021).

e $q(m,0)$). Portanto, podemos ter uma fase FM para temperaturas entre zero e T_c . Em temperaturas maiores que T_c , tanto o parâmetro m como q são zero. Logo, para temperaturas maiores de T_c temos a fase PM. Com isso, podemos concluir que na temperatura T_c temos uma transição de fase. Posteriormente, será mostrado qual tipo de natureza da transição temos neste regime (primeira ou segunda ordem).

Analisando a energia livre para o regime de frustração dada pela figura 4.5, podemos notar que a energia livre é contínua para qualquer valor de temperatura, mesmo em T_c . Isso mostra que a transição que ocorre nesta temperatura é de segunda ordem. O comportamento contínuo de f está de acordo com o comportamento dos parâmetros m e q .

Figura 4.5 – Comportamento de f em função de T/J para $\alpha = 0$.

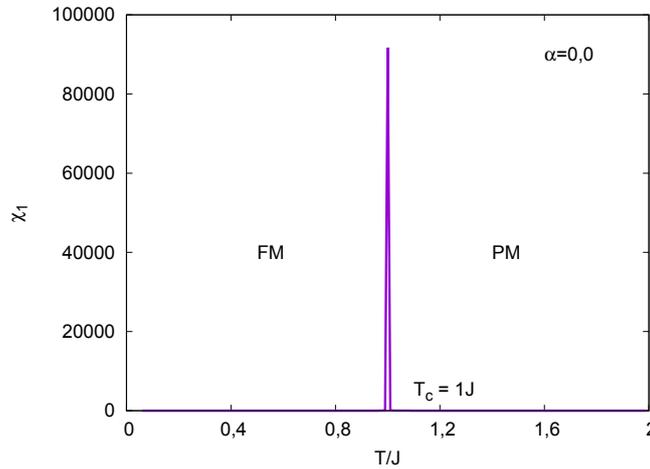


Fonte: o autor (2021).

Pelo comportamento da susceptibilidade magnética em função da temperatura, como mostra a figura 4.6, é possível identificar uma divergência em T_c para o regime de zero

frustração, isso mostra uma transição de fase nesta temperatura. Como a energia livre neste regime é contínua e a susceptibilidade magnética diverge em T_c , temos uma transição de segunda ordem.

Figura 4.6 – Comportamento de χ_1 em função de T/J para $\alpha = 0$.



Fonte: o autor (2021).

4.3.2.1 Zero Frustração Analítico

Tratando de forma analítica o modelo no regime $\alpha = 0$, encontramos uma situação em que é obtida somente uma magnetização espontânea. Usando a mesma energia livre do modelo Hopfield dada pela equação (4.52) e fazendo $\alpha = 0$ obtemos a expressão

$$f = \frac{m^2}{2} - \frac{1}{\beta\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{2}} \ln[2 \cosh \beta(m\xi^1 + h)] \quad (4.61)$$

$$= \frac{m^2}{2} - \frac{1}{\beta} \ln[2 \cosh \beta(m\xi^1 + h)]. \quad (4.62)$$

Notamos agora que a energia livre não depende do parâmetro de ordem q , somente do parâmetro m , do campo externo h , da temperatura e do padrão utilizado. Pela figura 4.7 temos a energia livre em função da temperatura. Como podemos ver, a energia livre não apresenta nenhuma descontinuidade.

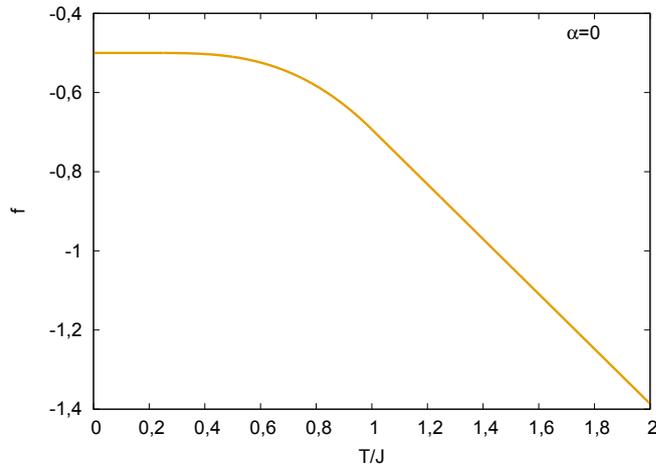
Tomando $\xi_1 = 1$ podemos notar que é a mesma energia livre para o modelo de Ising de alcance infinito, como visto anteriormente. Usando o método de ponto de sela a fim de minimizar a energia obtemos o parâmetro m , que é dado por

$$\frac{df}{dm} = m - \frac{2 \sinh \beta(m+h)}{2 \cosh \beta(m+h)} = 0 \quad (4.63)$$

$$\rightarrow m = \tanh \beta(m+h). \quad (4.64)$$

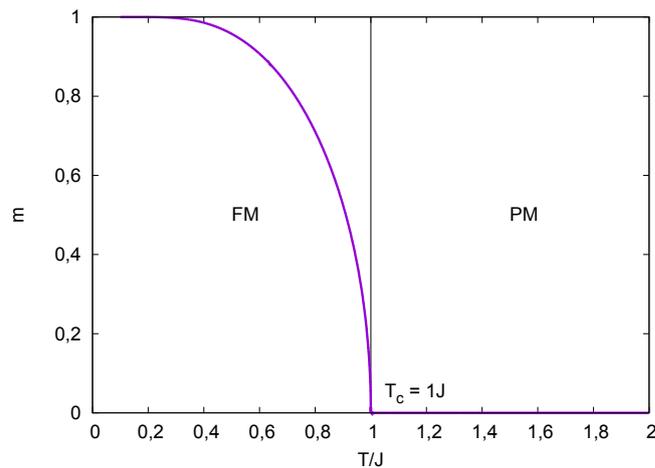
Aplicando os métodos numéricos para determinar m em diferentes temperaturas, obtemos a figura 4.8. Podemos ver que é o mesmo comportamento de m no modelo de Ising de alcance infinito, onde m cai com o aumento da temperatura, indicando uma transição FM/PM.

Figura 4.7 – Comportamento de f em função de T/J para $\alpha = 0$.



Fonte: o autor (2021).

Figura 4.8 – Comportamento de m em função de T/J para $\alpha = 0$.



Fonte: o autor (2021).

Calculando a susceptibilidade magnética analítica, em que é tomada a primeira derivada da magnetização em relação a h para $h = 0$, obtemos

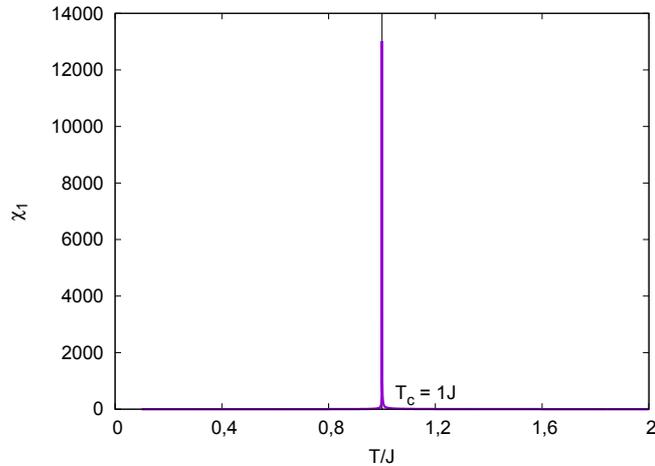
$$\chi_1 = \left. \frac{\partial m}{\partial h} \right|_{h=0} = \left. \frac{\partial \tanh \beta[m(h) + h]}{\partial h} \right|_{h=0} \quad (4.65)$$

$$= \operatorname{sech}^2 \beta[m(0)] \cdot \beta(\chi_1 + 1) \quad (4.66)$$

$$= \frac{\beta}{\operatorname{sech}^2 \beta[m(0)] - \beta} \quad (4.67)$$

Pelos métodos numéricos temos a susceptibilidade em função da temperatura dada pela figura 4.9, onde ela diverge para temperatura igual a um. Essa divergência mostra uma transição de fase de segunda ordem, pois a energia é contínua no ponto de transição.

Figura 4.9 – Comportamento de χ_1 em função de T/J para $\alpha = 0$.



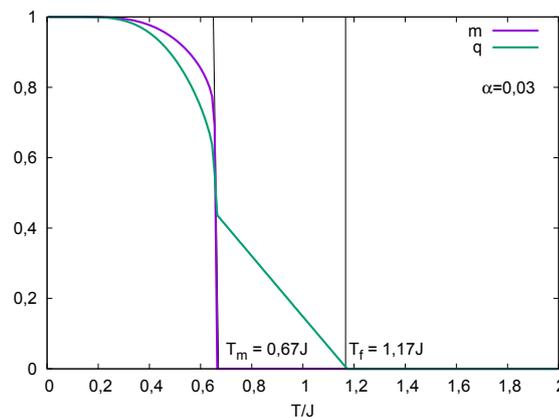
Fonte: o autor (2021).

4.3.3 Baixa Frustração

Em um regime de baixa frustração, é obtido um estado onde ocorre a competição de interações entre os sítios, a qual pode gerar frustração, e uma magnetização líquida diferente de zero. Com isso, para temperaturas baixas, temos o aparecimento da fase FM. Para temperaturas mais altas, surgem as fases VS e PM.

Analisando o comportamento dos parâmetros m e q em função da temperatura para $\alpha = 0,03$, como mostra a figura 4.10, podemos notar que tanto os parâmetros m e q são diferentes de zero em temperaturas baixas de T_m . Tal comportamento indica uma magnetização líquida diferente de zero, o que é característico de uma fase FM. A partir de T_m o parâmetro m sofre uma descontinuidade indo a zero, enquanto q decai com o aumento da temperatura até T_f . Assim temos uma fase VS para $T_m < T < T_f$. Para temperaturas maiores, a fase PM é obtida.

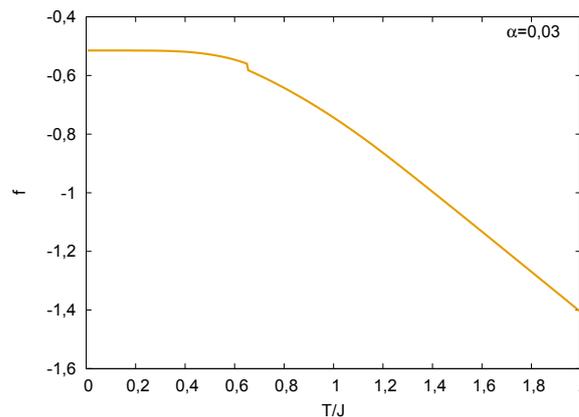
Figura 4.10 – Comportamento dos parâmetros m e q em função de T/J para $\alpha = 0,03$.



Fonte: o autor (2021).

Observando a energia livre, dada na figura 4.11, em função da temperatura para $\alpha = 0,03$ podemos notar uma descontinuidade em T_m . Isso mostra uma transição de primeira ordem neste regime de frustração, que vai de encontro com a mesma descontinuidade de m vista anteriormente. Para temperaturas acima a energia livre f é contínua. Em particular, f é contínua mesmo na transição de fase T_f . Logo, T_f é considerada uma transição de segunda ordem.

Figura 4.11 – Comportamento de f em função de T/J para $\alpha = 0,03$.



Fonte: o autor (2021).

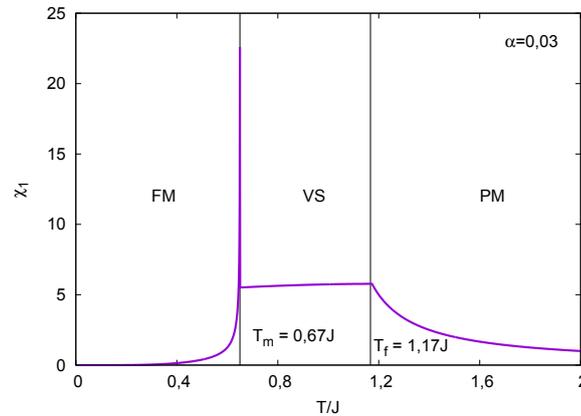
O comportamento da susceptibilidade magnética em função da temperatura para $\alpha = 0,03$ pode ser verificada na figura 4.12. Nesta, vemos um comportamento crescente da susceptibilidade, até que em T_m ocorre uma divergência. Nesta situação, uma transição de fase de primeira ordem é assinalada, em acordo com o comportamento da energia livre. Depois de T_m , a susceptibilidade magnética χ_1 cresce lentamente até o pico na temperatura T_f . Após, χ_1 decresce em acordo com a lei de Curie. Com isso, para $T < T_m$ obtemos uma fase FM. Para $T_m < T < T_f$ temos a fase VS. Finalmente, surge a fase PM em temperaturas acima de T_f .

4.3.4 Diagrama de Fases

Fazendo da análise dos parâmetros de ordem m e q , podemos concluir que para obter a fase FM temos que os parâmetros precisam ser $m \neq 0$ e $q \neq 0$, para a fase VS os parâmetros são $m = 0$ e $q \neq 0$ e na fase PM os parâmetros de ordem são zero. Com isso é possível a obtenção de um diagrama de fases para o modelo, determinando as temperaturas de transição para diferentes valores de frustração.

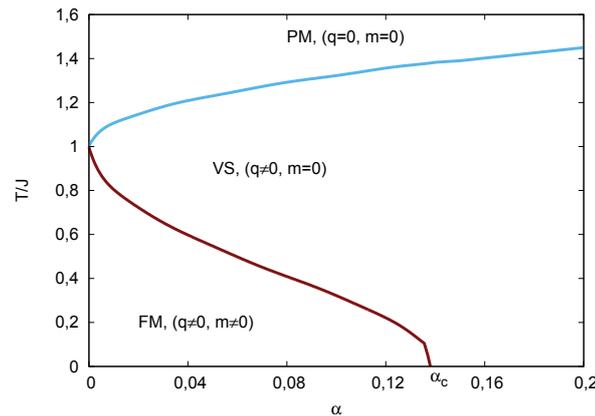
Na figura 4.13, temos o diagrama de fases do modelo Hopfield, em que as temperaturas de transição em função da variável de frustração são apresentadas. A linha em marrom representa as transições de primeira ordem ou T_c , separando as fases FM e VS. A linha azul representa as transições de segunda ordem ou T_f , separando as fases VS e PM. Podemos notar ainda um α_c , em que para $\alpha > \alpha_c$ a fase FM não é encontrada. Esta situação indica que a

Figura 4.12 – Comportamento de χ_1 em função de T/J para $\alpha = 0,03$.



Fonte: o autor (2021).

Figura 4.13 – Diagrama do modelo em função de α e da temperatura.

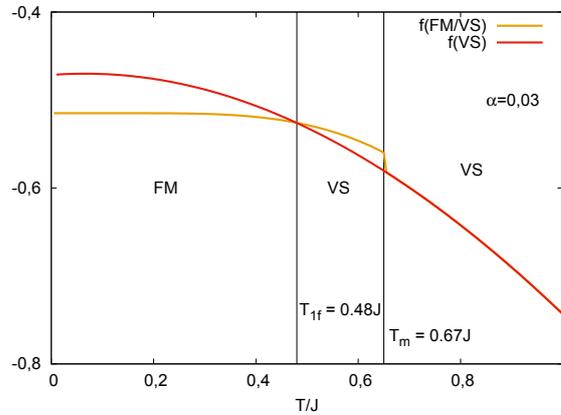


Fonte: o autor (2021).

intensidade dos efeitos da competição entre as interações é capaz de gerar uma situação em que $m = 0$ para qualquer valor de T/J .

A seguir, uma análise mais detalhada no regime de baixa frustração é desempenhada. Em tal regime, pode haver a existência de múltiplas soluções, sendo elas FM ou VS. Nesse contexto, do ponto de vista numérico, a localização da transição é realizada pelo levantamento de múltiplas soluções. Posteriormente, é realizado um comparativo das energias das soluções encontradas. Em particular, este comparativo pode ser encontrado na figura 4.14. No resultado, a linha amarela representa a energia livre da solução FM $f(FM/VS)$, que tem solução tentativa $q \neq 0$ e $m \neq 0$. Já a linha vermelha indica a energia livre da solução $f(VS)$, na qual a solução tentativa numérica considera $q \neq 0$ e $m = 0$. Podemos notar que para baixas temperaturas a energia livre FM é mais baixa em comparação com a energia livre VS. Com isso, a fase FM é fisicamente aquela que minimiza a energia. Em uma certa temperatura, a qual chamaremos de T_{1f} , ocorre a interseção das energias FM e VS. Esta interseção indica a localização exata da

Figura 4.14 – Energia livre da solução FM $f(FM/VS)$ e energia livre da solução VS $f(VS)$ em função de T/J para $\alpha = 0,03$.



Fonte: o autor (2021).

temperatura de transição de primeira ordem. Para $T > T_{1f}$, a energia livre VS é menor que a energia FM. Nesse contexto, a fase VS é a mais estável. Em temperaturas superiores a T_m , na qual a solução FM deixa de existir, a energia livre é somente VS. Com isso, podemos notar uma região no diagrama de fases ainda não localizada. Basicamente, a partir do comparativo das energias livres para soluções FM e VS com diferentes α , uma linha de transição de fase de primeira ordem pode ser marcada exatamente. Uma análise mais aprofundada da linha transição de fase de primeira ordem para α baixo será realizada em trabalhos futuros. Para finalizar, a análise realizada neste trabalho é coerente com os resultados conhecidos na literatura (AMIT; GUTFREUND; SOMPOLINSKY, 1987).

5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

No decorrer deste trabalho de conclusão, o ordenamento magnético vidro de spin foi estudado e suas peculiaridades discutidas. Essencialmente, as principais características experimentais, apontadas pela literatura e teóricas da fase foram apontadas. Posteriormente, a partir de uma base experimental e teórica sólida, se deu início ao estudo do modelo Hopfield, com ênfase na metodologia, em que o ferramental matemático e computacionais são examinados detalhadamente.

Primeiramente, focou-se nos pontos experimentais da fase vidro de spin. Como discutido, este ordenamento é obtido da introdução de impurezas de metais de transição em metais nobres, que geram campos magnéticos locais e a aleatoriedade das interações magnéticas. Examinou-se antes de tudo que o pico da susceptibilidade magnética na temperatura de transição T_f é uma assinatura da fase vidro de spin. Do ponto de vista de comportamento, para temperaturas maiores de T_f a susceptibilidade mostrou um comportamento compatível com a lei de Curie. Pela revisão, no que diz respeito à realização experimental, a fase vidro de spin é mostrada por meio dos protocolos ZFC-FC. Por meio dos protocolos, discorreu-se que a resposta magnética de materiais que apresentam a fase VS é extremamente dependente da história do material. O protocolo ZFC mostrou o pico da susceptibilidade magnética a campo nulo, enquanto que o protocolo FC mostrou uma magnetização remanente, oriunda do campo externo aplicado. Com esta remanescência foi introduzida a noção de congelamento dos momentos magnéticos que é característico da fase VS.

Posteriormente, as discussões acerca do papel das interações entre elementos microscópicos, as quais permitem a compreensão das propriedades macroscópicas, serviram de base para o tratamento teórico dos ordenamentos magnéticos. Nesta descrição, por meio da representação de sítios e de uma variável de interação de troca, construiu-se uma teoria para caracterizar os ordenamentos magnéticos, entre eles o paramagnético, ferromagnético, antiferromagnético e vidro de spin. É importante salientar que a interação de troca tem papel importante na discriminação dos ordenamentos. Por exemplo, para a fase vidro de spin, é assumido que a interação de troca é aleatória. Consequentemente, é mostrado que o congelamento dos momentos magnéticos, peculiaridade dos VS, se dá pela desordem (via competição de interações de troca) a qual gera frustração.

Como visto, a característica aleatória da interação de troca foi incorporada em diversos modelos teóricos para descrição VS. Adicionalmente, na seção 3.3.1 focou-se atenção no modelo SK. Este modelo de alcance infinito apresenta solução exata no limite termodinâmico, bem como apresenta resultados satisfatórios para certas quantidades termodinâmicas quando comparado com realizações experimentais. Consequentemente, este pode ser considerado um dos modelos mais conhecidos no ramo dos vidro de spin. Neste, a interação de troca aleatória segue uma distribuição de probabilidade gaussiana. A partir do emprego de métodos analíticos, foi possível solucionar o modelo e obter os parâmetros de ordem da magnetização e vidro de spin. Como já mencionado, este modelo obteve bons resultados para quantidades

como a susceptibilidade magnética, mostrando o pico na temperatura de transição conforme os dados experimentais. Adicionalmente, o modelo proporciona um diagrama de fases com fases paramagnética, ferromagnética e vidro de spin, sendo VS a fase do estado fundamental do modelo em certo alcance de J_0 . Entretanto, se viu que para certos compostos, como o de Cério, o emprego do modelo SK não é adequado. Em particular no caso do Cério, o modelo Hopfield se mostrou um bom candidato para descrição da realização experimental.

No capítulo 4 o modelo Hopfield é apresentado. Utilizando da teoria de campo médio, foi possível mostrar a existência de magnetização espontânea, considerando um número finito de padrões P , em que $\alpha = P/N = 0$, o que corresponde a um regime em que não há desordem capaz de gerar frustração. Nesse caso, não obtemos uma fase vidro de spin. Contudo, conforme se aumenta no número de padrões, uma solução VS pode surgir. Se $\alpha \equiv P/N$ passar certo valor limite, em que P da ordem de N , o VS se torna o único estado estável em baixas temperaturas. Portanto, para $\alpha > 0$, a desordem que gera frustração deve ser tratada, tal que o método de réplicas é aplicado. Consequentemente, uma média sobre a desordem da energia livre de Helmholtz é calculada, levando em conta os padrões da rede. Posteriormente, é assumida a redução de dois sítios para um único sítio efetivo, que introduzem termos quadráticos. Empregando campos auxiliares para linearização dos termos quadráticos, são introduzidos os parâmetros de ordem que permitiram analisar as transições de fase associada ao modelo.

Pelos métodos numéricos empregados, foi possível a obtenção dos resultados para o modelo Hopfield, entre eles o comportamento dos parâmetros de ordem, a energia livre de Helmholtz e a susceptibilidade magnética, todos em função da temperatura para diferentes valores de frustração. Com esses resultados, primeiramente podemos concluir de fato que o modelo Hopfield pode apresentar a fase vidro de spin. Tal afirmação é sugerida pelo comportamento da susceptibilidade, que apresenta um pico na transição de fase. Adicionalmente, em regimes de alta frustração, quando analisada a energia livre foi identificado que a transição PM/VS é de segunda ordem.

Em regimes de baixa frustração, onde a fase ferromagnética é presente, a energia livre apresenta uma descontinuidade. Verificou-se também nesse regime que a susceptibilidade mostrou uma divergência. Logo, a transição de fase FM/VS é dita de primeira ordem através da análise da energia livre. A partir da obtenção do comportamento dos parâmetros de ordem para diferentes regimes de frustração, um diagrama de fase, dado em função da temperatura e da variável de controle da frustração α , foi obtido. A partir da análise deste resultado, verificou-se que o modelo apresenta transições do tipo ferromagnética/paramagnética para zero frustração. Para regiões de alta frustração foram identificadas transições vidro de spin/paramagnética e em regiões intermediárias de frustração transições ferromagnética/vidro de spin/paramagnética. Adicionalmente, com a análise da energia livre no regime de baixa frustração, é possível identificar que a transição de primeira ordem ocorre em outra temperatura crítica T_{1f} , enquanto que os parâmetros apontam em T_m .

Para finalizar a discussão, foi observado neste trabalho que a fase vidro de spin apresenta propriedades únicas, tanto do ponto de vista experimental, mostrada pela literatura, como

teórico. A partir do surgimento desta fase, surgiu-se a necessidade de modelos teóricos para representação de tal ordenamento, sendo este fenômeno ainda de relevância para a área de matéria condensada. O modelo Hopfield apresentou as características necessárias para a descrição da fase VS. Devido as suas peculiaridades, tal modelo foi empregado na descrição de sistemas físicos reais como visto na Ref. (SAL *et al.*, 1997). Por meio da variável α que controla a frustração no modelo, um estado fundamental ferromagnético dependendo do valor de frustração é obtido. Como visto, este estado fundamental FM foi útil para descrição do composto de Cério (MAGALHÃES *et al.*, 2006).

Acerca de perspectivas futuras, neste TCC alguns pontos ficaram em aberto. Um desses pontos diz respeito a discussão e análise da susceptibilidade magnética não-linear, uma quantidade importante que pode apontar a transição vidro de spin. Outro ponto está relacionado a descrição detalhada da fase mista no diagrama de fases do modelo Hopfield. Tais pontos serão analisados em trabalhos futuros.

REFERÊNCIAS

- AMIT, D. J.; GUTFREUND, H.; SOMPOLINSKY, H. Statistical mechanics of neural networks near saturation. **Annals of Physics**, v. 173, n. 1, p. 30 – 67, 1987.
- BINDER, K.; YOUNG, A. P. Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions. **Review of Moderns Physics**, American Physical Society, v. 58, p. 801–976, out. 1986.
- CALLISTER, Jr. W. D. **Ciência e engenharia de materiais: uma introdução**. Rio de Janeiro: LTC, 2002.
- CANNELLA, V.; MYDOSH, J. A. Magnetic ordering in gold-iron alloys. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 6, p. 4220–4237, dez. 1972.
- DELFT, D. v.; KES, P. The discovery of superconductivity. **Physics Today**, American Institute of Physics, v. 63, set. 2010.
- EDWARDS, S. F.; ANDERSON, P. W. Theory of spin glasses. **Journal of Physics F Metal Physics**, v. 5, p. 965–974, maio 1975.
- EISBERG, R.; RESNICK, R. **Física quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas**. Rio de Janeiro: Campus, 1979.
- FISCHER, K. H.; HERTZ, J. A. **Spin Glasses**. Cambridge: Cambridge University Press, 1991. (Cambridge Studies in Magnetism).
- HEBB, D. O. **The organization of behavior: A neuropsychological theory**. New York: Wiley, 1949.
- HOPFIELD, J. Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 79(8), p. 2554–2558, maio 1982.
- HUBBARD, J. Calculation of partition functions. **Physics Review Letters**, American Physical Society, v. 3, p. 77–78, jul. 1959.
- HÜSER, D. *et al.* Dynamical behavior of the susceptibility around the freezing temperature in (Eu,Sr)S. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 27, p. 3100–3103, mar. 1983.
- ISING, E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. **Zeitschrift für Physik**, v. 31, fev. 1925.
- JILES, D.C. **Introduction to Magnetism and Magnetic Materials**. 2. ed. Boca Raton: Taylor & Francis, 1998.
- MAGALHÃES, S. G. *et al.* Spin glass and ferromagnetism in kondo lattice compounds. **The European Physical Journal B**, v. 30, n. 4, p. 419–425, 2002.
- MAGALHÃES, S. G. *et al.* Spin glass and ferromagnetism in disordered cerium compounds. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 74, p. 014427, jul. 2006.
- MORAIS, C. V. *et al.* Spin-1 hopfield model under a random field. **Physical Review E**, American Physical Society, v. 89, p. 012146, jan. 2014.

MULDER, C. A. M.; DUYNVELDT, A. J. V.; MYDOSH, J. A. Susceptibility of the CuMn spin-glass: Frequency and field dependences. **Physical Review B**, American Physical Society, p. 1384–1396, fev. 1981. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.23.1384>. Acesso em: 2 jul. 2020.

MÜLLER, B.; REINHARDT, J. **Neural Networks: An introduction**. [s. l.]: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1990. v. 1. (Physics of Neural Networks, v. 1).

NAGATA, S.; KEESOM, P. H.; HARRISON, H. R. Low-dc-field susceptibility of CuMn spin glass. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 19, p. 1633–1638, fev. 1979.

NISHIMORI, H. **Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing: an introduction**. New York: Oxford University Press, 2001.

NUSSENZVEIG, H. M. **Curso de física básica: 3: eletromagnetismo**. 2. ed. São Paulo: Blucher, 2015.

OZCEP, F. Terrestrial magnetism in the Ottoman empire: Documents and measurements. **Earth Sciences History**, v. 37, n. 1, p. 1–24, jan. 2018.

RUDERMAN, M. A.; KITTEL, C. Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons. **Physical Review**, American Physical Society, v. 96, p. 99–102, out. 1954.

SAL, J. C. G. *et al.* Spin-glass freezing above the ordering temperature for the kondo ferromagnet $\text{CeNi}_{0.4}\text{Cu}_{0.6}$. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 56, p. 11741–11748, nov. 1997.

SALINAS, S. R. A. **Introdução à Física Estatística**. 2. ed. São Paulo: Edusp, 2005.

SHERRINGTON, D.; KIRKPATRICK, S. Solvable model of a spin-glass. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 35, p. 1792–1796, dez. 1975.

THAKUR, A. *et al.* Synthesis of barium ferrite nanoparticles using rhizome extract of *acorus calamus*: Characterization and its efficacy against different plant phytopathogenic fungi. **Nano-Structures & Nano-Objects**, v. 24, p. 100599, 2020.

WENGER, L. E.; KEESOM, P. H. Calorimetric investigation of a spin-glass alloy: CuMn. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 13, p. 4053–4059, maio 1976. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.13.4053>. Acesso em: 14 jul. 2020.

ZEMANSKY, M. W. **Calor e Termodinâmica**. 5. ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1978.

ZILL, D. G. **Equações diferenciais com aplicações em modelagem**. 3. ed. São Paulo: Cengage Learning, 2016.

APÊNDICES

APÊNDICE A – CÁLCULOS DA TEORIA DE RÉPLICAS

A.1 Média sobre a desordem

Aplicação à média sobre a desordem dos padrões ξ^μ na função de partição

$$\begin{aligned}
 [Z^n] = & e^{-\frac{Pn\beta}{2}} \text{Tr} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{N\beta}{2\pi} \right)^{\frac{nP}{2}} \left(\prod_{\mu}^{P-1} \prod_a^n dm_{\mu}^a \right) \exp \left(\frac{-N\beta}{2} \sum_{\mu}^{P-1} \sum_a^n (m_{\mu}^a)^2 \right. \right. \\
 & + \beta \sum_{\mu}^{P-1} \sum_a^n m_{\mu}^a \sum_i^N \xi_i^{\mu} S_i^a \left. \right) \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\prod_a^n dm_1^a \right) \exp \left(\frac{-N\beta}{2} \sum_a^n (m_1^a)^2 \right. \\
 & \left. \left. + \beta \sum_a^n m_1^a \sum_i^N \xi_i^1 S_i^a + \beta h \sum_i^N \sum_a^n S_i^a \right) \right], \tag{A.1}
 \end{aligned}$$

como ξ^μ pode ser ± 1 , a média da função de partição fica

$$\begin{aligned}
 [Z^n] = & e^{-\frac{Pn\beta}{2}} \text{Tr} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{N\beta}{2\pi} \right)^{\frac{nP}{2}} \left(\prod_{\mu}^{P-1} \prod_a^n dm_{\mu}^a \right) \exp \left(\frac{-N\beta}{2} \sum_{\mu}^{P-1} \sum_a^n (m_{\mu}^a)^2 \right. \\
 & + \sum_{\mu}^{P-1} \sum_i^N \ln \cosh \left(\beta \sum_a^n m_{\mu}^a S_i^a \right) \left. \right) \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\prod_a^n dm_1^a \right) \\
 & \times \left[\exp \left(\frac{-N\beta}{2} \sum_a^n (m_1^a)^2 + \beta \sum_a^n m_1^a \sum_i^N \xi_i^1 S_i^a + \beta h \sum_i^N \sum_a^n S_i^a \right) \right]. \tag{A.2}
 \end{aligned}$$

A.2 Inserção dos parâmetros q e r

Os termos $\sum S^a S^b$ da função de partição são agrupados junto a função delta (Eq. 4.33), na forma

$$\begin{aligned}
 & \int dq_{ab} \int \frac{dr'_{ab}}{2\pi} \exp \left[ir'_{ab} \left(q_{ab} - \frac{1}{N} \sum_i^N S_i^a S_i^b \right) + \beta^2 \sum_{\mu}^{P-1} m_a^{\mu} m_b^{\mu} \sum_i^N S_i^a S_i^b \right] \\
 = & \int dq_{ab} \int \frac{dr'_{ab}}{2\pi} \exp \left[ir'_{ab} q_{ab} - i \left(r'_{ab} + i\beta^2 N \sum_{\mu}^{P-1} m_a^{\mu} m_b^{\mu} \right) \frac{1}{N} \sum_i^N S_i^a S_i^b \right]. \tag{A.3}
 \end{aligned}$$

Aplicando a transformação linear $\bar{r}_{ab} = r'_{ab} + i\beta^2 N \sum_{\mu}^{P-1} m_a^{\mu} m_b^{\mu}$,

$$\begin{aligned}
 & \int dq_{ab} \int \frac{dr'_{ab}}{2\pi} \exp \left[i \left(\bar{r}_{ab} - i\beta^2 N \sum_{\mu}^{P-1} m_a^{\mu} m_b^{\mu} \right) q_{ab} - i\bar{r}_{ab} \frac{1}{N} \sum_i^N S_i^a S_i^b \right] \\
 = & \int dq_{ab} \int \frac{dr'_{ab}}{2\pi} \exp \left[i\bar{r}_{ab} \left(q_{ab} - \frac{1}{N} \sum_i^N S_i^a S_i^b \right) + \beta^2 N q_{ab} \sum_{\mu}^{P-1} m_a^{\mu} m_b^{\mu} \right]. \tag{A.4}
 \end{aligned}$$

A.3 Independência dos índices

Em função da troca de índices imposta pela teoria de réplicas, a dependência de S fica restrita somente aos índices ab . Com isso, o termo do Tr fica

$$\begin{aligned}
& \text{Tr} \left[\exp \left(\beta \sum_a^n m_1^a \sum_i^N \xi_i^1 S_i^a + \frac{i}{N} \sum_{ab}^{a<b} \bar{r}_{ab} \sum_i^N S_i^a S_i^b + \beta h \sum_i^N \sum_a^n S_i^a \right) \right] \\
&= \text{Tr} \prod_i^N \left[\exp \left(\beta \sum_a^n m_1^a \xi_i^1 S_i^a + \frac{i}{N} \sum_{ab}^{a<b} \bar{r}_{ab} S_i^a S_i^b + \beta h \sum_a^n S_i^a \right) \right] \\
&= \text{Tr} \left[\exp \left(\beta \sum_a^n m_1^a \xi^1 S^a + \frac{i}{N} \sum_{ab}^{a<b} \bar{r}_{ab} S^a S^b + \beta h \sum_a^n S^a \right) \right]^N. \tag{A.5}
\end{aligned}$$

A.4 Ponto de sela para ϕ

Aplicando o método de ponto de sela em ϕ , sendo

$$\frac{\partial \phi}{\partial m_1^a} = 0, \quad \frac{\partial \phi}{\partial q_{ab}} = 0, \quad \frac{\partial \phi}{\partial \bar{r}_{ab}} = 0, \tag{A.6}$$

para os parâmetros m_1^p e \bar{r}_{ab} obtemos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \phi}{\partial m_1^a} &= \sum_a^n m_1^a \\
&= \frac{\text{Tr} \sum_a^n \xi^1 S^a \exp \left(\beta \sum_a^n m_1^a \xi^1 S^a + \frac{i}{N} \sum_{ab}^{a<b} \bar{r}_{ab} S^a S^b + \beta h \sum_a^n S^a \right)}{\text{Tr} \exp \left(\beta \sum_a^n m_1^a \xi^1 S^a + \frac{i}{N} \sum_{ab}^{a<b} \bar{r}_{ab} S^a S^b + \beta h \sum_a^n S^a \right)} \\
&= \sum_a^n m_1^a - \xi^1 \langle S^a \rangle = 0, \tag{A.7}
\end{aligned}$$

logo $m_1^a = \xi^1 [\langle S^a \rangle]$. Fazendo agora para \bar{r}_{ab} , temos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \phi}{\partial \bar{r}_{ab}} &= \frac{i}{\beta N} \sum_{ab}^{a<b} q_{ab} \\
&= \frac{\text{Tr} \frac{i}{\beta N} \sum_{ab}^{a<b} S^a S^b \exp \left(\beta \sum_a^n m_1^a \xi^1 S^a + \frac{i}{N} \sum_{ab}^{a<b} \bar{r}_{ab} S^a S^b + \beta h \sum_a^n S^a \right)}{\text{Tr} \exp \left(\beta \sum_a^n m_1^a \xi^1 S^a + \frac{i}{N} \sum_{ab}^{a<b} \bar{r}_{ab} S^a S^b + \beta h \sum_a^n S^a \right)} \\
&= \frac{i}{\beta N} \sum_{ab}^{a<b} q_{ab} - \frac{i}{\beta N} \langle S^a \rangle \langle S^b \rangle, \tag{A.8}
\end{aligned}$$

logo $q_{ab} = [\langle S^a \rangle \langle S^b \rangle]$.

A.5 Expansão de primeira ordem em n

Expandindo o termo integrado com n até primeira ordem e aplicando o limite, obtemos

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left\{ -\frac{1}{\beta\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{2}} \ln[2 \cosh \beta(z\sqrt{\alpha r} + m\xi^1 + h)]^n \right\} = \\ & \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left\{ -\frac{1}{\beta\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{2}} \left(\ln[1] + n \ln[2 \cosh \beta(z\sqrt{\alpha r} + m\xi^1 + h)] + \dots \right) \right\} \\ & = -\frac{1}{\beta\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{2}} \ln[2 \cosh \beta(z\sqrt{\alpha r} + m\xi^1 + h)]. \quad (\text{A.9}) \end{aligned}$$

A.6 Traço da matriz A

O traço da matriz A , dado por $\text{Tr}_n \ln A$ é feito a partir da definição $\text{Tr}_n \ln A = \sum_i^n \ln \lambda_i$. Logo, o primeiro autovalor usando um vetor unitário genérico $(1,1,1,\dots,1)$ é

$$\lambda_1 = (1 - \beta) - (n - 1)\beta q \quad (\text{A.10})$$

o restante dos autovalores são degenerados $(n - 1)$, onde por meio de vetores do tipo $(1, -1, 0, \dots, 0)$, $(1, 0, -1, 0, \dots, 0)$ até $(1, 0, \dots, 0, -1)$ logo

$$\lambda_2 = \dots = \lambda_n = (1 - \beta) + \beta q. \quad (\text{A.11})$$

Com isso, aplicando o limite e fazendo uma expansão de primeira ordem temos

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \text{Tr}_n \ln A &= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln[(1 - \beta) - (n - 1)\beta q] \\ &+ (n - 1) \ln[(1 - \beta) + \beta q] \\ &= \frac{-\beta q}{1 - \beta + \beta q} + \ln[1 - \beta + \beta q]. \quad (\text{A.12}) \end{aligned}$$

APÊNDICE B – MÉTODOS NUMÉRICOS

B.1 Método de Newton–Raphson

Para o cálculo das raízes de sistemas não-lineares, o método de Newton–Raphson é o método empregado. Ele consiste em sucessivas iterações a partir de uma solução tentativa, a fim de se obter a solução do zero das funções

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}^{k+1}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}^k) + \mathbf{J}(\mathbf{x}^k)(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k) = 0, \quad (\text{B.1})$$

onde as funções não-lineares \mathbf{f} são linearizadas por meio da matriz jacobiana \mathbf{J} dadas por

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} f_1(\mathbf{x}) \\ f_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ f_n(\mathbf{x}) \end{pmatrix}. \quad (\text{B.2})$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(\mathbf{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2(\mathbf{x})}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n(\mathbf{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n(\mathbf{x})}{\partial x_n} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.3})$$

Com isso, temos o incremento da solução tentativa dado por

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \mathbf{s}(\mathbf{x}^k) \quad (\text{B.4})$$

onde

$$\mathbf{s}(\mathbf{x}^k) = \mathbf{J}^{-1}(\mathbf{x}^k)\mathbf{f}(\mathbf{x}^k). \quad (\text{B.5})$$

Logo, a solução tentativa converge para o resultado do zero de função.

Esse método foi implementado utilizando linguagem *FORTRAN* como mostra o Código C.1, em que a matriz jacobiana é calculada pelo Código C.2.

B.2 Fatoração LU

Para a resolução de sistemas lineares ($\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$), é utilizado a fatoração LU, que consiste em resolver o sistema linear aplicando duas matrizes, uma matriz triangular superior (*upper*) e outra matriz triangular inferior (*lower*), em que

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU}. \quad (\text{B.6})$$

O sistema pode ser solucionado tomando a forma

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{LUx} = \mathbf{b}. \quad (\text{B.7})$$

Resolve-se primeiramente $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$. Com \mathbf{y} resolvido, obtemos a solução \mathbf{x} da forma $\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$

A fatoração LU foi empregada via linguagem *FORTRAN* na forma do Código C.3.

B.3 Derivada por diferenças finitas

Para o cálculo das derivadas numéricas, é utilizado o método de diferenças finitas. A partir do polinômio de Taylor

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + f''(x_i)\frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2} + \dots \quad (\text{B.8})$$

podemos determinar a derivada a menos de um erro de truncamento, usando a forma

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} - \mathcal{O}(h^2), \quad (\text{B.9})$$

em que $h = x_{i+1} - x_i$. Adicionalmente, podemos chegar em outras fórmulas para a derivada primeira, sendo elas:

- Diferenças finitas atrasada de primeira ordem

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1}))}{h}. \quad (\text{B.10})$$

- Diferenças finitas atrasada de segunda ordem

$$f'(x_i) = \frac{3f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2}))}{2h}. \quad (\text{B.11})$$

- Diferenças finitas avançada de primeira ordem

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}. \quad (\text{B.12})$$

- Diferenças finitas avançada de segunda ordem

$$f'(x_i) = \frac{-3f(x_i) + 4f(x_{i+1}) - f(x_{i+2}))}{2h}. \quad (\text{B.13})$$

B.4 Metodo de Gauss-Legendre

Para realizar o cálculo de integrais, utiliza-se o método da quadratura de Gauss-Legendre. Este consiste em interpolar a função $f(x)$ usando polinômio interpolador $p(x)$ dentro do domínio desejado. Desta maneira, a integral a ser calculada se torna

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b p(x)dx, \quad (\text{B.14})$$

onde $p(x)$ é determinado pelo método de interpolação de Legendre, dado por

$$p(x) = \sum_i^N f(x_i)L_i(x). \quad (\text{B.15})$$

Logo, a aproximação toma forma

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b p(x)dx \quad (\text{B.16})$$

$$= \int_a^b \sum_i^N f(x_i)L_i(x)dx \quad (\text{B.17})$$

$$= \sum_i^N f(x_i)W_i, \quad (\text{B.18})$$

sendo W_i são os pesos e x_i são os pontos calculados. Em particular, os pesos e pontos para resolução das integrais estão disponíveis na literatura. Esse método foi implementado utilizando linguagem *FORTRAN*. O código está disponível em C.4.

APÊNDICE C – CÓDIGOS

Código C.1 – Parte da sub-rotina do método de Newton.

```

1   do while (erro >= limit)
2       call jacobiana(xn, limit, MJ)      ! calculo da
        jacobiana
3       do i=1, N
4           f(i) = funcao(xn, i)          ! funcao F
5       end do
6       call lu(MJ, f, s)                 ! solucao por LU
7       do i=1, N
8           xn(i) = xn(i) - s(i)
9           er(i) = abs(s(i))
10      end do
11      erro = maxval(er)
12      k = k + 1
13      ! if (k == 20) return
14  end do

```

Código C.2 – Parte da sub-rotina para calcula da matriz jacobiana.

```

1   MJ = 0.0
2   do i=1, N
3       do j=1, N
4           xx = x
5           xx(j) = x(j)
6           f(1) = funcao(xx, i)
7           xx(j) = x(j) + h      ! incremento para derivada f(x+h)
8           f(2) = funcao(xx, i)
9           xx(j) = x(j) + 2.0*h  ! incremento para derivada f(x
        +2h)
10          f(3) = funcao(xx, i)
11          MJ(i, j) = derivada(f, h)  ! calculo da derivada
        finita
12      end do
13  end do
14  return

```

Código C.3 – Parte da sub-rotina da fatoraçoão LU.

```

1  !escalonamento e obtencao de L e U
2
3  do i = 1,n-1
4      do j = i+1,m
5          mji = a(j,i)/a(i,i)
6          L(j,i) = mji
7          do k = i ,n
8              a(j,k) = a(j,k) - mji*a(i,k)
9          end do
10         end do
11     end do
12
13     !valores de y a partir de Ly = b
14
15     y = 0.0
16     do i = 1, N
17         c(i) = 0.0
18         do j = 1, i-1
19             c(i) = c(i) + y(j)*L(i,j)
20         end do
21         y(i) = b(i) - c(i)
22     end do
23
24     !valores de x a partir de Ux = y
25
26     x = 0.0
27     do i = n,1,-1
28         c(i) = 0.0
29         do j = i+1,m
30             c(i) = c(i) + a(i,j)*s(j)
31         end do
32         s(i) = (y(i) - c(i))/a(i,i)
33     end do

```

Código C.4 – Parte da sub-rotina para integral por Quadratura de Gauss-Legendre.

```

1      ab=-10.0;  b=10.0    !intervalo
2      nn=1                                !Numero de
      repeticoes
3      dx=(b-ab)/(1.0*nn)
4      soma1=0.0d0s
5      do j=1,nn
6          c=ab+dx*(1-j)
7          d=c+dx
8          soma=0.0d0
9          do k=1,64
10             soma=soma+w(k)*funcaointegral(x1(k)*dx/2.0+(d+c
                )/2.0,x,i)*dx/2.0
11         end do
12         soma1=soma1+soma
13     end do
14     resultado=soma1

```

Código C.5 – Parte da sub-rotina para determinar os parâmetros de ordem em função da temperatura.

```

1      dt=0.01
2      Tmax=2.0
3      temperatura=0.01
4      x0=x
5      do while(temperatura<=Tmax)
6          call newton(x0,xn)
7          x0=xn
8          write(10,*)temperatura,xn
9          temperatura=temperatura+dt
10     end do

```

Código C.6 – Parte da sub-rotina para determinar a susceptibilidade em função da temperatura.

```

1      do while(temperatura <= Tmax)
2          campo=0.0
3          call newton(x0,xn0)
4          x0=xn0
5          f(1)=x0(1)
6
7          campo=h
8          call newton(x1,xn1)
9          x1=xn1
10         f(2)=x1(1)
11
12         campo=2.0*h
13         call newton(x2,xn2)
14         x2=xn2
15         f(3)=x2(1)
16
17         xi=derivada(f,h)
18
19         write(20,*) temperatura ,xi
20         temperatura=temperatura+dt
21     end do

```

Código C.7 – Parte da função energia livre.

```

1      beta=1.0d0/T
2      m2=(x(1)**2)/2.0d0
3      r=x(2)/((1.0d0-beta+beta*x(2))**2)
4      alog=a*(log(1.0d0-beta+beta*x(2))-beta*x(2)/(1.0d0-beta
5          +beta*x(2)))/(2.0d0*beta)
6      ar=a*beta*r*(1.0d0-x(2))/2.0d0
7      integral=T*integralf(N,x,T,a,i)
8      energia=m2+alog+ar-integral
9      return

```

Código C.8 – Parte da função dos parâmetros de ordem m e q.

```
1 pi=3.14159265358979323846d0
2 b=1.0d0/T
3 r=x(2)/((1.0d0-b+b*x(2))**2)
4 Dz=exp(-(z**2)/2.0d0)/(sqrt(2.0d0*pi))
5 funsao=Dz*tanh(b*(sqrt(a*r)*z+x(1)))*i
6 if (i==3) then
7     funsao=Dz*log(2.0d0*cosh(b*(sqrt(a*r)*z+x(1))))
8 end if
9 return
```