

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

EFECTOS DE LA DISIPACIÓN EN SISTEMAS DE ESPINES CUÁNTICOS DESORDENADOS

Tesis presentada para optar al título de Doctor de la Universidad de Buenos Aires en el área de Ciencias Físicas

Homero Fernando Lozza

Director de Tesis: Gustavo S. Lozano

Lugar de Trabajo: Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA

Buenos Aires, Diciembre de 2005

Resumen

En esta tesis se analizan los efectos combinados de la disipación, el desorden y las fluctuaciones cuánticas en sistemas de espines que pueden ser utilizados como modelos de vidrios de espín. El comportamiento de estos sistemas es investigado tanto con modelos de espines en dimensión finita como también con modelos de campo medio. Para el primer caso se considera un anillo de espines s = 1/2 con interacciones a primeros vecinos en presencia de un campo transverso y acoplados a un baño térmico Óhmico. Este modelo es estudiado por medio de simulaciones de Monte Carlo encontrándose estados localizados en las cadenas finitas, y una fase de vidrio de espín en la cadena infinita. Para el segundo caso se consideran los modelos p-espín cuántico con espines esféricos acoplados a distintos tipos de baños térmicos, y p-espín cuántico con espines s = 1/2 acoplados a un baño térmico Ohmico. Estos modelos se analizan con el formalismo del tiempo imaginario y el método de las réplicas. Se presentan los diagramas de fase que resultan de la solución numérica del parámetro de orden. Se encuentra que si bien las fluctuaciones cuánticas reducen la temperatura para la cual ocurre la transición a la fase ordenada, ésta se extiende hasta temperatura nula. Por el contrario, cuanto mayor es el acoplamiento con el baño térmico mayor es la región que ocupa la fase ordenada en el espacio de parámetros. Resultados similares se obtienen para la transición dinámica aplicando la condición de estabilidad marginal.

Palabras claves: Modelos de espines cuánticos, desorden, baño térmico

Dissipation effects on quantum disordered spin systems

Abstract

In this thesis, the joint effects of dissipation, disorder and quantum fluctuations are analyzed in spin systems that might be used as spin glass models. The behavior of these systems is investigated both with spin models in finite dimensions and with mean-field models. For the first case, it is considered a ring of s = 1/2 spins with nearest-neighbour interactions with an applied transverse field and coupled to an Ohmic thermal bath. This model is studied by means of Monte Carlo simulations finding localized states in the finite chain, and a spin-glass phase in the infinite chain. For the second case, the quantum spheric *p*-spin model coupled to different types of thermal baths, and the quantum s = 1/2 *p*-spin model coupled to an Ohmic thermal bath are considered. These models are analyzed with the imaginary-time formalism and the replica method. The phase diagrams are shown after numerical resolution of the order parameter. On the one hand, it is found that quantum fluctuations reduce the phase transition temperature, but the ordered phase exists yet at zero temperature. On the other hand, it is shown that the bigger is the coupling to the thermal bath, the larger is the region on the parameters space occupied by the ordered phase. Similar results are found for the dynamic transition under the ansatz of marginal stability.

Keywords: Quantum spin models, disorder, thermal bath

Índice general

| 1. | Intro | oducción | 7 | | |
|----|--------------------|---|----|--|--|
| | 1.1. | Vidrios | 7 | | |
| | 1.2. | Vidrios de espín | 9 | | |
| | 1.3. | Fluctuaciones cuánticas | 9 | | |
| | 1.4. | Acoplamiento con el entorno | 10 | | |
| | 1.5. | Objetivos y organización de esta tesis | 12 | | |
| 2. | Vidrios de espín 1 | | | | |
| | 2.1. | Propiedades generales de los vidrios de espín | 15 | | |
| | 2.2. | Modelos de vidrio de espín | 17 | | |
| | 2.3. | Promedios en sistemas desordenados | 20 | | |
| | 2.4. | Parámetros de orden | 21 | | |
| 3. | Vidr | ios de espín cuánticos | 23 | | |
| | 3.1. | Transiciones de fase cuánticas | 23 | | |
| | 3.2. | Modelos de vidrios de espín cuánticos | 25 | | |
| | 3.3. | Modelo clásico en $(d+1)$ dimensiones | 26 | | |
| | 3.4. | Comportamiento crítico | 27 | | |
| | 3.5. | Singularidades de Griffiths-McCoy | 28 | | |
| 4. | Siste | mas disipativos | 31 | | |
| | 4.1. | Sistemas abiertos | 31 | | |
| | 4.2. | Ecuación de Langevin clásica | 32 | | |
| | 4.3. | Modelo de sistemas más ambiente | 33 | | |
| | | 4.3.1. Equivalencia con la ecuación de Langevin | 34 | | |
| | 4.4. | Integral de camino en tiempo imaginario | 35 | | |
| | | 4.4.1. Funcional de la influencia | 36 | | |
| | | 4.4.2. Funcional de la influencia para un baño Óhmico | 38 | | |
| 5. | Efect | tos de la disipación en cadenas de espines cuánticos | 41 | | |
| | 5.1. | Introducción | 41 | | |
| | 5.2. | Modelo de espín-bosón | 41 | | |
| | 5.3. | Cadenas de espines acopladas al ambiente | 44 | | |
| | | 5.3.1. Modelo | 45 | | |

| | 5.4. | Vinculación con el modelo de Ising de largo alcance | 47 |
|----|------|--|-----|
| | 5.5. | Simulaciones de Monte Carlo | 49 |
| | 5.6. | Diagrama de fase | 50 |
| | | 5.6.1. Análisis del parámetro de Binder | 50 |
| | | 5.6.2. Susceptibilidad lineal global | 55 |
| | 5.7. | Relación de escalas en el caso crítico | 58 |
| | | 5.7.1. Relación de escalas para el parámetro de Binder | 58 |
| | | 5.7.2. Distribución de susceptibilidades locales | 60 |
| | 5.8. | Conclusión | 62 |
| 6. | Efec | tos de la disipación sobre sistemas de vidrios cuánticos | 63 |
| | 6.1. | Introducción | 63 |
| | 6.2. | Modelo de p -espín esférico cuántico | 64 |
| | 6.3. | Modelo de <i>p</i> -espín esférico cuántico acoplado al ambiente | 65 |
| | 6.4. | Formalismo con réplicas | 69 |
| | - | 6.4.1. Solución con réplicas | 70 |
| | 6.5. | Diagrama de fase | 73 |
| | 6.6. | Conclusión | 79 |
| 7 | Efec | tos de la disinación en modelos de espines cuánticos s = $1/2$ desor | _ |
| •• | den | ados | 81 |
| | 7 1 | Introducción | 81 |
| | 7.2 | Modelo de <i>n</i> -espín cuántico $s = 1/2$ desordenado acoplado al ambiente | 81 |
| | 7.2 | Función de partición para el sistema total | 82 |
| | 1.0. | 7 3 1 Solución con réplicas | 85 |
| | 74 | Resultados | 90 |
| | 1.1. | 7 4 1 Método numérico | 90 |
| | | 7.4.2 Diagrama de fases | 92 |
| | | 74.3 Estabilidad de la solución 1s-BSB | 98 |
| | | 744 Transición dinámica | 90 |
| | 7.5 | Conclusión | 100 |
| | 1.0. | | 100 |
| 8. | Con | clusión | 103 |
| А. | | | 107 |
| | A.1. | Cálculo de la función de partición para el modelo p -espín esférico cuántico | |
| | | desordenado acoplado al ambiente | 107 |
| | A.2. | Cálculo del autovalor del replicón para el modelo p -espín esférico cuántico | |
| | | desordenado acoplado al ambiente | 111 |
| | | A.2.1. El tamaño de bloque m | 112 |
| в. | | | 113 |
| | B.1. | Cálculo del replicón para el modelo p -espín cuántico $s = 1/2$ desordenado | |
| | | acoplado al ambiente | 113 |
| | | | |

Capítulo 1 Introducción

1.1. Vidrios

En la naturaleza se encuentran sistemas que a priori parecen muy diferentes, como los vidrios estructurales, los vidrios de espín, los materiales granulares, los materiales desordenados, y los polímeros, que comparten el comportamiento de vidrio [1]. Este comportamiento se caracteriza por presentar tiempos de relajación muy largos, que llegan usualmente a exceder los tiempos de observación. El tiempo transcurrido desde el instante en que el sistema fue preparado hasta el momento de la observación se lo llama tiempo de espera, y figurativamente determina la "edad" del sistema. Dado que las propiedades estáticas y dinámicas de estos sistemas dependen de su "edad", a estos procesos que ocurren fuera del equilibrio se los llama comúnmente fenómenos de "envejecimiento" [2].

La clase más importante de vidrios (que incluyen a los vidrios de ventana) son los vidrios estructurales que se generan luego de un enfriamiento lento del líquido [3]. Luego de enfriar desde alta temperatura hasta por debajo de la temperatura de fusión T_f , algunas veces la cristalización no ocurre y se arriba a un estado de líquido sobreenfriado. Al disminuir la temperatura, la viscosidad $\eta(T)$ crece, siendo cada vez más difícil de observar el flujo plástico. Cuando ésta alcanza el valor $\eta(T_g) \sim 10^{12}$ Pa sec define la temperatura de vidrio T_g , como la temperatura para la cual ocurre un salto en la capacidad térmica o en el coeficiente de expansión térmica [3]. Los vidrios formados por líquidos se llaman vidrios estructurales porque el patrón de enlaces entre sus componentes microscópicos evoluciona muy lentamente hacia el equilibrio.

Aunque el envejecimiento fue identificado hace mucho tiempo en el estudio de polímeros ha recibido un renovado interés en conexión con el estudio de los vidrios de espín [2]. Las mediciones de la magnetización en los vidrios de espín han mostrado que el envejecimiento es una propiedad general de la fase de baja temperatura de estos sistemas. Existen diferentes tipos de materiales de vidrios de espín, los más comunes son los vidrios de espín metálicos. Estos son sistemas magnéticos diluidos donde el comportamiento de vidrio proviene del desorden en el patrón de interacciones, en vez de ser auto-generado como en el caso de los vidrios estructurales. Ciertamente, la dilución aleatoria genera interacciones con signos que compiten, y el sistema es entonces frustrado ya que una fracción finita de enlaces no puede ser satisfecha. El envejecimiento es consecuencia de la lenta evolución del patrón de enlaces satisfechos que se vuelve fuertemente inhibido cuando la temperatura es reducida.

Otra clase importante de sistemas con propiedades de vidrio son los sistemas forzados, que bajo ciertas condiciones, alcanzan un estado estacionario caracterizado por una distribución de probabilidad no Gibbsiana [4]. Después de aplicar una perturbación dependiente del tiempo de frecuencia $\omega > 1/t_{eq}$, a partir de un sistema inicialmente en equilibrio con tiempo de relajación t_{eq} , se alcanza un nuevo estado estacionario que en muchos aspectos es similar al estado de envejecimiento de un sistema con "edad" $\sim 1/\omega$. Por ejemplo, la materia granular permanece en estados estáticos meta-estables mientras no se apliquen fuerzas externas de corte u oscilantes. Si se la lleva fuera del equilibrio a través de una perturbación externa, el sistema es conducido a configuraciones más compactas [4].

Luego de varias décadas de investigación activa en el área se cuenta con un entendimiento más profundo de las propiedades de vidrio [2, 5, 6]. Sin embargo, a pesar de la impresionante actividad en este campo, todavía no se encuentra una respuesta definitiva a algunas preguntas claves como cuál es la naturaleza de la transición de vidrio.

Recordamos que los sistemas que hemos presentado, en principio muy diferentes, comparten muchas propiedades dinámicas. Por este motivo esperamos que una teoría satisfactoria para alguno de ellos pueda mejorar la comprensión de otros que también exhiben el comportamiento de vidrio. El estudio teórico de los vidrios de espín se ha visto impulsado por esta visión del problema. Si bien los modelos de vidrio de espín tienen interés propio, se cuenta con más herramientas para el estudio analítico de estos modelos con desorden congelado que para modelos con desorden auto-generado, como en el caso de los vidrios estructurales.

En esta tesis consideraremos modelos de espines desordenados que pueden utilizarse como modelos de vidrio de espín. En lo siguiente nos concentraremos principalmente en estos sistemas y proponemos la referencia [7] para consultar sobre los líquidos sobreenfriados y la referencia [4] para consultar sobre los sistemas forzados.

1.2. Vidrios de espín

El estudio teórico sistemático de las propiedades de la fase de vidrio de espín se desarrolló a partir del trabajo de Edwards y Anderson [8] en donde se propone un modelo relativamente simple de espines con interacciones al azar. Desde entonces, varios han sido los desarrollos teóricos que se produjeron para explicar las distintas propiedades de esta fase en modelos como el de Edwards-Anderson [8] y extensiones del mismo.

Una de las principales dificultades teóricas asociadas al estudio de estos modelos está relacionada con el cálculo de propiedades termodinámicas. Para el análisis de la fase de vidrio de espín se pueden seguir dos estrategias diferentes. La primera de ellas está basada en el método de las réplicas y su aplicación al estudio de los vidrios de espín se remonta al trabajo de Edwards y Anderson [8]. Para la correcta aplicación de esta método es necesario introducir la idea de ruptura de la simetría de réplicas [9]. La imagen que emerge de esta teoría es una descomposición del espacio de fases en los llamados estados puros o componentes ergódicas, separadas por barreras de potencial de altura infinita en el límite termodinámico. Esta situación se presenta en la fase de vidrio de espín cuyas propiedades para el equilibrio han podido ser descriptas adecuadamente por medio de este método.

La segunda estrategia está basada en el estudio de la dinámica del modelo acoplado a un baño térmico [2]. La principal ventaja de este enfoque es que permite obtener una descripción cualitativamente correcta del fenómeno de envejecimiento.

1.3. Fluctuaciones cuánticas

Los sistemas mencionados anteriormente son clásicos. En muchos casos de interés práctico los efectos cuánticos tienen un rol importante. Una pregunta que merece un cuidadoso análisis teórico y experimental es cuánto de la fenomenología clásica de vidrio sobrevive a temperaturas muy bajas donde los efectos cuánticos son importantes.

Del lado experimental, fases de vidrio de espín han sido identificadas en muchos sistemas de materia condensada a bajas temperaturas. Entre ellos podemos citar a la red de Kagome bicapa $SrCr_8Ga_4O_{19}$ [10], el magneto dipolar de Ising LiHo_xY_{1-x}F₄ [11, 12, 13, 14] y el superconductor de alta T_c La_{2-x}Sr_xCu₂O₄ [15, 16, 17]. Fases de vidrio cuánticas también se observan en sistemas electrónicos [18, 19] y en vidrios estructurales como el Mylar [20, 21].

La imposibilidad de simular en tiempo real la evolución de un sistema cuántico de tamaño moderado muestra la importancia de resolver modelos de campo medio simples o modelos de baja dimensionalidad [22]. El primer trabajo teórico que analizó los efectos cuánticos en un modelo de vidrio de espín basado en el modelo de Heisenberg con una teoría de campo medio en el contexto del método de las réplicas es de Bray y Moore [23]. En este artículo, los autores prueban que las fluctuaciones cuánticas no siempre destruyen la fase de vidrio. Este resultado aclaró una controversia de varios años [24, 23] y alentó la discusión de diferentes modelos y distintas técnicas apropiadas para el estudio de vidrios de espín cuánticos.

Actualmente, los modelos de espines cuánticos desordenados en dimensión finita son un foco de creciente interés [22]. Estos modelos además de emplearse en el estudio de la fase de vidrio de espín cuántica, son adecuados para el estudio de las singularidades de Griffiths-McCoy que llevan a una fase paramagnética y fenómenos críticos no triviales.

Por otro lado, ciertos fenómenos peculiares de las transiciones de fase cuánticas han sido señalados en sistemas con desorden y sin desorden tanto experimentalmente como analíticamente. Una realización experimental de lo primero es el magneto dipolar de Ising $LiHo_xY_{1-x}F_4$ en presencia de un campo transverso que exhibe una fase de vidrio de espín para bajas temperaturas [11, 12, 13, 14]. Para este sistema, la transición de fase es controlada por el campo transverso y es de segundo orden para campos pequeños, pero cambia a primer orden cerca del punto crítico cuántico. Teóricamente, se encuentra que los modelos de espines cuánticos desordenados con interacciones de a $p \ge 3$ espines tienen diferentes transiciones de fase [25]. Las transiciones de fase entre estados ordenados y desordenados presentan un punto tricrítico donde la transición termodinámica cambia de primero a segundo orden. Cerca de la temperatura crítica clásica los efectos cuánticos son poco importantes y la transición de fase es discontinua en el parámetro de orden pero de segundo orden termodinámico. Por el contrario, cerca del punto crítico cuántico las fluctuaciones cuánticas llevan a una transición termodinámica de primer orden [26]. A través de la línea de primer orden, la susceptibilidad es discontinua y muestra efectos de histéresis. Esto es similar a lo que fue observado en [13] en el magneto de Ising $LiHo_xY_{1-x}F_4$ con acoplamiento dipolar en un campo transverso.

1.4. Acoplamiento con el entorno

El estudio teórico de los vidrios de espín se ha centrado en el análisis de modelos de espines desordenados que solamente consideran la interacción con un campo magnético externo. Sin embargo, estos sistemas no se encuentran en la naturaleza totalmente aislados, por lo que un modelo más realista debe incorporar los efectos del contacto con ambientes de diferentes tipos. Como la física de un sistema con más de un grado de libertad, posiblemente desordenado, acoplado al ambiente es un problema extremadamente complejo, sólo recientemente ha comenzado a ser investigado teóricamente. En particular, en el estudio de modelos de espines cuánticos acoplados al ambiente se ha buscado extender las ideas originalmente propuestas para la resolución del modelo espín-bosón [27, 28, 29, 30].

La física de baja energía de muchos sistemas con efecto túnel, es bien descripta por el modelo de espín-bosón para el cual dos estados equivalentes degenerados son representados por los autoestados $s^z = \pm 1$ de un pseudo-espín de Ising asociados al operador $\hat{\sigma}^z$ [31]. Un campo transverso acoplado a $\hat{\sigma}_x$ representa un elemento de la matriz de túnel. El ambiente se modela por un conjunto de osciladores armónicos cuánticos, y el acoplamiento con éste está dado en términos de lo que se llama la densidad espectral del baño térmico [32], $J(\omega) \propto \alpha \omega^s$ para $\omega \ll \omega_c$, donde α es una constante de acoplamiento adimensional y ω_c es una frecuencia de corte ultravioleta.

En este trabajo, el camino que vamos a seguir para estudiar los efectos de la disipación sobre la transición de fase, el comportamiento crítico, la fase ordenada y las propiedades de localización y decoherencia es la generalización del modelo de espín-bosón a conjuntos de sistemas de dos niveles con interacciones mutuas desordenadas. Aquí, presentaremos un formalismo adecuado para estudiar a un sistema no lineal general, posiblemente desordenado, en contacto con un baño térmico que pueda ser utilizado con modelos de vidrios. El método emplea el enfoque de Feynman y Vernon para la disipación que consiste en modelar el acoplamiento con el ambiente por un ensamble de osciladores armónicos cuánticos [33]. Como caso particular, estudiaremos los estados de equilibrio y algunos aspectos de la dinámica del modelo de *p*-espín cuántico desordenado totalmente conectado, tanto en su versión esférica como con espines de Ising [28, 29].

También nos acercaremos al problema de espines desordenados en dimensión finita por medio de simulaciones de Monte Carlo efectuadas sobre el sistema clásico equivalente en (d+1) dimensiones, que complementa a los estudios de modelos de campo medio [30]. Para estos sistemas de dos niveles ubicados en un espacio de dimensión finita con interacciones aleatorias cabe la pregunta de cuál es el efecto del baño sobre la fase de Griffiths. La respuesta a esta pregunta es actualmente debatida. El caso más sencillo de espines en redes de una, dos y tres dimensiones sin baño ha generado importantes controversias [34, 35, 36, 37, 38, 39, 40]. Sólo recientemente, reuniendo los esfuerzos en el área de las simulaciones numéricas con los avances teóricos ha podido confirmarse la presencia de esta fase en estos modelos de espines [38, 41].

1.5. Objetivos y organización de esta tesis

Esta tesis se centra en el estudio de los efectos de la disipación sobre sistemas de espines cuánticos con desorden, que pueden ser utilizados como modelos de vidrios de espín. Presentamos los resultados de los estudios realizados sobre las propiedades para el equilibrio, propiedades críticas y algunos aspectos de la dinámica de estos sistemas acoplados al ambiente para modelos de campo medio y de dimensión finita. El objetivo es analizar los efectos de distintos tipos de baño sobre las fases de baja temperatura. En particular buscamos describir el comportamiento desde temperatura nula, donde pueden ocurrir transiciones de fase cuánticas, hasta temperaturas finitas, donde las transiciones son controladas parcialmente por las fluctuaciones térmicas. Los trabajos de investigación que originaron esta tesis han sido presentados en [28, 29, 30, 42]. Este manuscrito incorpora principalmente los resultados de [28, 29, 30] y se propone continuar con la referencia [42] en lo referente a la dinámica fuera del equilibrio.

Esta tesis está organizada de la siguiente manera. En el Capítulo 2 presentamos las propiedades generales de los vidrios de espín y exponemos algunas de las ideas tomadas en la investigación teórica de esta área. En el Capítulo 3 resumimos los resultados de una experiencia [13] realizada sobre un sistema magnético que sugieren que las fluctuaciones cuánticas inducen una transición de fase entre una de vidrio de espín y una paramagnética. Luego, introducimos un modelo de vidrio de espín que incorpora un término de túnel con el que se controlan las fluctuaciones cuánticas. Las técnicas necesarias para estudiar modelos de espines cuánticos disipativos con desorden y sin desorden se resumen en el Capítulo 4. Comenzamos ese Capítulo exponiendo las ideas que usualmente se siguen para el tratamiento de los sistemas abiertos. Luego nos concentramos en el método de la funcional de la influencia de Feynman y Vernon [33] que es el método que aplicaremos para el estudio de los sistemas cuánticos disipativos.

Los tres capítulos siguientes (5 a 7) contienen los aportes originales de esta tesis en relación a sistemas de espines cuánticos desordenados disipativos. En el Capítulo 5 presentamos los resultados de simulaciones de Monte Carlo realizadas sobre una cadena de espines en presencia de un campo transverso y acoplada a un baño térmico Óhmico a temperatura nula [30]. En primer lugar, por medio de una serie de simulaciones efectuadas para la cadena con interacciones mutuas constantes probamos la eficiencia de nuestro algoritmo numérico y buscamos extender las conclusiones del modelo de espín-bosón. Luego, consideramos el límite termodinámico e interacciones aleatorias. Mostramos que el baño estabiliza a la fase con orden de vidrio y hallamos evidencias de la existencia de singularidades de Griffiths-McCoy.

En el Capítulo 6 estudiamos el modelo *p*-espín esférico cuántico desordenado acoplado a distintos tipos de baño [28]. Consideramos a las interacciones entre espines de rango infinito definiendo así un modelo de campo medio. Presentamos las expresiones correspondientes al parámetro de orden y la energía libre para las distintas fases, dejando su cálculo para el Apéndice A. Seguidamente, mostramos los diagramas de fases para el equilibrio y para la condición de estabilidad marginal descripta en el Apéndice A que resultan de resolver numéricamente las expresiones analíticas anteriormente encontradas. En general encontramos que la fase de vidrio de espín ocupa un área mayor del espacio de parámetros cuando crece el acoplamiento con el ambiente. Al disminuir la temperatura, observamos la existencia de un punto tricrítico que señala el paso de transiciones termodinámicas de segundo orden a transiciones termodinámicas de primer orden.

En el Capítulo 7 estudiamos un modelo de p-espines cuánticos desordenados, más realista, acoplado a un baño Óhmico en el que reemplazamos los espines esféricos del Capítulo 6 por espines s = 1/2 [29]. Presentamos el resultado de las soluciones numéricas para las expresiones analíticas de la energía libre, la entropía y la susceptibilidad como función de la intensidad del campo transverso. Hallamos que el diagrama de fases es cualitativamente equivalente al de la versión con espines esféricos con presencia de transiciones termodinámicas de primer orden. También graficamos el resultado de aplicar la condición de estabilidad marginal que puede utilizarse como un indicador de dónde podría ubicarse la curva de transición dinámica para un sistema de espines discretos. Dejamos los cálculos que resultan de aplicar esta condición para el Apéndice B.

Finalmente, en el Capítulo 8 presentamos las conclusiones y algunas ideas de como continuar la investigación según las líneas aquí propuestas.

Capítulo 2 Vidrios de espín

2.1. Propiedades generales de los vidrios de espín

Un vidrio de espín es un conjunto de espines cuyo estado para temperaturas bajas es "desordenado congelado" (quench disorder). Así, se diferencia de otros sistemas magnéticos en los que se presenta un patrón uniforme (como el ferromagneto) o periódico (como el anti-ferromagneto). Para que se produzca este estado se necesita en general la concurrencia de dos efectos: las diferentes interacciones entre los momentos deben competir en el sentido que no haya una única configuración de espines favorecida por todas las interacciones, (este efecto se conoce comúnmente como *frustración*) y las interacciones deben ser por lo menos parcialmente aleatorias [6].

Experimentalmente se ha observado el comportamiento de vidrio de espín en una gran variedad de sistemas [6, 43]. Los primeros en ser ampliamente estudiados consisten en soluciones diluidas de impurezas de metales magnéticos de transición en metales nobles. También se hallaron estados de vidrio de espín en aislantes magnéticos y aleaciones amorfas. Más aún, el grado de libertad de espín no necesariamente debe ser magnético. Propiedades análogas han sido vistas en mezclas ferroeléctricas-antiferroeléctricas, donde el dipolo eléctrico toma el lugar del magnético.

Diversas propiedades se asocian a la fase de vidrio de espín. El "desorden congelado" presente en este estado sugiere la existencia de una magnetización local y espontánea,

$$m_i = \langle s_i \rangle, \tag{2.1}$$

no nula para cada sitio i, a pesar de que la magnetización promedio,

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} m_i \,, \tag{2.2}$$



Figura 2.1: Susceptibilidad de AC de CuMn (1% de Mn). Interior: Dependencia con la frecuencia desde 2.6Hz (triángulos) hasta 1.33kHz (cuadrados). Gráfico tomado de [45]

se anule. Esta magnetización local y espontánea lleva a una disminución de la susceptibilidad respecto de la que se mediría en su ausencia. El efecto se manifiesta como un pico en la susceptibilidad a una temperatura bien definida [44, 45] que sugiere la existencia de una transición de fase de segundo orden entre un estado paramagnético y un estado de vidrio de espín (ver Fig. 2.1).

La relación entre la susceptibilidad y los "momentos congelados" se puede ilustrar suponiendo que se tiene un conjunto de espines de Ising $(s_i = \pm 1)$. La susceptibilidad en el mismo sitio χ_i se define como la magnetización m_i inducida en el sitio *i* por un campo externo $B_i = -b_i/g\mu_B$ actuando en el mismo sitio, siendo *g* el factor giromagnético y μ_B el magnetrón de Bohr:

$$\chi_i \equiv \frac{\partial m_i}{\partial b_i}.$$
(2.3)

El teorema de fluctuación-disipación (en inglés, fluctuation-dissipation theorem, abreviado por FDT) de la mecánica estadística relaciona las fluctuaciones en equilibrio de cualquier variable termodinámica con el valor medio de esa variable, inducido por el campo conjugado. Para este caso se tiene

$$T\chi_i = \langle (s_i - \langle s_i \rangle)^2 \rangle = 1 - m_i^2, \qquad (2.4)$$

donde la constante de Boltzmann se toma $k_B = 1$ y en el último paso se usa que $s_i^2 = 1$. Promediando sobre todos los sitios del sistema resulta

$$\chi_{loc} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \chi_i = \frac{1 - N^{-1} \sum_{i=1}^{N} m_i^2}{T}.$$
(2.5)

La reducción de la susceptibilidad local promedio χ_{loc} respecto de la ley de Curie, que se aplica para momentos libres, es una manifestación directa del valor medio cuadrático no nulo de la magnetización local y espontánea en el estado congelado. Aunque experimentalmente no se mide la susceptibilidad local, sino la llamada susceptibilidad uniforme

$$\chi = \frac{1}{N} \sum_{ij} \chi_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{ij} \frac{\partial m_i}{\partial b_j}$$
(2.6)

se puede demostrar que los elementos fuera de la diagonal χ_{ij} se anulan (para campo nulo) si las interacciones entre diferentes espines están simétricamente distribuidas [6]. Finalmente, si χ_{loc} presenta un pico, también lo tiene la susceptibilidad uniforme χ , por lo que experimentalmente se reconoce la existencia de una magnetización local y espontánea.

La susceptibilidad dinámica o de AC es la respuesta de la magnetización m_i en el sitio *i* a un campo externo $B_i(\omega) = -b_i(\omega)/g\mu_B$ de frecuencia ω :

$$\chi_{i_{\rm AC}}(\omega) = \frac{\partial m_i}{\partial b_i(\omega)}.$$
(2.7)

La temperatura para la cual se aprecia un pico en la susceptibilidad de AC define a la temperatura de congelamiento $T_{\rm SG}$ [45] y su valor depende de la frecuencia del campo magnético aplicado (ver Fig. 2.1). (La "verdadera" $T_{\rm SG}$ se debería definir en el límite de frecuencia nula.) Esta dependencia universal con la frecuencia diferencia a los vidrios de espín de los sistemas magnéticos convencionales en los que no se observa ninguna dependencia en frecuencias mucho menores que las características del sistema microscópico. La presencia de este comportamiento de vidrio, con tiempos característicos muy largos, sugiere la existencia de numerosas configuraciones de espines meta-estables con una distribución de barreras de energía que las separa.

2.2. Modelos de vidrio de espín

Los fenómenos de vidrio de espín universalmente observados sugieren la adopción de modelos que incorporen las características de desorden e interacciones que compiten. El primer modelo construido siguiendo este espíritu [46] se basa en una idealización de los sistemas clásicos de vidrio de espín formados por impurezas de metales magnéticos de transición en metales nobles que transportan el momento magnético local. En estos sistemas, la interacción entre los momentos impuros proviene de que cada uno polariza su entorno de mar de Fermi formado por los electrones del metal noble. Para un solo espín s, esta polarización varía espacialmente como

$$\langle \mathbf{s}_{ind}(\mathbf{r}) \rangle \propto \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{s}_i \chi_0(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)}$$
 (2.8)

alrededor de una impureza ubicada en \mathbf{R}_i , donde la función

$$\chi_0(\mathbf{q}) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}$$
(2.9)

es la susceptibilidad de espín de los electrones de conducción. La función $f_{\mathbf{k}}$ es la función de Fermi y $\epsilon_{\mathbf{k}}$ es la energía de banda del electrón con momento \mathbf{k} [47]. En la aproximación de electrón libre, $\chi_0(\mathbf{q})$ tiene una derivada segunda que diverge logarítmicamente en $q = 2k_F$ que conduce a un comportamiento oscilante

$$\chi_0 \propto \frac{\cos 2k_F r}{r^3}, \quad 2k_F r \gg 1,$$
 (2.10)

en la polarización inducida de los electrones de conducción. Como las interacciones entre los momentos de las impurezas ocurren cuando una impureza siente la polarización debida a otra, la intensidad de la interacción efectiva entre impurezas es proporcional al momento magnético inducido en los electrones de conducción y por lo tanto también muestra esta característica oscilante.

Las oscilaciones de la ecuación (2.10) logran las interacciones que compiten y el desorden proviene de la aleatoriedad en la posición de los espines \mathbf{s}_i . De esta manera, este modelo simple para los vidrios de espín para el cual el espín \mathbf{s}_i se ubica en un sitio al azar \mathbf{R}_i , e interactúa proporcionalmente a la ecuación (2.8), describe una cantidad relevante de la física de este estado.

Sin embargo, como el comportamiento de vidrio de espín se observa en una amplia variedad de sistemas para las cuales no existen interacciones del tipo de la ecuación (2.10) es conveniente tratar con modelos aún mas simples. Un modelo de estas características fue introducido por Edwards y Anderson [8] (EA) en el cual los espines se ubican en una red regular (invariante frente a traslaciones) y las interacciones son al azar. Explícitamente, el Hamiltoniano es

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij}^{N} J_{ij} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j , \qquad (2.11)$$

donde las J_{ij} son variables aleatorias independientes que representan la intensidad de la interacción entre el sitio i y j. La distribución de probabilidad depende de la separación entre los sitios de la red, $\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$. En particular, suele considerarse el caso de una distribución de probabilidad Gaussiana y simétrica,

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{(2\pi\Delta_{ij})^{1/2}} \exp\left(-\frac{J_{ij}^{2}}{2\Delta_{ij}}\right), \qquad (2.12)$$

con valor medio

$$[J_{ij}] = 0, (2.13)$$

y varianza

$$[J_{ij}^2] = \Delta_{ij} = \Delta(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j). \qquad (2.14)$$

Distintos tratamientos se han seguido para la magnitud Δ_{ij} . El término "modelo EA" usualmente se refiere al caso que Δ_{ij} es una magnitud de corto alcance. Sin embargo, el caso de largo alcance y en particular el de alcance infinito para el cual Δ_{ij} es independiente de i y de j es muy interesante porque conduce a teorías de campo medio. La versión de Ising de este modelo fue investigado por primera vez por Sherrington y Kirkpatrick [48] y se conoce como "modelo SK".

También se conocen otros modelos que exhiben el comportamiento general observado en la fase de vidrio de espín. Muchos autores mencionan al modelo de energía aleatoria como "el modelo más simple de un vidrio de espín". En la propuesta original de Derrida [49] se considera un Hamiltoniano similar al SK con p interacciones

$$H = -\sum_{i_1 < \dots < i_p} J_{i_1 \cdots i_p} s_{i_1} \cdots s_{i_p}$$

$$(2.15)$$

que reemplazan a las interacciones usuales entre dos espines, donde $J_{i_1\cdots i_p}$ son acoplamientos aleatorios y se toma el límite $p \to \infty$.

Posteriormente, estudios realizados con el Hamiltoniano (2.15) permitieron mostrar que el sistema tiene dos comportamientos diferentes según sea p = 2 (modelo SK) o p > 2. A estos últimos se los conoce como modelos de *p*-espín [43] y se han difundido ampliamente por la facilidad para el estudio de sus propiedades estáticas y dinámicas. Además, se ha sugerido que existe una conexión entre las teorías dinámicas para las transiciones de los vidrios estructurales y las teorías de campo medio para los modelos de *p*-espín [50].

2.3. Promedios en sistemas desordenados

Los sistemas desordenados, como los vidrios de espín, presentan características especiales que deben incorporarse en el tratamiento teórico. El problema fundamental es que no se conocen todos los parámetros del Hamiltoniano del sistema, sino que se conocen los parámetros sobre un ensamble estadístico de dichos Hamiltonianos. Al igual que en problemas ordinarios de mecánica estadística, esperamos que las fluctuaciones entre muestras vayan a cero en el límite de grandes sistemas. Las magnitudes con esta propiedad se conocen como auto-promediadas y se espera que el cálculo teórico del valor medio de estas magnitudes sobre todo el ensamble coincida con el experimental.

Notamos que en mecánica estadística de sistemas desordenados se practican dos clases diferentes de promedios: (i) el promedio térmico usual sobre cada muestra que denotamos con $\langle \cdots \rangle$, y (ii) el promedio sobre la distribución de parámetros aleatorios que lo expresamos por $[\cdots]$.

Las magnitudes que queremos promediar pueden ser expresadas en términos de derivadas de la energía libre respecto de algún campo auxiliar. A partir de la función de partición $Z(J) = \text{Tr}\left(e^{-\beta H(J)}\right)$ calculamos la energía libre promedio

$$[F] \equiv \int dJ P(J)F(J) = -T \int dJ P(J) \ln Z(J) , \qquad (2.16)$$

donde J denota a la variable aleatoria y P(J) su distribución de probabilidad. En general, esta integral no se puede resolver de manera analítica y se recurre a lo que se conoce como "el truco de las réplicas" [6]

$$\ln Z = \lim_{n \to 0} \frac{Z^n - 1}{n} \,. \tag{2.17}$$

Los n productos de la función de partición equivalen a "replicar" el sistema n veces. La estrategia consiste en encontrar la función de partición Z^n para un n genérico y finalmente efectuar una continuación analítica hasta el punto n = 0.

Por ejemplo, para el modelo de EA con espines de Ising el promedio de

$$Z^{n}(J) = \operatorname{Tr}_{\mathbf{s}^{1},\dots,\mathbf{s}^{n}} \exp\left(-\beta \sum_{a=1}^{n} H(\mathbf{s}^{a},J)\right)$$
(2.18)

sobre la distribución Gaussiana de interacciones es simplemente

$$[Z^n] \equiv \operatorname{Tr}_{\mathbf{s}} \exp(-\beta H_{\text{eff}}) \tag{2.19}$$

$$= \operatorname{Tr}_{\mathbf{s}^{1},\dots,\mathbf{s}^{n}} \exp\left(\frac{\beta^{2}}{4} \sum_{ij}^{N} \Delta_{ij} \sum_{ab}^{n} s_{i}^{a} s_{j}^{b} s_{j}^{a} s_{j}^{b}\right) .$$
(2.20)

El problema con desorden se ha convertido en otro sin desorden que involucra interacciones de a cuatro espines y que mezcla índices de réplicas. El límite de $n \to 0$ se toma luego de introducir un parámetro de orden matricial.

2.4. Parámetros de orden

Los trabajos teóricos sobre vidrios de espín incorporan y extienden los conceptos y técnicas desarrollados para las teorías de transiciones de fase y ruptura de simetría en sistemas sin desorden.

Un estado con ruptura de simetría se caracteriza por un valor no nulo del parámetro de orden. La noción de que el sistema puede encontrarse en estados que rompen la simetría del Hamiltoniano es muy profunda. Significa que la hipótesis ergódica (en equilibrio el sistema debe encontrarse con la probabilidad de Gibbs-Boltzmann $\propto e^{-\beta E}$ en cualquiera de sus posibles configuraciones) es violada.

Por ejemplo, en un ferromagneto interesa la magnetización espontánea, $m = 1/N \sum_i \langle s_i \rangle$, que si es positiva nunca será hallada posteriormente negativa (en el límite termodinámico, $N \to \infty$). Por lo tanto, todos los cálculos se deben restringir a una región del espacio de configuraciones con m positivo. Esta situación se conoce con el nombre de ruptura de ergodicidad.

De manera similar, encontramos en el Hamiltoniano efectivo (2.20) una simetría de inversión en los espines que proviene del Hamiltoniano original. También existe una simetría de permutación en los índices de réplicas como consecuencia de la manera en que se construyó la teoría. En general, si queremos resolver el modelo de manera que describa un estado con ruptura de simetría, necesitaremos establecer un método de cálculo autoconsistente para un parámetro de orden. El parámetro de orden más simple que uno se puede imaginar es el promedio $\langle s_i^a \rangle$. Este parámetro es importante para estudiar la competencia entre ferromagnetismo y orden de vidrio de espín en ferromagnetos con desorden.

El parámetro de orden que emplearemos repetidas veces para caracterizar la fase de vidrio de espín y que describe un estado de ruptura espontánea de simetría es la matriz

$$Q^{ab} = <\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} s_i^a s_i^b > .$$
(2.21)

Usualmente, se propone una parametrización inicial de la matriz Q^{ab} con la que se intenta resolver el conjunto propio de ecuaciones auto-consistentes. La propuesta más simple se conoce como simétrica en las réplicas (en inglés, replica symmetric, abreviado por RS)

$$\mathbf{Q} = q_{\rm d} \mathbf{I} + (q_{\rm EA} - q_{\rm d}) \mathbf{1} \,, \tag{2.22}$$

y requiere solamente del cómputo de dos cantidades, q_d y q_{EA} , donde **I** es la matriz identidad y **1** es una matriz de unos. Con esta elección se asume que los resultados son independientes de los índices de réplicas. Esta propuesta es exacta para el modelo SK de espines esféricos [51] (los espines pueden tomar valores $-\infty < s_i < \infty$ sujetos al vínculo $\sum_i^N s_i = N$), pero para el modelo SK con espines de Ising solamente se puede considerar como una aproximación a la solución real.

Si los índices de réplicas no son todos equivalentes, entonces el Hamiltoniano efectivo (2.19)-(2.20) se puede pensar como un sistema con una anisotropía hipercúbica en el espacio de réplicas para el cual existe una dirección privilegiada. El difícil problema de definir una matriz de $n \times n$ en el límite de $n \to 0$ se elude con una parametrización adecuada para Q^{ab} y tomando la continuación analítica en n. Para esto definimos un conjunto de parámetros $\{q_k, m_k\}$ de los que depende Q^{ab} . La propuesta conocida como ruptura de simetría de réplicas de un paso (en inglés, one step replica symmetry-breaking, abreviado por 1s-RSB) consiste en parametrizar la matriz de $n \times n$ por

$$\begin{pmatrix} q_{d} & q_{EA} & q_{EA} & \\ q_{EA} & q_{d} & q_{EA} & 0 & \cdots \\ q_{EA} & q_{EA} & q_{d} & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \\$$

con m el tamaño del bloque diagonal. Esta solución corrige muchos de los problemas que aún se presentan con la solución RS y es exacta para varios modelos, como el modelo de p-espín esférico con $p \ge 3$ [25]. Para los casos en que la solución 1s-RSB todavía no es exacta, se puede continuar dividiendo la matriz de réplicas en bloques de tamaño $0 < m_k < m_{k-1} < \cdots < m_2 < m_1 < n$ introduciendo los parámetros $q_1, q_2, \cdots, q_{k-1}, q_k$ hasta llegar a lo que se conoce como ruptura total de la simetría de réplicas (en ingles, full replica symmetry breaking, abreviado por FRSB) donde el parámetro de orden es una función q(x) definida en el intervalo 0-1 [9].

Ciertamente, la interpretación del límite de $n \rightarrow 0$ es complejo, sin embargo, los métodos de réplicas son herramientas poderosas que han promovido el avance en el estudio teórico de los vidrios de espín [6]. En los Capítulos 6 y 7 aplicaremos intensamente estos métodos para hallar las propiedades termodinámicas de los modelos allí propuestos.

Capítulo 3 Vidrios de espín cuánticos

3.1. Transiciones de fase cuánticas

Las transiciones de fase en los sistemas clásicos son gobernadas solamente por las fluctuaciones térmicas. Así, los modelos clásicos a T = 0 se congelan en el estado fundamental sin fluctuaciones. En contraposición, los sistemas cuánticos poseen fluctuaciones inducidas por el principio de incertidumbre de Heisenberg que aún para T = 0 pueden producir interesantes transiciones de fase. Estrictamente, una transición de fase cuántica ocurre a T = 0 y las singularidades que se observan en el estado fundamental cuando un parámetro externo Γ toma el valor crítico Γ_c definen el punto crítico. También, la región vecina al punto crítico para T > 0 es de mucho interés ya que ofrece un marco adecuado para el estudio de los efectos simultáneos de las fluctuaciones cuánticas y térmicas.

Los puntos críticos cuánticos han sido identificados en diversos sistemas [52, 53]. También han sido observados en sistemas con desorden, como por ejemplo en la transición a temperatura nula de metal-aislador que es una transición de fase cuántica bien conocida y estudiada [54]. Recientemente, varios experimentos realizados sobre sistemas magnéticos que exhiben una fase de vidrio de espín a temperaturas suficientemente bajas, mostraron que la transición de fase puede ser también controlada ajustando un parámetro externo no térmico (como un campo magnético, el dopaje, la presión) que gobierna las fluctuaciones cuánticas [11, 12, 13, 14, 17]. En este trabajo nos concentraremos en el estudio teórico de las transiciones de fase cuánticas de sistemas de espines con desorden que pueden identificarse con modelos de vidrio de espín.

La física para T = 0 de sistemas de espines desordenados congelados comenzó a ser estudiada a partir de los trabajos de Wu *et al.* [11, 13]. En [13], los autores buscan comparar el comportamiento crítico en la transición cuántica de vidrio de espín con el del límite clásico. La muestra utilizada, LiHo_{0,167}Y_{0.833}F₄, es un vidrio de espín de Ising con



Figura 3.1: (a) Susceptibilidad no lineal en función del campo magnético transverso para cuatro temperaturas. La divergencia de χ'_3 señala la transición de vidrio de espín en el límite clásico (T grande, H_t chico) y un máximo achatado para el límite cuántico (T chico, H_t grande). (b) Parte imaginaria de la susceptibilidad lineal. Gráfico tomado de [13].

acoplamientos dipolares, que a través de la aplicación de un campo magnético perpendicular a la dirección de su eje fácil sufre una transición de fase. En la figura 3.1(a) con círculos, observamos la divergencia de la susceptibilidad no lineal, χ'_3 , en la transición de vidrio de espín tal cual como se espera para el límite clásico. Sin embargo, a medida que se disminuye la temperatura la divergencia es suprimida y efectivamente desaparece para $T \rightarrow 0$. Para T = 25mK, χ'_3 sólo exhibe un máximo achatado. Esto cuestiona si aún ocurre una transición cuántica bien definida de vidrio de espín. En la figura 3.1(b) mostramos mediciones simultaneas de la parte imaginaria de la susceptibilidad lineal, χ''_1 , para el límite de frecuencia nula. Claramente hay un sello de una transición dinámica para toda temperatura. Incrementado H_t , χ''_1 decrece agudamente desde su plateau para bajo H_t a partir de un dado campo crítico indistinguible del que se determina con las mediciones de χ'_3 . En [13] se sugiere que la transición de fase cuántica a T = 0 es de primer orden. Esta hipótesis es consistente con el abrupto comienzo de la disipación lineal y la ausencia de una divergencia de χ'_3 . La transición de primer orden señalada en [13] es interpretada como un cruce de niveles que ocurre cuando grandes campos críticos transversos son aplicados a la muestra de LiHo_{0.167}Y_{0.833}F₄ a temperatura nula.

3.2. Modelos de vidrios de espín cuánticos

Las propiedades físicas de las transiciones de fase cuánticas en sistemas de espines con desorden pueden ser analizadas a través de un modelo simple de Ising cuántico cuyo Hamiltoniano se expresa por

$$\hat{H} = -\sum_{i$$

donde las $\hat{\sigma}_i$ son las matrices de Pauli y los J_{ij} son acoplamientos longitudinales aleatorios. Si $\Gamma = 0$, \hat{H} es diagonal en la base de autoestados de $\hat{\sigma}_i^z$. En cambio, los $\hat{\sigma}_i^x$ tiene elementos fuera de la diagonal en esta base de autoestados, y en consecuencia, cuando $\Gamma \neq 0$, inducen eventos de túnel cuántico que cambian la orientación del espín de un dado sitio.

El Hamiltoniano (3.1) tiene como realización experimental al sistema LiHo_{0,167}Y_{0,833}F₄ estudiado en [13] donde el campo magnético perpendicular al eje fácil induce una separación del doblete del estado fundamental de Ho³⁺. Esta separación es proporcional a H_t^2 y juega un rol análogo al parámetro Γ del Hamiltoniano (3.1).

Una manera conveniente de imaginar la evolución dinámica de un vidrio de espín esta basada en la visión de Palmer [55] de muchos valles: con una fase de vidrio de espín está asociada una energía libre con gran cantidad de mínimos separados por barreras de energía. El límite termodinámico corresponde a barreras infinitas de energía que particionan el espacio de estados del sistema en valles mutuamente inaccesibles. Cada uno de estos valles corresponde a un estado o fase termodinámica diferente. Dentro de cada valle puede haber sub-valles pero con barreras finitas separándolos y el más bajo corresponde a una configuración meta-estable. Es de esperar que el efecto de las fluctuaciones cuánticas aceleren la dinámica (Fig. 3.2). De hecho, originalmente se propuso que el efecto de las fluctuaciones cuánticas podría eliminar por completo la fase de vidrio de espín [56].

Para temperaturas muy bajas, las fluctuaciones cuánticas son relevantes ya que diferentes partes de la superficie de energía libre pueden accederse por efecto túnel. La evolución dinámica del sistema es generada por el conmutador, $i\hbar\partial\hat{\sigma}_i^z/\partial t = [\hat{\sigma}_i^z, \hat{H}]$. Entonces,



Figura 3.2: Representación de la transición entre estados.

un valor finito de Γ introduce canales adicionales a los procesos térmicos puros para la relajación cuántica del sistema, que saltan las barreras de activación que determinan la dinámica clásica, y en consecuencia deprimen la temperatura de congelamiento (Fig. 3.2).

El análisis detallado de los efectos cuánticos usando el método de las réplicas comienza a partir de la publicación del trabajo de Bray y Moore [23] en donde un modelo de espines SU(2) es analizado. Allí se demuestra que los efectos cuánticos "deprimen" la temperatura de la transición pero la fase de vidrio está presente aún a temperatura cero. Desde entonces diversos modelos han sido analizados [53].

En esta tesis empleamos una generalización cuántica del modelo de p-espín,

$$\hat{H} = -\sum_{i_1 < \dots < i_p}^{N} J_{i_1 \dots i_p} \hat{\sigma}_{i_1}^z \cdots \hat{\sigma}_{i_p}^z - \Gamma \sum_{i=1}^{N} \hat{\sigma}_i^x \,. \tag{3.2}$$

Como se mencionó en la sección 2.2 la versión clásica de este modelo de vidrio de espín es ampliamente aceptada y mediante la inclusión del término de túnel se captura gran parte de la fenomenología observada a muy bajas temperaturas, incluyendo a las transiciones termodinámicas de primer orden [25, 57, 26].

3.3. Modelo clásico en (d+1) dimensiones

Una descripción simplificada del comportamiento de un sistema de espines cerca del punto crítico cuántico puede realizarse tomando como ejemplo al Hamiltoniano (3.1). En este caso asumimos que las interacciones entre espines son a primeros vecinos en una red cúbica de *d*-dimensiones. Empleando el formalismo de Trotter-Suzuki [58] se llega a que la acción del problema cuántico en *d*-dimensiones es equivalente a un sistema clásico en (d + 1)-dimensiones. La dimensión adicional es un tiempo imaginario y el Hamiltoniano clásico equivalente que resulta es

$$H^{\rm cl} = -\Delta \tau \sum_{t=0}^{N_{\tau}-1} \sum_{i$$

donde ahora $s_i^t = \pm 1$ son espines de Ising clásicos, representando la componente z de los espines cuánticos en el sitio i en el tiempo imaginario $\tau = t\Delta\tau$, y los índices i, j corren sobre los sitios de la red original en d-dimensiones. La dirección del tiempo imaginario se divide en N_{τ} intervalos de longitud $\Delta\tau$. Notamos que la variable aleatoria J_{ij} repite su valor en cada intervalo temporal. El cálculo desarrollado en [58] asigna

$$\exp(-B) = \tanh(\Delta \tau \Gamma), \qquad (3.4)$$

$$\Delta \tau N_{\tau} = \beta \,, \tag{3.5}$$

donde β es la inversa de la temperatura del problema cuántico original en *d*-dimensiones y tomamos unidades tales que $\hbar = k_B = 1$. Para reproducir correctamente las propiedades del Hamiltoniano cuántico debemos tomar el límite $\Delta \tau \to 0$ que implica $B \to \infty$ y $N_{\tau} \to \infty$.

El sistema clásico en (d+1)-dimensiones descripto por (3.3) se ordena para un pequeño Γ en una fase de vidrio de espín en *d* direcciones espaciales y ferromagnéticamente en la dirección del tiempo imaginario. Al aumentar Γ , el orden se rompe para un valor crítico $\Gamma = \Gamma_c$ que por medio de la equivalencia corresponde al punto crítico cuántico.

3.4. Comportamiento crítico

Cerca de la transición cuántica esperamos fuertes dependencias en $\Gamma - \Gamma_c$ debidas a los fenómenos críticos. Para discutir sobre la transición es conveniente introducir un parámetro, δ , análogo a la temperatura reducida $(T - T_c)/T_c$ para las transiciones de fase a temperatura finita, que mide la distancia hasta la transición. Así definimos

$$\delta \equiv \frac{\Gamma - \Gamma_c}{\Gamma_c} \,. \tag{3.6}$$

La principal suposición de la teoría de escalas es que cerca de la transición hay solamente una longitud característica relevante, denotada por ξ , que diverge como $|\delta|^{-\nu}$ en el punto crítico. Para transiciones clásicas a temperatura finita, los fenómenos críticos de equilibrio pueden ser analizados sin evaluar la dinámica del sistema, así ξ es la única escala importante. Por el contrario, las fluctuaciones para una transición a temperatura nula son puramente de naturaleza cuántica por lo que las magnitudes estáticas y dinámicas están inexorablemente vinculadas. Esto requiere la incorporación de una frecuencia característica Ω en la descripción de escala, donde Ω^{-1} es el tiempo característico. Generalmente, se espera que Ω se anule en la transición como

$$\Omega \propto \xi^{-z} \propto |\delta|^{z\nu}, \qquad (3.7)$$

que define el exponente dinámico, z. Interpretaremos esta escala característica de tiempo en el contexto del modelo clásico equivalente en (d + 1)-dimensiones. Esperamos dos escalas diferentes que diverjan debido a que el sistema es fuertemente anisotrópico: una es la longitud de correlación en la dirección espacial

$$\xi \propto |\delta|^{-\nu} \,, \tag{3.8}$$

donde ν es el exponente de la longitud de correlación definida por encima de Γ_c , como en los casos clásicos, y la otra es la correlación en la dirección del tiempo imaginario

$$\xi_{\tau} \propto \xi^z \propto |\delta|^{-z\nu} \,, \tag{3.9}$$

con z el exponente dinámico. Más aún, la escala del tiempo depende del campo transverso Γ el cual a su vez define la escala para la frecuencia característica de túnel en la ecuación (3.1). Como Ω es la frecuencia característica en el régimen cuántico esperamos que $\Omega \propto \Gamma$ dentro del modelo cuántico en *d*-dimensiones. La equivalencia con el modelo clásico en (d + 1)-dimensiones conduce también a $\Omega \propto (\Delta \tau)^{-1}$. Entonces la escala característica para el tiempo es proporcional a $\Delta \tau$.

Señalamos que hemos asumido una ley de escalas convencional en el punto crítico cuántico, $\xi_{\tau} \propto \xi^z$. Sin embargo, para los sistemas desordenados es posible que el comportamiento para $T \to 0$, $\Gamma \to \Gamma_c$ sea liderado por las singularidades de Griffiths-McCoy y las leyes de escala deban modificarse. Por ejemplo, el problema de una cadena de espines (d = 1) con interacciones mutuas aleatorias y en presencia de un campo transverso aleatorio, ambos con una distribución de probabilidad uniforme, fue estudiado por Fisher [38]. En este caso la ley de escala convencional debe ser reemplazada por una ley de escalas activada

$$\xi_{\tau} \propto \xi^z \longrightarrow \xi_{\tau} \propto \exp\left(\xi^{\bar{z}}\right),$$
(3.10)

donde \bar{z} es otro exponente, que para la cadena desordenada toma el valor particular $\bar{z} = 1/2$. En estos casos, los cálculos se siguen de manera análoga al caso convencional sustituyendo con la relación de escala activada.

3.5. Singularidades de Griffiths-McCoy

Desde finales de la década del 60 se sabe que unos pocos pero grandes grupos de espines acoplados más fuertemente que el promedio pueden generar divergencias aún dentro de la fase desordenada de sistemas magnéticos [59, 60]. La región donde se observan estos eventos se conoce como fase de Griffiths-McCoy. Recientemente, el estudio de la fase de Griffiths-McCoy ha despertado mucho interés en el contexto de modelos de vidrio de espín. Si bien los modelos con interacciones de rango infinito tanto clásicos [43] como cuánticos [61] no presentan este tipo de singularidades, esta fase parece tener importantes consecuencias en los modelos de dimensión finita con susceptibilidades divergentes dentro de la fase paramagnética [38, 41, 62].

Al acercarse al punto crítico cuántico avanzando desde la fase desordenada, un grupo de espines fuertemente acoplados tiende localmente a ordenarse mucho antes que el resto del sistema. Bajo la aplicación de un campo externo los espines de este grupo actúan colectivamente y llevan localmente a un aumento de la susceptibilidad. Para ilustrar esta idea vamos a considerar un ferromagneto de Ising diluido por debajo del umbral de percolación [22], es decir que la concentración $c < p_c$. Un grupo de espines de volumen $V = L^d$ tiene una probabilidad de ocurrir $p = c^V = \exp(-aL^d)$ con $a = \ln 1/c > 0$, que es un número muy pequeño para grandes L. Sin embargo, los espines dentro de este grupo tienen un tiempo de relajación τ que es exponencialmente grande (debido a la energía de activación necesaria para que la frontera de dominio avance sobre todo el grupo de espines invirtiendo su orientación), $\tau \propto \exp(gL^{d-1})$, con g una tensión superficial. La combinación de ambas exponenciales da como resultado que

$$C^{\rm cl}(\tau) = \left[\langle s_i(\tau) s_i(0) \rangle \right] \propto \exp\left(-\operatorname{cte}(\ln \tau)^{d/d-1} \right) \,. \tag{3.11}$$

El problema cuántico a temperatura nula es bastante diferente. Ahora la dinámica activada del escenario clásico es reemplazada por procesos de túnel. En este caso el tiempo de relajación está dado por $\tau \propto \exp\left(g'L^d\right)$. Usando la misma argumentación con la que llegamos a (3.11) esperamos que las auto-correlaciones de espín decaigan algebraicamente dentro de la fase de Griffiths-McCoy para sistemas desordenados cuánticos,

$$C^{\mathbf{q}}(\tau) = \langle 0 | \hat{\sigma}_i^z(\tau) \hat{\sigma}_i^z(0) | 0 \rangle \propto \tau^{-a(\Gamma)/g'(\Gamma)} \,. \tag{3.12}$$

Con este resultado vemos que la susceptibilidad local para frecuencia nula a temperatura T es

$$\chi_i(\omega=0) = \int_0^\beta d\tau \left\langle C^{\mathbf{q}}(\tau) \right\rangle \propto T^{-1+a(\Gamma)/g'(\Gamma)} \,, \tag{3.13}$$

que diverge cuando $T \to 0$ si $a(\Gamma)/g'(\Gamma) < 1$ aún fuera del punto crítico cuántico.

Debemos notar que una susceptibilidad divergente en toda un región vecina al punto crítico ha sido estudiada hace más de 30 años por McCoy y Wu [63, 64] para el modelo de Ising en 2d con desorden en una dirección, el cual es equivalente a la cadena de Ising con interacciones aleatorias en presencia de un campo transverso. Finalmente, vemos claramente que las singularidades informadas por Griffiths [59] y las divergencias calculadas por McCoy [60] tienen un origen común: la existencia de pocas pero fuertemente acoplados regiones que simplemente conducen a efectos más dramáticos en sistemas cuánticos que en los clásicos para temperaturas bajas o nulas.

Capítulo 4 Sistemas disipativos

4.1. Sistemas abiertos

Uno de los objetivos de esta tesis es estudiar los efectos del acoplamiento con el ambiente en modelos de espines cuánticos desordenados. Este problema se inscribe dentro de una clase muy importante de problemas con aplicaciones en muchas áreas de la física, donde se investigan las propiedades de un sistema de interés que intercambia energía con otro que posee un número mayor de grados de libertad. Para la física estadística se trata de sistemas abiertos que intercambian calor con un baño térmico.

Para el estudio teórico de estos procesos se cuenta con diversos métodos que permiten conocer el comportamiento del sistema de interés en contacto con su entorno. A nivel clásico esta situación se describe adecuadamente por la ecuación de Langevin [65]. Sin embargo, para temperaturas suficientemente bajas los efectos cuánticos suelen ser importantes y el tratamiento clásico por medio de la ecuación de Langevin resulta inadecuado.

Los esfuerzos por extender los estudio teóricos a sistemas abiertos cuánticos se pueden agrupar en tres categorías: (i) introducción de cambios en las reglas de cuantificación [66], (ii) uso de una ecuación de Schrödinger estocástica para los vectores de estado [67, 68] o (iii) adopción del enfoque de sistema más ambiente [32]. Las dos primeras presentan dificultades en su fundamentación teórica y en general sólo encuentran aplicación a casos especiales como en sistemas lineales débilmente amortiguados [32]. En lo siguiente sólo discutiremos sobre la tercer categoría y proponemos consultar las referencias [66, 67, 68, 32] para profundizar sobre las dos primeras.

La manera más natural y más eficiente de estudiar a los sistemas cuánticos abiertos es considerar al sistema de interés junto con su entorno como a un sistema aislado para el cual la energía se conserva y se pueden aplicar las reglas usuales de cuantificación. La disipación surge como la transferencia de energía del sistema de interés hacia el ambiente. Este enfoque puede implementarse de diferentes maneras [32]. Aquí, nos concentraremos en el método de la funcional de la influencia de Feynman y Vernon [33]. Este método condensa la influencia del ambiente en una funcional que depende de las características del baño térmico y del acoplamiento con el sistema de interés. Con este proceso se elimina toda dependencia explícita sobre las variables del baño. Los resultados son exactos y permiten describir una gran variedad de sistemas.

En este Capítulo vamos a derivar un conjunto de expresiones que serán de mucha utilidad para el cálculo de las funciones de partición de los modelos de espines desordenados acoplados al ambiente que estudiaremos en los capítulos siguientes. Antes de pasar a desarrollar las técnicas que involucran el tratamiento de sistemas abiertos cuánticos mediante el método de la funcional de la influencia, presentamos el tratamiento clásico por medio de la ecuación de Langevin. Esta solución es de mucho interés ya que esperamos poder reducir el modelo cuántico a la ecuación de Langevin cuando consideremos el límite clásico.

4.2. Ecuación de Langevin clásica

La dinámica de un sistema clásico abierto se puede describir con la ecuación de Langevin [65]. Si por simplicidad consideramos un sistema abierto con un único grado de libertad q(t), la ecuación de Langevin se expresa como

$$M\ddot{q}(t) + M\gamma\dot{q}(t) + V'(q) = \xi(t).$$
(4.1)

El baño térmico se introduce de una manera efectiva a través de la fuerza de rozamiento, $M\gamma \dot{q}(t)$, y la fuerza estocástica $\xi(t)$. Generalmente, esta última se toma con estadística Gaussiana, con valor medio

$$[\xi(t)] = 0, \qquad (4.2)$$

y varianza

$$[\xi(t)\xi(t')] = 2M\gamma k_B T \delta(t-t').$$
(4.3)

Esta elección de la varianza asegura que el sistema se encontrará para tiempos suficientemente largos en equilibrio térmico con el baño a su temperatura T cuando se asume que la fuerza estocástica tiene correlación de ruido blanco. La ecuación diferencial 4.1 en la variable q(t) es análoga a la ecuación para la carga de un circuito eléctrico con un término disipativo resistivo. Debido a esta analogía se dice que la disipación de energía es Óhmica.

La fuerza de fricción puede ser retardada y la ecuación de Langevin generalizada que resulta es

$$M\ddot{q}(t) + M \int_{t_0}^t dt' \,\gamma(t - t')\dot{q}(t') + V'(q) = \xi(t) \,, \tag{4.4}$$

donde $\gamma(t)$ expresa el coeficiente de rozamiento retardado.

La ecuación (4.1) describe, por ejemplo, a una partícula Browniana "pesada" de masa M inmersa en un fluido de partículas livianas en presencia de una fuerza externa -V'(q). En este caso, surgen naturalmente dos escalas de tiempo bien diferenciadas que permiten separar a la partícula Browniana del resto del fluido y enfocarnos en ella.

4.3. Modelo de sistemas más ambiente

En esta sección nos interesa obtener un Hamiltoniano cuántico con el que podamos describir adecuadamente el comportamiento de nuestro sistema de interés en contacto con un baño térmico.

Los modelos de sistema más ambiente que consideraremos en esta tesis corresponderán a distintos grados de generalización del modelo de espín-bosón [31]. Asumiremos, con argumentos similares a los utilizados por Caldeira y Leggett en [69], que cualquier grado de libertad del ambiente es débilmente perturbado por la interacción con el sistema de interés. Esta suposición lleva a cálculos más sencillos por dos motivos: en primer lugar, permite asumir que el acoplamiento entre el sistema y el ambiente es lineal en las coordenadas del ambiente, en segundo lugar, como el baño es sólo débilmente perturbado, su descripción a segundo orden por osciladores armónicos resulta adecuada.

El Hamiltoniano para el sistema total se expresa como

$$H = H_S + H_B + H_I, \qquad (4.5)$$

donde

$$H_S = \frac{\Pi^2}{2M} + V(q) \tag{4.6}$$

es el Hamiltoniano del sistema de interés, que a manera de ejemplo, presentamos con un único grado de libertad q,

$$H_B = \sum_{l=1}^{\tilde{N}} \frac{p_l^2}{2m_l} + \frac{1}{2} m_l \omega_l^2 x_l^2$$
(4.7)

describe al baño térmico de \tilde{N} osciladores armónicos, y

$$H_{I} = -\sum_{l=1}^{\tilde{N}} F_{l}(q) x_{l} + \Delta V(q)$$
(4.8)

es el término de interacción. El segundo término en (4.8) es un contra-término y se introduce para compensar una renormalización del potencial V(q) causado por el acoplamiento lineal con x_l . En ausencia de $\Delta V(q)$, el mínimo de la superficie de potencial del sistema total para un dado q ocurre en $x_l = F_l(q)/m_l\omega_l^2$ para todo l. El potencial "efectivo" renormalizado por el acoplamiento es

$$V_{\text{eff}}(q) = V(q) - \sum_{l=1}^{\tilde{N}} \frac{F_l^2(q)}{2m_l \omega_l^2} \,.$$
(4.9)

En el caso especial en que $F_l(q) = c_l q$, el segundo término de la ecuación (4.9) causa un corrimiento negativo $(\Delta \omega)^2 = -\sum_l c_l^2 / M m_l \omega_l^2$ en la frecuencia de pequeñas oscilaciones ω_0^2 alrededor del mínimo. Este efecto de renormalización de la frecuencia puede ser muy grande, inclusive si $\omega_{\text{eff}}^2 = \omega_0^2 + (\Delta \omega)^2 < 0$ puede cambiar la forma cualitativa del potencial. Por lo tanto, si lo que se busca es que el acoplamiento con el ambiente sólo introduzca disipación se debe agregar en el segundo término de (4.8)

$$\Delta V(q) = \sum_{l=1}^{\tilde{N}} \frac{F_l^2(q)}{2m_l \omega_l^2} \,. \tag{4.10}$$

4.3.1. Equivalencia con la ecuación de Langevin

Las propiedades de los distintos tipos de baños térmicos se pueden expresar a través de la función densidad espectral

$$J(\omega) \equiv \frac{\pi}{2} \sum_{l=1}^{\tilde{N}} \frac{c_l^2}{m_l \omega_l} \delta(\omega - \omega_l) , \qquad (4.11)$$

donde se asume que la disipación es lineal, F(q) = q. En general, $J(\omega)$ se toma de manera que las expresiones (4.5)–(4.8) conduzcan en el límite clásico a la ecuación (4.4). En [32] se demuestra que esto es posible tomando

$$J(\omega) = M\omega \int_0^\infty dt \,\gamma(t) \cos(\omega t) \,. \tag{4.12}$$

Esta relación enseña que las características microscópicas del acoplamiento sistema-ambiente pueden ser expresadas en términos del factor de amortiguamiento fenomenológico $\gamma(t)$.

La ecuación (4.12) muestra que para un sistema Óhmico ($\gamma(t) = \gamma_0 \delta(t)$) la densidad espectral es de la forma

$$J(\omega) = M\gamma_0\omega = 2\pi\alpha\hbar\omega, \quad \alpha \equiv \frac{M\gamma_0}{2\pi\hbar}.$$
(4.13)

Para distintas aplicaciones se ha extendido el resultado anterior asumiendo una ley de potencias en ω y una frecuencia de corte de alta frecuencia exponencial, ω_c ,

$$J(\omega) = 2\pi \alpha \hbar \omega \left(\frac{\omega}{\omega_{\rm ph}}\right)^{s-1} e^{-\omega/\omega_c}, \qquad (4.14)$$

donde se introduce $\omega_{\rm ph}$ para que la constante α se
a adimensional. En analogía con el modelo Óhmico, cuando
 s<1 se dice que es un modelo sub-Óhmico, y par
as>1 es super-Óhmico.

4.4. Integral de camino en tiempo imaginario

El Hamiltoniano total del sistema, H, descripto por las ecuaciones (4.5)–(4.8) se cuantifica con las reglas usuales de cuantificación. La mecánica estadística nos enseña que en el equilibrio el comportamiento del sistema total se puede conocer a partir de la función de partición,

$$Z \equiv \operatorname{Tr}\left(e^{-\beta \hat{H}}\right), \quad 1/\beta = k_B T.$$
 (4.15)

Cuando la traza se toma sobre una base de posiciones, $|q, \mathbf{x} = (x_1, \cdots, x_{\tilde{N}})\rangle$,

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dq \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x} \langle q, \mathbf{x} | e^{-\beta \hat{H}} | q, \mathbf{x} \rangle , \qquad (4.16)$$

el integrando se puede identificar con un elemento de matriz diagonal del operador evolución

$$U(q_f, \mathbf{x}_f, \tau_f, q_i, \mathbf{x}_i, \tau_i) = \langle q_f, \mathbf{x}_f | e^{-(\tau_f - \tau_i)\hat{H}/\hbar} | q_i, \mathbf{x}_i \rangle$$
(4.17)

si el tiempo se define como $t = -i\tau \text{ y } \beta \hbar = \tau_f - \tau_i$. La representación del operador evolución por medio de la integral de camino de Feynman es un resultado bien establecido [70]. Desarrollando una continuación analítica al tiempo imaginario, conocida como rotación de Wick, se llega a la siguiente expresión para la función de partición [71]

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dq \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x} \int_{q(0)=q}^{q(\beta\hbar)=q} \mathcal{D}q \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}}^{\mathbf{x}(\beta\hbar)=\mathbf{x}} \mathcal{D}\mathbf{x} \, e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \, \mathcal{L}^{\mathrm{E}}[q(\tau),\dot{q}(\tau),\mathbf{x}(\tau),\dot{\mathbf{x}}(\tau)]} \,. \tag{4.18}$$

El Lagrangiano Euclideo total, \mathcal{L}^{E} , reúne las contribuciones del sistema, del baño y del término de interacción

$$\mathcal{L}^{\mathrm{E}} = \mathcal{L}_{S}^{\mathrm{E}} + \mathcal{L}_{B}^{\mathrm{E}} + \mathcal{L}_{I}^{\mathrm{E}} \,. \tag{4.19}$$

Debido a la rotación de Wick, \mathcal{L}^{E} lleva el signo invertido en el término de energía potencial respecto del Lagrangiano ordinario. Las derivadas punto corresponden ahora a derivar respecto de τ .

La formulación por integral de camino consiste en una suma sobre todas las trayectorias $q(\tau)$, $\mathbf{x}(\tau)$ de período $\beta\hbar$, eliminando el cálculo con operadores. En general, la integral sólo se puede evaluar exactamente con Hamiltonianos cuadráticos. Sin embargo, la integral de camino ha encontrado aplicación en numerosos problemas de la física, desde las teorías de campos y partículas hasta la física atómica. En particular, es especialmente útil para el estudio de los sistemas abiertos la propiedad de condensar en una funcional los efectos del baño térmico.

4.4.1. Funcional de la influencia

La función de partición (4.18) se factoriza convenientemente como

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dq \int_{q(0)=q}^{q(\beta\hbar)=q} \mathcal{D}q \, e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \, \mathcal{L}_{S}^{\mathrm{E}}} F[q(\tau)] \,, \qquad (4.20)$$

$$F[q(\tau)] = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x} \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}}^{\mathbf{x}(\beta\hbar)=\mathbf{x}} \mathcal{D}\mathbf{x} \, e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \, (\mathcal{L}_{B}^{\mathrm{E}} + \mathcal{L}_{I}^{\mathrm{E}})}$$
(4.21)

donde $F[q(\tau)]$ es la funcional de la influencia. Esta factorización es sumamente útil para poder integrar completamente la dependencia en \mathbf{x} con los métodos para un oscilador armónico. Luego de reescribir a los vectores en términos de sus componentes, la funcional se expresa por

$$F[q(\tau)] = \prod_{l=1}^{\tilde{N}} \int_{-\infty}^{\infty} dx_l \int_{x_l(0)=x_l}^{x_l(\beta\hbar)=x_l} \mathcal{D}x_l(\tau)$$
$$\exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{\tilde{N}} \left(m_l \dot{x}_l^2 + m_l \omega_l^2 \left(x_l - \frac{c_l}{m_l \omega_l^2} q\right)^2\right)\right), \quad (4.22)$$

Para las variables x_l la situación corresponde a un oscilador armónico forzado con una fuerza $c_l q(\tau)$. Se nota que las integrales son Gaussianas ya que en el argumento de la exponencial las variables aparecen con potencias hasta de segundo orden. En este caso se prueba que

$$F[q(\tau)] = F'[q(\tau)] \exp\left(-\beta\Delta V(q)\right),$$

$$F'[q(\tau)] = \prod_{l=1}^{\tilde{N}} \int_{-\infty}^{\infty} dx_l \, N(\beta\hbar) \exp\left(\frac{-1}{\hbar} S_{BI}^{\mathrm{E(cl)}}[q(\tau)]\Big|_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\beta\hbar)}\right).$$
(4.23)

Por simplicidad $F'[q(\tau)]$ no incluye la acción del contra-término, que se simplifica trivialmente al final del cálculo. $N(\beta\hbar)$ es una función de normalización que sólo depende de $\beta\hbar$ [70]. Notamos que cuando el sistema de interés no interactúa con el entorno ($c_l = 0$) se debe cumplir que $F'[q(\tau)] = 1$. Este resultado lleva a identificar a $N(\hbar\beta)$ con la inversa de la función de partición para los \tilde{N} osciladores armónicos cuánticos. La acción Euclidea clásica, $S_{BI}^{E(cl)}$, simplemente involucra el cálculo de la integral

$$S_{BI}^{\rm E(cl)} = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left(\mathcal{L}_B^{\rm E} + \mathcal{L}_I^{\rm E} \right)$$
(4.24)

sobre la trayectoria clásica de $\mathbf{x}(\tau)$, es decir que se calcula sobre aquel camino que satisface

$$\frac{d}{d\tau} \frac{\partial \mathcal{L}_{BI}^{\rm E}}{\partial \mathbf{x}} - \frac{\partial \mathcal{L}_{BI}^{\rm E}}{\partial \mathbf{x}} = 0, \qquad (4.25)$$
donde $\mathcal{L}_{BI}^{E} = \mathcal{L}_{B}^{E} + \mathcal{L}_{I}^{E}$. Por ser la trayectoria periódica, la especialización que se practica en la ecuación (4.23), $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}(\beta\hbar)$, fija los extremos del camino en un mismo punto. La ecuación clásica de movimiento que se deriva de (4.25) es

$$m_l \ddot{x} - m_l \omega_l^2 x_l = -c_l q(\tau) , \qquad (4.26)$$

y su solución se expresa por

$$x_{l}(\tau) = a_{l_{1}}e^{\omega_{l}\tau} + a_{l_{2}}e^{-\omega_{l}\tau} + x_{l_{p}}(\tau), \qquad (4.27)$$

donde a_{l_1} , a_{l_2} se toman de manera de satisfacer $x_l(0) = x_l(\beta\hbar)$ y $x_{l_p}(\tau)$ es una solución de la ecuación inhomogenea. Luego de operar se tiene

$$S_{BI}^{\mathrm{E(cl)}}\Big|_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\beta\hbar)} = \sum_{l=1}^{\tilde{N}} \frac{m_{l}}{2} x_{l} \dot{x}_{l} \Big|_{0}^{\beta\hbar} - \int_{0}^{\beta\hbar} \frac{x_{l}}{2} c_{l} q(\tau) d\tau = \\ = \sum_{l=1}^{\tilde{N}} \frac{m_{l} \omega_{l}}{2 \sinh(\omega_{l} \beta\hbar)} \left(2x_{l}^{2} (\cosh(\omega_{l} \beta\hbar) - 1) + (A_{l}^{2} + B_{l}^{2} - 2x_{l} (A_{l} + B_{l})) (\exp(\omega_{l} \beta\hbar) - 1) \right) \\ + \frac{m_{l} \omega_{l}}{2 \sinh(\omega_{l} \beta\hbar)} (A_{l} - B_{l})^{2} - \frac{c_{l}^{2}}{4m_{l} \omega_{l}} \int_{0}^{\beta\hbar} \int_{0}^{\beta\hbar} e^{-\omega_{l} |\tau - \tau'|} q(\tau) q(\tau') d\tau d\tau' ,$$

$$(4.28)$$

donde

$$A_l = \frac{c_l}{2m_l\omega_l} \int_0^{\beta\hbar} e^{-\omega_l\tau} q(\tau) \, d\tau \,, \tag{4.29}$$

$$B_l = \frac{c_l}{2m_l\omega_l} \int_0^{\beta\hbar} e^{-\omega_l(\beta\hbar - \tau)} q(\tau) \, d\tau \,. \tag{4.30}$$

Finalmente, se toma la traza sobre las variables del oscilador armónico, x_l , para obtener la funcional $F'[q(\tau)]$ (ec. 4.23). Luego de realizar las integrales Gaussianas llegamos a

$$F'[q(\tau)] = \exp\left(\sum_{l=1}^{\tilde{N}} \frac{c_l^2}{4m_l \omega_l \hbar} \int_0^{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \frac{\cosh(\omega_l(|\tau - \tau'| - \beta\hbar/2))}{\sinh(\omega_l \beta\hbar/2)} q(\tau)q(\tau')d\tau d\tau'\right). \quad (4.31)$$

La ecuación (4.31) se puede reducir observando que el baño introduce interacciones de largo alcance en el tiempo imaginario

$$F'[q(\tau)] = \exp\left(\int_0^{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} k(\tau - \tau')q(\tau)q(\tau')d\tau d\tau'\right), \qquad (4.32)$$

con

$$k(\tau) = \sum_{l=1}^{\tilde{N}} \frac{c_l^2}{4m_l \omega_l \hbar} \frac{\cosh(\omega_l(|\tau| - \beta \hbar/2))}{\sinh(\omega_l \beta \hbar/2)}.$$
(4.33)

Ciertamente las variables del baño térmico han sido eliminadas, pero sus propiedades se manifiestan de manera efectiva a través del núcleo $k(\tau)$ que gobierna las interacciones a distintos tiempos. La funcional de la influencia puede simplificarse usando la identidad

$$q(\tau)q(\tau') = \frac{1}{2} \left(q^2(\tau) + q^2(\tau') \right) - \frac{1}{2} \left(q(\tau) - q(\tau') \right)^2 \,. \tag{4.34}$$

Sustituimos esta identidad en la ecuación (4.32) e integramos en τ o en τ' los términos con $q^2(\tau)$ y $q^2(\tau')$. Los resultados de ambas integrales son equivalentes y su suma cancela exactamente a la acción del contra-término. La expresión para la influencia del baño que resulta es

$$F[q(\tau)] = \exp\left(\frac{1}{2} \int_0^{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} k(\tau - \tau') \left(q(\tau) - q(\tau')\right)^2 d\tau d\tau'\right).$$

$$(4.35)$$

Esta expresión muestra que solamente interesan la diferencia de tiempos imaginarios.

4.4.2. Funcional de la influencia para un baño Óhmico

Para incorporar en la funcional ecs. (4.32) y (4.33) las características del baño térmico mediante la información de la densidad espectral es conveniente operar en el espacio de frecuencias. La función $q(\tau)$ admite un desarrollo en serie de Fourier

$$q(\tau) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} q(\omega_k) \exp(i\omega_k \tau)$$
(4.36)

en el intervalo $[0, \beta\hbar]$ (o su extensión periódica), donde $\omega_k = 2\pi k/\beta\hbar$ son las frecuencias de Matsubara, y $q(\omega_k) = q^*(-\omega_k)$. El núcleo de la funcional (4.33) también admite un desarrollo en serie de Fourier

$$k(\tau) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} k(\omega_k) \exp(i\omega_k \tau), \qquad (4.37)$$

 con

$$k(\omega_k) = \sum_{l=1}^{\tilde{N}} \frac{c_l^2}{2m_l \beta \hbar^2} \frac{1}{\omega_l^2 + \omega_k^2}.$$
(4.38)

El contra-término en el espacio de frecuencias es

$$-\beta \sum_{l=1}^{N} \frac{c_l^2}{2m_l \omega_l^2} \sum_{k=-\infty}^{\infty} |\tilde{q}(\omega_k)|^2.$$
(4.39)

Luego de sumar la funcional (4.32) en el espacio de frecuencias y la acción del contratérmino (ec. (4.39)), llegamos a la siguiente expresión

$$F[q(\omega_k)] = \exp\left(-\beta \sum_{k=-\infty}^{\infty} K(\omega_k) |q(\omega_k)|^2\right), \qquad (4.40)$$

donde $K(\omega_k)$ se puede escribir en términos de la densidad espectral

$$K(\omega_k) = \sum_{l=1}^{\tilde{N}} \frac{c_l^2}{2m_l \omega_l^2} \frac{\omega_k^2}{\omega_l^2 + \omega_k^2} = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \frac{\omega_k^2}{\omega(\omega^2 + \omega_k^2)}.$$
 (4.41)

La integral en el lado derecho de la ec. (4.41) converge sin la necesidad de introducir una frecuencia de corte infrarroja si el exponente de la densidad espectral (4.14) es 0 < s < 2. Esta elección conduce a la siguiente expresión

$$K(\omega_k) = \frac{\pi \alpha \hbar}{\omega_{\rm ph}^{s-1} \sin(\pi s/2)} |\omega_k|^s \,. \tag{4.42}$$

En el caso particular de un baño Óhmico encontramos [72]

$$K(\omega_k) = \pi \alpha \hbar |\omega_k| \,. \tag{4.43}$$

Retornando a la representación temporal, la funcional de la influencia para un baño Óhmico es

$$F[q(\tau)] = \exp\left(\frac{\alpha}{4} \left(\frac{\pi}{\beta\hbar}\right)^2 \int_0^{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \frac{q(\tau)q(\tau')}{\sin^2\left(\frac{\pi}{\beta\hbar} |\tau - \tau'|\right)}\right), \qquad (4.44)$$

donde reemplazamos los coeficientes de acoplamiento entre el sistema de interés y los osciladores armónicos $c_l \leftarrow c_l/2$ para comparar nuestros resultados con los de la referencia [31].

Capítulo 5

Efectos de la disipación en cadenas de espines cuánticos

5.1. Introducción

La influencia del desorden congelado [38, 39, 40] por un lado, y los efectos del acoplamiento con el ambiente [73, 74] por el otro, sólo han sido investigados separadamente en modelos de espines cuánticos en dimensión finita. El desorden lleva a la existencia de fases con orden de vidrio para bajas temperaturas e introduce singularidades de Griffiths-McCoy que son particularmente importantes para los sistemas cuánticos [38, 53, 39, 40]. La disipación implica decoherencia, y el acoplamiento con un baño cuántico genera fenómenos no triviales de localización, por lo menos en sistemas de dos niveles [31]. En este Capítulo estudiaremos el efecto combinado del desorden congelado y el acoplamiento con el ambiente en cadenas de espines cuánticos [30].

5.2. Modelo de espín-bosón

En el Capítulo 4 desarrollamos el formalismo del funcional de la influencia de Feynman y Vernon aplicado a un sistema de un grado de libertad que interactúa con su entorno. El sistema de interés no fue especificado, exceptuando el tipo de interacción con el baño térmico que se toma lineal en su coordenada.

A través de distintas propuestas para el Hamiltoniano del sistema de interés se han estudiado importantes fenómenos en el área de materia condensada: el movimiento de una partícula cargada en una red metálica o semiconductora que se deforma a su paso (polarón acústico), el movimiento de un electrón en un cristal iónico (polarón óptico), la dinámica de una juntura Josephson, efectos de carga en junturas túnel, y otros [32]. En ciertas oportunidades, el sistema de interés posee un grado de libertad que puede tomar sólo dos valores. Muchos sistemas físicos y químicos pueden ser descriptos por una coordenada generalizada que se asocia con un potencial efectivo con dos mínimos de similar energía. Cuando la energía térmica es pequeña comparada con la separación de los niveles más bajos, sólo son relevantes los estados fundamentales de los dos pozos de potencial. Esencialmente el sistema queda descripto por una base de Hilbert de dimensión dos y se conoce como sistema de dos niveles (en inglés, two-level systems, abreviado por TLS). Como el sistema de dos niveles es asimilable a un espín, y usualmente se puede representar la interacción con el ambiente por un baño de bosones, este modelo se popularizó como "modelo de espín-bosón". Si bien se trata del modelo de sistema más ambiente cuántico más sencillo, exhibe un comportamiento no trivial que impulsó numerosos estudios teóricos y experimentales. Por ejemplo se puede citar el movimiento de defectos en sólidos cristalinos, el efecto túnel de partículas livianas (como hidrógeno) en metales y otros [75].

El grado de libertad no necesariamente debe ser de naturaleza geométrica. Un anillo superconductor interrumpido por una juntura Josephson (abreviado en inglés por rf-SQUID) es un dispositivo diseñado para estudiar los efectos de la interferencia cuántica entre estados macroscópicos distintos donde el flujo concatenado es el grado de libertad relevante [76].

El Hamiltoniano que describe completamente al sistema de dos niveles es

$$\hat{H}_S = \frac{\epsilon}{2}\hat{\sigma}^z - \frac{\hbar\Delta}{2}\hat{\sigma}^x\,,\tag{5.1}$$

donde $\hat{\sigma}^a$ con a = x, y, z son las matrices de Pauli y la base se elige formada por autoestados de $\hat{\sigma}^z$ con autovalores ±1.

El segundo término de la ecuación (5.1) representa las transiciones entre ambos estados por efecto túnel gobernadas por el parámetro $\hbar\Delta$. La diferencia entre las energías de ambos estados es ϵ en ausencia de efecto túnel. El Hamiltoniano (5.1) es también equivalente a una partícula de espín 1/2 en presencia de un campo magnético $\mathbf{H} = -\epsilon \check{\mathbf{z}} + \hbar\Delta\check{\mathbf{x}}$.

El sistema de dos niveles es el sistema más simple que muestra interferencia cuántica destructiva y constructiva; por ejemplo se pueden encontrar oscilaciones entre ambos estados u oscilaciones en la ocupación de los pozos de potencial. Inmediatamente surge la pregunta de cómo el acoplamiento con un baño térmico altera la coherencia cuántica. Antes de extendernos en la respuesta es conveniente que tengamos presente la expresión del Hamiltoniano total del modelo de espín-bosón,

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_B + \hat{H}_I \tag{5.2}$$

$$= \frac{\epsilon}{2}\hat{\sigma}^z - \frac{\hbar\Delta}{2}\hat{\sigma}^x + \frac{1}{2}\left(\sum_{l=1}^{\tilde{N}}\frac{\hat{p}_l^2}{m_l} + m_l\omega_l^2\left(\hat{x}_l - \frac{c_l}{m_l\omega_l^2}\hat{\sigma}^z\right)^2\right).$$
(5.3)

El comportamiento del sistema está completamente caracterizado por los parámetros ϵ , Δ y la densidad espectral $J(\omega)$ definida en (4.14). Leggett *et al.* exponen en [31] los tipos de comportamientos que se hallan asociados a las distintas elecciones del conjunto de parámetros. Sus resultados se pueden agrupar en los siguientes casos:

Sub-Ohmico (s < 1)

T = 0 El sistema permanece localizado en el estado que fue preparado.

 $T \neq 0$ Relajación exponencial incoherente con tasa exp $\left(-\left(T_0/T\right)^{1-s}\right)$.

Óhmico (s = 1) Depende críticamente de la intensidad del acoplamiento α y la temperatura T. Las observaciones corresponden a:

 $0 < \alpha < 1/2$ y $\alpha T \leq \Delta_r$ Oscilaciones coherentes amortiguadas¹.

 $\alpha=1/2,\;\forall T\;$ Decaimiento exponencial con tas
a $\pi\Delta^2/2\omega_c.$

 $1/2 < \alpha < 1$ y $T \leq \Delta_r$ Relajación incoherente.

 $\alpha < 1$ y $\alpha T \leq \Delta_r$, o $1 < \alpha T \neq 0$ Relajación exponencial con tasa $T^{2\alpha-1}$.

 $1 < \alpha \ T = 0$ Localización.

Super-Óhmico (1 < s < 2) Cruce entre oscilaciones coherentes y relajación sobre-amortiguada.

Super-Óhmico (2 < s) Relajación coherente oscilante subamortiguada.

Esta clasificación es válida para $\epsilon = 0$ [31], donde las propiedades críticas fueron deducidas aplicando técnicas de grupo de renormalización (abreviado en inglés por RG) y bajo la aproximación conocida popularmente como non-interacting blip aproximation.

Las conclusiones derivadas para un único espín (sistema de dos niveles) interactuando con el baño térmico pueden ser aplicadas a un sistema macroscópico en el régimen diluido, es decir cuando las interacciones entre los espines (TLS) son poco importantes en comparación con las interacciones con el entorno. Sin embargo, hay sistemas físicos que pueden ser pensados como un conjunto denso de espines, para los cuales su interacción mutua ya no puede ser despreciada. Nuestro interés se centra en elaborar un análisis similar sobre modelos que incorporan estas interacciones, incluyendo también a los sistemas desordenados.

 $^{{}^{1}\}Delta_{r} = \Delta(\Delta/\omega_{c})^{\alpha/(1-\alpha)}$

5.3. Cadenas de espines acopladas al ambiente

Una de las generalizaciones naturales del modelo de espín-bosón consiste en tomar un conjunto de espines o sistemas de dos niveles que interactúan entre sí y con el baño térmico. La propuesta más simple consiste en una cadena de espines con interacciones constantes a primeros vecinos con un término de túnel correspondiente a un campo magnético transverso. Este modelo ha despertado gran interés ya que equivale al modelo Kondo con más de una impureza [73, 77]. Experimentalmente, los puntos cuánticos (en inglés quantum dots, abreviado por QD) proporcionan un laboratorio ideal para confirmar los estudios teóricos realizados sobre sistemas de dos o más impurezas. Muchos experimentos son efectuados sobre QD multi-nivel o con conjuntos de QD acoplados que pueden ser vinculados directamente con los modelos de Kondo o Anderson para dos impurezas [78].

Recientemente, los sistemas de dos niveles interactuantes han ganado mucho interés en computación cuántica. El estudio de la decoherencia de los quits debida al indeseado acoplamiento entre ellos [79] y con el ambiente [80], y la manera de evitarla, es abordada por medio de estos modelos [81].

Ciertamente, cuando se piensa en una cadena de espines interactuantes se espera que se presente alguna clase de orden magnético para temperatura nula. Sin embargo, los sistemas mecánicos cuánticos pueden exhibir una transición de fase variando un parámetro de control no térmico causando que el orden sea destruido sólo por fluctuaciones cuánticas. Más aún, en sistemas desordenados se presenta un comportamiento inusual conocido como fase de Griffiths-McCoy [59, 60] donde ciertas magnitudes divergen antes de llegar al punto crítico. El comportamiento crítico a temperatura nula de sistemas de espines aislados, finitos e infinitos, en una, dos y tres dimensiones ha sido estudiado en detalle en una serie de artículos empleando métodos analíticos [38, 39, 40, 82] y numéricos [41, 62, 34, 35, 36, 37]. Los estudios que presentamos a continuación están orientados por las siguientes preguntas: (i) ¿Cómo se modifica la transición de localización de Caldeira-Leggett cuando varios espines interactúan ferromagénticamente acoplados al ambiente?, (ii) ¿Cómo depende la transición de fase cuántica de una cadena de espines con el campo transverso y el acoplamiento con el baño térmico, extrapolando su comportamiento al límite termodinámico?, (iii) Proponiendo interacciones aleatorias entre los espines, ¿se encuentran singularidades de Griffiths-McCoy en sistemas con desorden congelado en contacto con el ambiente?. Para investigar el comportamiento de la cadena de espines acoplada al ambiente emplearemos algunas expresiones halladas en el capítulo 4. De esta manera probaremos que nuestro modelo es equivalente a un modelo de Ising con interacciones de largo alcance que resulta adecuado para ser simulado con métodos de Monte Carlo.

5.3.1. Modelo

El Hamiltoniano para una cadena de N espines es

$$\hat{H}_S(J) = -\sum_{i=1}^N J_i \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z - \sum_{i=1}^N \Gamma \hat{\sigma}_i^x - \sum_{i=1}^N h \hat{\sigma}_i^z .$$
(5.4)

Al igual que en el modelo de espín-bosón, los espines se representan por las matrices de Pauli $\hat{\sigma}_i^a$ con a = x, y, z. Se asume que J_i , la fuerza de la interacción de intercambio entre primeros vecinos, son o bien variables aleatorias independientes con densidad de probabilidad uniforme en el intervalo $0 < J_i < 1$ (para el estudio de sistemas desordenados), o bien constantes con $J_i = 1$ (en el caso de sistemas ferromagnéticos). Sin pérdida de generalidad, elegimos J_i positiva ya que para redes unidimensionales el signo puede ser cambiado mediante una transformación de calibre (gauge) [62]. El segundo término de la ecuación (5.4) representa el acoplamiento con un campo transverso local. El último término corresponde a un campo longitudinal que se puede incluir para calcular susceptibilidades locales².

La cadena de espines en contacto con el ambiente se modela por

$$\hat{H}(J) = \hat{H}_S(J) + \hat{H}_B + \hat{H}_I,$$
(5.5)

donde $\hat{H}_S(J)$ es el Hamiltoniano (5.4) de la cadena de espines interactuantes, \hat{H}_B es el Hamiltoniano del baño (ec. 4.7)

$$H_B = \sum_{l=1}^{\tilde{N}} \frac{\hat{p}_l^2}{2m_l} + \frac{1}{2} m_l \omega_l^2 \hat{x}_l^2 , \qquad (5.6)$$

y \hat{H}_I es el término de interacción entre la cadena y el baño térmico (que corresponde a sustituir q por $\hat{\sigma}_i^z$ en la ec. (4.8) y tomar el acoplamiento bilineal en las coordenadas)

$$\hat{H}_{I} = -\sum_{l=1}^{\tilde{N}} \sum_{i=1}^{N} c_{il} \, \hat{x}_{l} \hat{\sigma}_{i}^{z} + \sum_{l=1}^{\tilde{N}} \frac{1}{2m_{l}\omega_{l}^{2}} \left(\sum_{i=1}^{N} c_{il} \, \hat{\sigma}_{i}^{z}\right)^{2} \,.$$
(5.7)

Asumimos que cada espín del sistema está acoplado a un conjunto propio de \tilde{N}/N osciladores armónicos independientes en equilibrio térmico, siendo \tilde{N} su número total. De esta manera, la matriz de acoplamientos c_{il} es diagonal por bloques con N bloques de dimensión \tilde{N}/N .

²Vemos que el Hamiltoniano (5.4) para la cadena de espines se reduce al del modelo de espín-bosón tomando $\Gamma = \hbar \Delta/2$, $h = -\epsilon/2$ y N = 1.

Nuestra atención está centrada en el cálculo de la función de partición a partir de la cual derivamos las propiedades para el equilibrio de pequeñas cadenas y eventualmente para la cadena infinita de espines,

$$Z(J) = \operatorname{Tr}\left(e^{-\beta \hat{H}(J)}\right).$$
(5.8)

Notamos que el resultado depende de cada realización de desorden, y que las magnitudes halladas deberán promediarse posteriormente sobre sobre la densidad de probabilidad para las interacciones.

Desafortunadamente, no podemos tomar la traza sobre las variables de espín directamente ya que el término que representa el acoplamiento con un campo magnético transverso no conmuta con los otros términos de la ecuación (5.4), ni con el término de interacción con el baño térmico (ec. (5.7)). Reescribimos la función de partición (4.16) para la cadena de espines,

$$Z(J) = \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x} \left\langle s_1, \cdots, s_N, \mathbf{x} \left| e^{-\beta(\hat{H}_S^z(J) + \hat{H}_S^x + \hat{H}_B + \hat{H}_I)} \right| s_1, \cdots, s_N, \mathbf{x} \right\rangle, \quad (5.9)$$

y mostramos explícitamente la factorización del Hamiltoniano del sistema en $\hat{H}_S = \hat{H}_s^z(J) + \hat{H}_S^x$. El último sumando, \hat{H}_S^x , representa al término de interacción con el campo transverso que no conmuta con el término de interacción entre espines, $\hat{H}_S^z(J)$. Los autovalores $s_i = \pm 1$ del operador $\hat{\sigma}_i^z$ los usamos para identificar a los correspondientes autoestados $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$.

Los problemas que surgen de la no conmutatividad se superan aplicando la fórmula de Trotter-Suzuki [58]. Para esto, particionamos el intervalo $[0, \beta\hbar]$ en N_{τ} subintervalos de longitud $\Delta \tau = \beta\hbar/N_{\tau}$ insertando N_{τ} identidades. Los extremos de los subintervalos se encuentran en $\tau_t = t\Delta\tau$ con $t = 0, \dots, N_{\tau} - 1$. La fórmula es exacta en el límite de $N_{\tau} \to \infty$. La función de partición que resulta es

$$Z(J) = \prod_{t=0}^{N_{\tau}-1} \sum_{s_{1}^{t}=\pm 1} \cdots \sum_{s_{N}^{t}=\pm 1} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x}^{t} \left| \left\langle s_{1}^{t}, \cdots, s_{N}^{t}, \mathbf{x}^{t} \right| e^{-\frac{\beta}{N_{\tau}}(\hat{H}_{S}^{z}(J) + \hat{H}_{B} + \hat{H}_{I})} e^{-\frac{\beta}{N_{\tau}}\hat{H}_{S}^{t}} \right| s_{1}^{t+1}, \cdots, s_{N}^{t+1}, \mathbf{x}^{t+1} \right\rangle,$$
(5.10)

donde tomamos condiciones periódicas de contorno por tratarse del cálculo de una traza, $s_i^0 = s_i^{N_{\tau}}$. Luego de reemplazar los Hamiltonianos del sistema, baño térmico e interacción por sus definiciones ecs. (5.4), (5.6) y (5.7) llegamos a

$$Z(J) = \prod_{t=0}^{N_{\tau}-1} \sum_{s_{1}^{t}=\pm 1} \cdots \sum_{s_{N}^{t}=\pm 1} \exp\left(\frac{\beta}{N_{\tau}} \sum_{i=1}^{N} J_{i} s_{i}^{t} s_{i+1}^{t}\right)$$

$$\left\langle s_{1}^{t}, \cdots, s_{N}^{t} \right| \exp\left(\frac{\beta}{N_{\tau}} \sum_{i=1}^{N} \Gamma \hat{\sigma}_{i}^{x}\right) \left| s_{1}^{t+1}, \cdots, s_{N}^{t+1} \right\rangle$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x}^{t} \left\langle \mathbf{x}^{t} \right| \exp\left(-\frac{\beta}{2N_{\tau}} \sum_{l=1}^{\tilde{N}} \left(\frac{\hat{p}_{l}^{2}}{m_{l}} + m_{l} \omega_{l}^{2} \left(\hat{x}_{l} - \frac{1}{m_{l} \omega_{l}^{2}} \sum_{i=1}^{N} c_{il} s_{i}^{t}\right)^{2} \right) \right) \left| \mathbf{x}^{t+1} \right\rangle .(5.11)$$

La integral en (5.11) es la funcional de la influencia (4.22). La fuerza que actúa sobre el conjunto de osciladores armónicos es $\sum_i c_{il} s_i^t$ y es constante en los subintervalos $[\tau_t, \tau_{t+1}]$. El formalismo que desarrollamos en el Capítulo 4 es igualmente válido para sistemas con más de un grado de libertad. Como vamos a considerar exclusivamente el caso de un baño térmico Óhmico sustituimos en la ecuación (5.11) por la funcional (4.44). Ya que la funcional opera en el intervalo $[0, \beta\hbar]$ definimos la coordenada de espín como

$$s_i(\tau) \equiv \sum_{t=0}^{N_{\tau}-1} s_i^t \left(\theta(\tau - \tau_t) - \theta(\tau - \tau_{t+1}) \right) , \qquad (5.12)$$

donde θ es la función de Heaveside. Finalmente llegamos a

$$Z(J) = \operatorname{Tr}_{\{s_i^t\}} \exp\left(\frac{\beta}{N_{\tau}} \sum_{t=0}^{N_{\tau}-1} \sum_{i=1}^N J_i s_i^t s_{i+1}^t + \sum_{t=0}^{N_{\tau}-1} \sum_{i=1}^N \left(A + B s_i^t s_i^{t+1}\right)\right) F[s_i(\tau)], \quad (5.13)$$

 con

$$A = \frac{1}{2} \ln \left(\sinh \left(\frac{\beta \Gamma}{N_{\tau}} \right) \cosh \left(\frac{\beta \Gamma}{N_{\tau}} \right) \right) , \qquad (5.14)$$

$$B = \frac{1}{2} \ln \left(\coth \left(\frac{\beta \Gamma}{N_{\tau}} \right) \right) . \tag{5.15}$$

$$F[s_i(\tau)] = \exp\left(\frac{\alpha}{4} \left(\frac{\pi}{\beta\hbar}\right)^2 \int_0^{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \frac{s_i(\tau)s_i(\tau')}{\sin^2\left(\frac{\pi}{\beta\hbar}|\tau-\tau'|\right)}\right), \qquad (5.16)$$

y usamos que

$$\exp\left(\sum_{i=1}^{N} \left(A + Bs_i^t s_i^{t+1}\right)\right) = \left\langle s_1^t, \cdots, s_N^t \right| \exp\left(\frac{\beta}{N_\tau} \sum_{i=1}^{N} \Gamma \hat{\sigma}_i^x\right) \left| s_1^{t+1}, \cdots, s_N^{t+1} \right\rangle$$
(5.17)

para sustituir en (5.11).

5.4. Vinculación con el modelo de Ising de largo alcance

Notamos en la expresión (5.13) que la traza sobre los estados de los espines involucran sumatorias en las variables s_i^t que toman sólo los valores ±1 (los autovalores de $\hat{\sigma}_i^z$). Además, el modelo adquiere una nueva dimensión como consecuencia natural de la aplicación de la formula de Trotter-Suzuki. A las interacciones entre sitios de la cadena se les suman interacciones ferromagnéticas a primeros vecinos en el tiempo imaginario τ_t debidas a la naturaleza cuántica de los espines. También el baño es responsable de la aparición de interacciones ferromagnéticas de largo alcance en la dirección de τ . Los resultados de este Capítulo se fundamentan en la demostración dada por Suzuki [58] de que el estado fundamental de un sistema de espines en presencia de un campo transverso en *d*-dimensiones es equivalente a un modelo de Ising en (d + 1)-dimensiones a una temperatura finita.

En lo siguiente tomamos las unidades de manera tal que $k_B = \hbar = 1$. Nos interesa estudiar el comportamiento de una cadena de espines acoplada a un baño térmico Óhmico cuya densidad espectral es $J(\omega) = 2\pi\alpha\omega$ con frecuencia de corte $\omega_c < 1/\Delta\tau$. La función de partición efectiva en (1 + 1) dimensiones que se deduce de (5.13) es

$$Z(J) = \operatorname{Tr}_{\{s_i^t\}} e^{-\mathcal{A}[K_i, B, \alpha; s_i^t]}, \qquad (5.18)$$

donde definimos la acción clásica como

$$\mathcal{A}[K_i, B, \alpha; s_i^t] = -\sum_{t=0}^{N_\tau - 1} \sum_{i=1}^N K_i s_i^t s_{i+1}^t - B \sum_{t=0}^{N_\tau - 1} \sum_{i=1}^N s_i^t s_i^{t+1} - \frac{\alpha}{2} \sum_{t < t'}^{N_\tau - 1} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\pi}{N_\tau}\right)^2 \frac{s_i^t s_i^{t'}}{\sin^2\left(\pi |t - t'|/N_\tau\right)}, \quad (5.19)$$

siendo $K_i = J_i \beta / N_{\tau} = J_i \Delta \tau$ y eliminamos los términos constantes por no afectar el cálculo de cantidades promedio. El último término de la ecuación (5.19) corresponde a la influencia del baño térmico que resulta de discretizar la ecuación (5.16). El parámetro adimensional α que controla las interacciones entre la cadena y el ambiente gobierna las interacciones ferromagnéticas de largo alcance en la dirección de τ . La sustitución de las integrales de la ec. (5.16) por sumas es consistente con considerar los efectos de las interacciones entre sitios y con el campo transverso sólo sobre un conjunto discreto de tiempos imaginarios τ_t . Como consecuencia favorable de este proceso desaparece la divergencia ultravioleta que se manifiesta cuando se integra analíticamente. Los resultados exactos se recuperan en el límite de $N_{\tau} \to \infty$.

Es importante señalar que como resultado de nuestros cálculos llegamos a una extensión de la equivalencia establecida hace varios años entre el modelo de espín-bosón y el modelo de Ising en 1-dimensión de largo alcance [83, 84, 85]. La formula (5.19) nos enseña que un conjunto de sistemas de dos niveles con interacciones mutuas y acoplados a un baño térmico es equivalente al modelo de Ising en 2-dimensiones con interacciones de largo alcance sólo en una dirección que asociamos con la dirección del tiempo imaginario.

5.5. Simulaciones de Monte Carlo

Un anillo de espines que exhibe una transición desde una fase paramagnética (PM) hacia una ferromagnética (FM) es probablemente el modelo más simple en dimensión finita donde analizar los efectos combinados de desorden y disipación. El baño introduce interacciones ferromagnéticas de largo alcance en la dirección del tiempo imaginario que se suman a las de corto alcance debidas a la naturaleza cuántica de los espines. Es así como a temperatura nula se puede encontrar una transición de fase aún para un grupo finito de espines.

Las propiedades en el equilibrio de estos sistemas las analizaremos por medio de simulaciones de Monte Carlo aplicadas a la función de partición efectiva en (1 + 1) dimensiones (ec. (5.18)). La traza sobre todas las configuraciones de los $N \times N_{\tau}$ espines corresponde al promedio estadístico, que denotamos con $\langle \cdots \rangle$. En el caso con desorden congelado, las propiedades termodinámicas y, en particular las transiciones de fase, siguen de un análisis de la energía libre promediada sobre la distribución de probabilidad para las interacciones de intercambio. Este promedio se indica con [\cdots].

El algoritmo de Monte Carlo se puede hacer más eficiente cuando no hay frustración (las interacciones verifican $J_i > 0$). Para este caso adaptamos el método de *clusters* [86] al caso con interacciones ferromagnéticas de largo alcance [87]. Además, para no tener que rehacer simulaciones con valores de parámetros similares, empleamos métodos de histogramas que permiten recorrer el espacio de parámetros, por ejemplo en el entorno del punto donde ocurre una transición de fase, con una única simulación [88].

El modelo clásico equivalente se define en una red rectangular de tamaño $N \times N_{\tau}$. El límite de temperatura nula, $\beta \to \infty$, se alcanza tomando el límite termodinámico en la dirección del tiempo imaginario, $N_{\tau} \to \infty$. Trabajamos con distintos tamaños de redes, variando la proporción entre las dos direcciones de la muestra. Tomamos N desde 1 hasta 32 y N_{τ} desde 4 hasta 1024. Encontramos que 400 recorridos completos de la red bastan para termalizar hasta las muestras más grandes. Simulamos hasta 2048 realizaciones diferentes de interacciones de intercambio para capturar el efecto del desorden.

Nuestra investigación está centrada en las propiedades críticas de cadenas periódicas finitas e infinitas a temperatura nula. Anteriormente establecimos que la escala para el desorden es $0 < J_i < 1$. Para comparar, también simulamos la cadena con interacciones constantes $J_i = 1$. El estado del sistema se describe completamente con los parámetros adimensionales $\alpha \ y \ \Gamma \Delta \tau$.

Como dijimos anteriormente, tomamos sistemas con N en el intervalo entre 1 y 32. Los resultados de las simulaciones las agrupamos convenientemente para su interpretación en "N pequeño" ($N \leq 4$) y "N grande" (N > 4). Con los resultados del primer grupo buscamos analizar si las interacciones entre espines modifican la física del modelo de espín-bosón. Con los del segundo grupo buscamos extender las conclusiones presentadas en [74] al caso de interacciones aleatorias y las presentadas en [38, 41, 62, 89] al caso del acoplamiento con un baño térmico. Un resumen de estas investigaciones se encuentra en [30].

5.6. Diagrama de fase

5.6.1. Análisis del parámetro de Binder

Las transiciones de fase en el plano $(\alpha, \Delta \tau \Gamma)$ pueden encontrarse a través del análisis del cociente de Binder

$$g_{av} \equiv \frac{1}{2} \left[3 - \frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} \right] \,. \tag{5.20}$$

Notamos que en el caso de la cadena ferromagnética con interacciones constantes no se practica el promedio sobre el desorden $([\cdots])$. La densidad magnética se define como

$$m \equiv \frac{1}{NN_{\tau}} \sum_{i=1}^{N} \sum_{t=0}^{N_{\tau}-1} s_i^t .$$
 (5.21)

El análisis del cociente de Binder presenta distintos aspectos según se trate de una cadena finita o de su límite termodinámico.

N pequeño

Para N finito, el límite de temperatura nula del problema cuántico corresponde a un modelo clásico definido sobre una cinta de ancho finito $(N < \infty)$ y altura infinita $(N_{\tau} \to \infty)$. En este caso, podemos aplicar al parámetro de Binder el análisis de escala usual. Los valores críticos se encuentran fácilmente si se gráfica g_{av} como función de α para distintos valores de N_{τ} . La combinación adimensional de los momentos de la magnetización en la ecuación (5.20) lleva a que g_{av} sea independiente del tamaño en el punto crítico. Entonces, α_c lo ubicamos buscando el punto de intersección de las curvas de g_{av} en función de α para distintos N_{τ} [90], para una dada elección de $\Delta \tau_c \Gamma_c$.

El caso con N = 1 corresponde al problema bien conocido de un sistema de dos niveles acoplados a un baño térmico. De acuerdo a lo que expusimos en la sección 5.2, esperamos una transición de un estado incoherente a un estado localizado cuando el acoplamiento con el baño satisface $\alpha = 1$. Como ensayo del algoritmo numérico utilizado, rederivamos este resultado numéricamente. En la figura 5.1 mostramos un ejemplo con



Figura 5.1: El cumulante de Binder como función de α para $N = 1 \operatorname{con} \Delta \tau_c \Gamma_c = 0,48$. La transición de localización ocurre para $\alpha_c = 1,10 \pm 0,02$.

N = 1 y $\Delta \tau_c \Gamma_c = 0.48$, donde se aprecia que las curvas se cruzan para $\alpha_c = 1.10 \pm 0.02$ (el error mide la precisión en la determinación del punto de cruce). El diagrama de fases se construye repitiendo estos pasos para distintos valores de $\Delta \tau_c \Gamma_c$.

Hemos empleado el mismo método para obtener la curva crítica para N = 2 y 4, tanto con interacciones de intercambio constantes como aleatorias. En la figura 5.2 mostramos el diagrama de fase para N = 1, 2, 4. En general, es difícil determinar α_c para $\Delta \tau \Gamma < 0, 2$, donde g_{av} varía menos de 0.1 % y el valor de α_c queda oculto por el ruido.

Para N = 1, los puntos $(\alpha_c, \Delta \tau_c \Gamma_c)$ de la curva crítica se ajustan adecuadamente por una función lineal en $\Delta \tau \Gamma$ con término constante igual 1. Esta propuesta es compatible con el resultado analítico [31] que establece $\alpha_c = 1$ para $\Delta \tau_c \Gamma_c \to 0$.

A medida que N se incrementa, la transición de localización se corre hacia valores menores de α_c . Observamos que para N finito la cadena con desorden muestra un valor más bajo de $\Delta \tau_c \Gamma_c$ para un dado α_c . Sin embargo la diferencia tiende a disminuir cuando $\Delta \tau_c \Gamma_c \to 0$.

Límite termodinámico

En el límite termodinámico el análisis de escala finito debe hacerse usando los parámetros N y N_{τ} , y se puede presuponer que existe alguna relación de escala entre ellos. El cumulante de Binder es una cantidad adimensional que en la transición de fase debe



Figura 5.2: Curvas críticas $(\alpha_c, \Delta \tau_c \Gamma_c)$ para pequeñas cadenas, $N \leq 4$. Para N = 1 corresponde a la transición de localización en el modelo de espín-bosón. Los datos son bien ajustados por una función lineal que alcanza $\alpha_c = 1$ en $\Delta \tau_c \Gamma_c = 0$. Para N > 1, mostramos la curva de transición de fase para sistemas con interacciones de intercambio aleatorias (trazos gruesos) y para sistemas con interacciones de intercambio constantes (trazos finos).

satisfacer una relación de escala del tipo

$$g_{av} \sim \tilde{g}(N/\xi, y)$$
 (5.22)

donde ξ es la longitud de correlación espacial, \tilde{g} es una función de escala e y es el cociente entre el tamaño en la dirección del tiempo imaginario, N_{τ} , y alguna función adecuada de la dimensión espacial, N. Por ejemplo, se tiene (sec. 3.4)

$$y = \begin{cases} N_{\tau}/N^z & \text{escala convencional}, \\ N_{\tau}/e^{N^{\overline{z}}} & \text{escala activada}. \end{cases}$$
(5.23)

Un argumento simple muestra que para N fijo y valores generales para los otros parámetros, el cumulante de Binder alcanza un máximo como función de N_{τ} [34, 36]. Este argumento sigue siendo válido cuando se introducen las interacciones de largo alcance debidas al baño térmico. En efecto, cuando N_{τ} es muy pequeño con respecto a N, tenemos una cinta muy larga (en la dirección espacial) y las interacciones de largo alcance en la dirección del tiempo imaginario inducidas por el baño son irrelevantes. Mas aún, para valores de parámetros cercanos a los de la transición de fase del sistema infinito en dos dimensiones, el sistema cinta se encuentra muy lejos de la transición, y por lo tanto $g_{av} \to 0$. En el límite opuesto de $N_{\tau} \gg N$, se vuelve al problema de una cadena finita



Figura 5.3: Comportamiento típico del cumulante de Binder para $\Delta \tau_c \Gamma_c$ fijo en un entorno de su correspondiente α_c . El máximo de g_{av} es independiente de N sólo para $\alpha = \alpha_c$, ver el panel central.



Figura 5.4: Diagrama de fase para $N = \infty$. Mostramos la curva de transición de fase para la cadena desordenada con distribución uniforme de interacciones de intercambio en el intervalo [0, 1] (trazos gruesos) y para la cadena con interacciones de intercambio constantes $J_i = 1$ (trazos finos).

discutida en los párrafos anteriores. Ahora, para los parámetros elegidos, el nuevo sistema unidimensional debería tener una longitud de correlación finita más halla de su curva crítica y en consecuencia $g_{av} \rightarrow 0$. En resumen, para N y todos los restantes parámetros del sistema fijos, g_{av} debe alcanzar un máximo como función de N_{τ} . El valor máximo g_{av}^{max} es independiente de N en el punto crítico (ver figura 5.3). Los valores críticos para el límite termodinámico los extrapolamos a partir de una colección de cadenas de espines con N entre 8 y 32. Para cada $\Delta \tau_c \Gamma_c$ buscamos el valor de α con el que se alcanza el máximo independiente de N en g_{av} . El diagrama de fases de la figura 5.4 lo construimos repitiendo estos pasos. Las barras de error estiman la dispersión en los valores de g_{av} provenientes de la simulación de Monte Carlo y del desorden en las interacciones luego de propagar errores en la ecuación (5.20).

En la figura 5.4 mostramos con trazo grueso la curva de transición de fase para la cadena infinita desordenada. Esta curva puede ser descripta adecuadamente por una ley de potencias, $a(x^b - c^b)$ donde a = 1,13, b = 0,72 y $x = \Delta \tau \Gamma$. A diferencia del caso con N pequeño, la transición de fase se presenta aún para $\alpha = 0$. En efecto, c = 0,25 es el valor crítico que toma $\Delta \tau \Gamma$ cuando $\alpha = 0$ y se determina independientemente por medio de simulaciones numéricas efectuadas en el modelo aislado. También en la figura 5.4 representamos con trazo fino la curva de transición de fase para la cadena con interacciones constantes y disipación Óhmica que se determina con un procedimiento análogo y tamaños

de muestras similares a los usados en el problema con desorden. El ajuste con la función $a(x^b - c^b)$ lleva ahora a a = 1,48 y b = 0,60. Las simulaciones sobre el modelo aislado con interacciones constantes establecen c = 0,44. En ambos casos observamos que el tamaño de la fase de vidrio de espín se incrementa cuando crece el acoplamiento con el ambiente.

En ausencia de baño térmico ($\alpha = 0$), los valores críticos para $c = \Delta \tau_c \Gamma_c$ pueden obtenerse analíticamente tanto para el caso no aleatorio como para el caso aleatorio a partir de las soluciones bien establecidas de Onsager [91] y McCoy-Wu [63, 64], respectivamente. La acción clásica efectiva en 2-dimensiones para la cadena desordenada aislada resulta equivalente al modelo de Ising aleatorio de McCoy-Wu si se introduce en la ecuación (5.19) una "temperatura efectiva" $T \equiv 1/B$, donde *B* está definido por la ecuación (5.15). En ese modelo con distribución uniforme de interacciones de intercambio, la temperatura crítica, T_c , satisface

$$2/T_c + [\ln \tanh(J_i/T_c)] = 0.$$
(5.24)

Entonces, $T_c = 1,42$ y a través de la ec. (5.15) obtenemos $\Delta \tau_c \Gamma_c = 0,25$. En particular, para $J_i = 1$ se recupera el resultado de Onsager que en términos de las variables en uso es $\Delta \tau_c \Gamma_c = 0,44$. Vemos que ambos valores concuerdan con los resultados numéricos que mostramos en la figura 5.4.

5.6.2. Susceptibilidad lineal global

En una transición de fase desde una paramagnética hacia otra ferromagnética se espera identificar la línea crítica por medio de la localización de la divergencia de la susceptibilidad lineal global definida como

$$\chi_l \equiv \sum_{i=1}^N \chi_i = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial \langle m_i \rangle}{\partial h_i} \right|_{h_i=0} = \frac{1}{N_\tau} \sum_{i=1}^N \left[\langle m_i^2 \rangle - \langle m_i \rangle^2 \right] , \qquad (5.25)$$

у

$$m_i = \sum_{t=1}^{N_\tau} s_i^t \,. \tag{5.26}$$

Con el objetivo de estudiar posteriormente los efectos de la disipación sobre la distribución de las susceptibilidades locales de la cadena con interacciones aleatorias, intentamos analizar la divergencia de la susceptibilidad global en cadenas finitas³. De hecho, cuando $N < \infty$ esperamos encontrar una divergencia de χ sólo en la transición de fase, y

³La susceptibilidad lineal global es calculada usando la expresión del lado derecho de la ec. (5.25) y tomando la magnetización en valor absoluto para tener en cuenta la ruptura de ergodicidad en la fase ferromagnética [92]. Esto introduce un corrimiento sistemático en el pico de la susceptibilidad debido al hecho que $\langle |m_i| \rangle$ no es estrictamente cero en la fase paramagnética.



Figura 5.5: Susceptibilidad lineal global promedio χ_l para $\alpha_c = 0.45$ como función de $\Delta \tau \Gamma$, N = 4 y $N_{\tau} = 32, 64, 128$ de abajo hacia arriba. Panel superior: interacciones aleatorias. Panel inferior: ferromagneto puro.



Figura 5.6: Comparación entre la susceptibilidad lineal global para el modelo con interacciones aleatorias (Izq.) y el ferromagnético (Der.) con N = 4, $N_{\tau} = 128$ y $\alpha_c = 0.45$.

no dentro de la fase paramagnética como se obtuvo teóricamente para la cadena infinita aislada [38, 39, 40]. En la figura 5.5 encontramos para N_{τ} finito que la susceptibilidad lineal global tiene un pico para un valor de $\Delta \tau \Gamma$ con α fijo que es algo mayor que el obtenido con el análisis del parámetro de Binder en el límite $N_{\tau} \to \infty$. Como es de esperar la altura del pico se incrementa mientras que su posición se corre hacia menores valores de $\Delta \tau \Gamma$ mientras que N_{τ} crece. Para N = 4, $N_{\tau} = 128$ y $\alpha = 0.45$ encontramos una desviación del orden del 10%. Esto indica que los efectos de tamaño finito en N_{τ} son todavía importantes. Notamos que esto mismo ocurre con los sistemas desordenados.

En la figura 5.6 buscamos comparar la forma del pico para sistemas similares ordenados y desordenados, es decir de igual tamaño y bajo las mismos efectos del baño. Notamos que el pico es más agudo en el caso con interacciones ferromagnéticas y la desviación entre su ubicación para N_{τ} finito y su valor asintótico $N_{\tau} \to \infty$ es menos importante. Más precisamente hallamos que

$$(\Delta \tau \Gamma)_c = \begin{cases} \text{Binder} & \text{Pico en } \chi \\ N_\tau \to \infty & N_\tau = 128 \\ 0.77 & 0.84 & \text{ordenado} \\ 0.55 & 0.66 & \text{desordenado} \end{cases}$$
(5.27)

En conclusión, encontramos que la extrapolación de los datos de susceptibilidad a partir de N_{τ} finito hacia el límite termodinámico es realmente difícil. Lamentablemente, el poder de computo que nos es hoy accesible todavía no alcanza para realizar un análisis

detallado de las relaciones de escala. Vamos a tener presente este inconveniente cuando analicemos las propiedades dinámicas de la cadena desordenada disipativa en la fase paramagnética.

5.7. Relación de escalas en el caso crítico

Una de las peculiaridades del comportamiento crítico de una cadena aislada cuántica con espines de Ising con interacciones aleatorias es que las relaciones de escala crítica son del tipo activado en vez del caso convencional con leyes de potencias [38]. Nos interesa investigar si este mismo comportamiento persiste cuando se incluye disipación Óhmica.

5.7.1. Relación de escalas para el parámetro de Binder

El parámetro de Binder no sólo da un criterio para encontrar la curva de transición de fase sino que también es de gran ayuda para la derivación de las leyes de escala. El estudio de las leyes de escala para la función g_{av} puede en principio dar una respuesta a la pregunta de si el comportamiento crítico es del tipo convencional o activado. Las relaciones de escala para tamaño finito implican que las cantidades adimensionales deben ser funciones de N/ξ y de N_{τ}/N^z o $N_{\tau}/e^{N^{\bar{z}}}$ según se trate del caso convencional o activado, respectivamente. En el punto crítico, la longitud de correlación en la dirección espacial, ξ , diverge. Esto sugiere que la variable de escala debe ser o bien N_{τ}/N_{τ}^{max} o bien $\ln N_{\tau}/\ln N_{\tau}^{max}$ según se trate de cada uno de los casos mencionados anteriormente, donde N_{τ}^{max} es el valor de N_{τ} que maximiza a g_{av} [36]. Esta manera de analizar los datos tiene la ventaja de no tener que determinar los exponentes críticos z o \bar{z} .

Sin embargo, la interpretación de los resultados numéricos es delicada. Aún para $\alpha = 0$, donde es posible demostrar analíticamente la relación de escala activada [38, 39, 40], ha sido difícil distinguir ambos tipos de comportamiento por medio de simulaciones de Monte Carlo. Esta dificultad despertó cierto grado de confusión que sólo recientemente ha comenzado a aclarase. A mediados de los años 90, los trabajos numéricos realizados sobre el modelo de Ising cuántico desordenado en una [89], dos [34] y tres [36] dimensiones predecían una relación de escala convencional. Luego de que Fisher [38, 39, 40] demostrara con un método de decimación que la relación de escalas es activada, los datos numéricos confirmaron la predicción analítica en 1*d* solamente a través de la transformación a fermiones [62]. Más recientemente y gracias al mayor poder de cálculo de computadoras de nueva generación, se reestudiaron los problemas en 1 y 2-dimensiones por medio de simulaciones de Monte Carlo empleando muestras de mayor tamaño [41] que permitieron



Figura 5.7: Ensayo de la relación de escala convencional para ($\Delta \tau_c \Gamma_c = 0.48, \alpha_c = 0.25$).



Figura 5.8: Ensayo de la relación de escala activada para ($\Delta \tau_c \Gamma_c = 0.48, \alpha_c = 0.25$).



Figura 5.9: Función de distribución de probabilidad para la susceptibilidad lineal local para una cadena finita con N = 4, $N_{\tau} = 32$, 64, 128, 256. $\alpha = 0.45$ (de Izq. a Der.) y $\Delta \tau \Gamma = 0.66$.

distinguir el comportamiento activado.

En la Fig. 5.7 mostramos la relación de escala del parámetro de Binder, g_{av}/g_{av}^{max} , con N/N_{τ}^{max} (convencional) y en la Fig. 5.8 con $\ln N/\ln N_{\tau}^{max}$ (activado). Ambas relaciones de escala arrojan el mismo valor crítico ($\Delta \tau_c \Gamma_c, \alpha_c$) en acuerdo con nuestro análisis previo más simple usando la independencia de la altura del máximo con N en el punto crítico. Desafortunadamente, los dos gráficos de relación de escala son cualitativamente muy similares. Las interacciones de largo alcance producto del acoplamiento con el baño nos fuerzan a utilizar tamaños de muestras que no son lo suficientemente grandes como para poder distinguir entre ambos tipos de relaciones de escala críticas.

5.7.2. Distribución de susceptibilidades locales

Un análisis alternativo al estudio de las relaciones de escala críticas para modelos con desorden está basado en el estudio de las funciones de distribución de probabilidad (en inglés, probability distribuition functions, abreviado por PDF) de las susceptibilidades locales lineal y no lineal, y cómo se comportan cuando se aproximan a la línea crítica.

Para la cadena aislada con interacciones aleatorias, la PDF de susceptibilidades locales lineales y no lineales decae, para grandes valores de su argumento, con una ley de potencias cuyo exponente decrece cuando se aproxima al punto crítico cuántico. La inversa de este exponente está conectada con el exponente crítico dinámico y su divergencia en



Figura 5.10: Distribución de probabilidad para la susceptibilidad de un sitio. $\Delta \tau \Gamma = 0.48$ (Arr. Izq.), 0.43 (Arr. Der.), 0.41 (Ab. Izq.), 0.39 (Ab. Der.). $\alpha = 0.15$ en todos los casos. Las pendientes de las líneas rectas indicadas en cada panel son 4.55 (Arr. Izq.), 1.82 (Arr. Der.), 1.20 (Ab. Izq.), 0.5 (Ab. Der.).

la transición implica una relación de escala activada. Además, a una distancia finita del punto crítico, el decaimiento ya es lo suficientemente lento como para conducir a una susceptibilidad global divergente. Esta región en el entorno de la línea crítica, donde la susceptibilidad global diverge, recibe el nombre de fase de Griffitths-McCoy. Es interesante preguntarse si este fenómeno también ocurre con la presencia de disipación.

Para dar una respuesta a esta pregunta comenzamos estudiando la PDF de susceptibilidades lineales locales de cadenas finitas. En la Fig. 5.9 mostramos la densidad de probabilidad $P(\ln \chi_i)$ para N = 4 y cuatro valores de N_{τ} , 32,64,128 y 256, para $\alpha = 0,45$ y $\Delta \tau \Gamma = 0,66$. Un valor finito de N_{τ} da una cota finita al máximo posible de χ_i . Este gráfico puede ser comparado con la curva de la extrema izquierda de la figura 20 en la referencia [62] que fue obtenida para N = 4 y efectivamente para $N_{\tau} \to \infty$. Aquí mostramos que el acoplamiento con un baño térmico no modifica la forma de las PDF de manera sustancial.

Finalmente, analizamos el decaimiento de la PDF de la susceptibilidad lineal local en el entorno de la línea crítica. Cada panel de la Fig. 5.10 presenta estas PDF para cuatro valores de $\Delta \tau \Gamma$ y α fijo. Cada conjunto de datos, representado con símbolos diferentes, fue obtenido con diferentes N y eligiendo N_{τ} de manera que el parámetro de Binder adquiera su máximo valor. Las líneas rectas son guias visuales e indican un posible decaimiento como ley de potencia. Los valores de estos exponentes se detallan en el pie de la figura.

A pesar de que en los gráficos se aprecie una tendencia a que el exponente se anule al acercarse a la transición, (siendo esto compatible con una relación de escalas activada y con la presencia de singularidades de Griffiths-McCoy), una relación funcional entre éste y la distancia a la curva crítica parece difícil de establecer más halla de toda duda en base solamente a los datos numéricos.

5.8. Conclusión

Hemos estudiado el efecto combinado del desorden congelado, el acoplamiento con un baño térmico Óhmico y las fluctuaciones cuánticas inducidas por un campo transverso en cadenas de espines mediante simulaciones de Monte Carlo. Con un análisis cuidadoso de los datos determinamos el diagrama de fases tanto para cadenas finitas como en el límite termodinámico. Encontramos que la transición de fase para $\alpha \to 0$ sólo se presenta en las cadenas infinitas.

Observamos que el acoplamiento con el baño favorece la extensión de la fase ordenada. Hallamos claras evidencias por medio de la distribución de susceptibilidades locales de que la fase de Griffiths-McCoy no es destruida por el acoplamiento con el ambiente.

Nuestros resultados para la ley de escala que caracteriza la transición de fase de las cadenas infinitas no son conclusivos. Si bien nuestros datos son compatibles con una ley de escalas activada, con el poder de cómputo actual, el caso convencional no puede ser excluido.

Capítulo 6

Efectos de la disipación sobre sistemas de vidrios cuánticos

6.1. Introducción

El estudio teórico de un único sistema de dos niveles acoplado al ambiente es un problema complejo que ha sido resuelto y extensamente analizado. Su generalización a muchos sistemas de dos niveles interactuantes representa actualmente un desafío. Más difícil aún es el estudio de estos sistemas cuando las interacciones mutuas presentan algún grado de desorden. Por este motivo, en el capítulo anterior realizamos un estudio numérico de la generalización del modelo de espín-bosón por medio de simulaciones de Monte Carlo. Ciertamente, las técnicas de Monte Carlo son muy útiles para simular el comportamiento de modelos como el nuestro, de los que se desconoce su solución analítica o que resulta extremadamente complicada de seguir. Sin embargo, encontramos un conjunto de dificultades o impedimentos propios del método. En primer lugar, hallamos que la duración del cómputo representa un problema habitual que limita el tamaño máximo de la muestra que podemos estudiar. Luego, extrapolar los resultados al límite termodinámico requiere de un alto grado de control sobre los errores estadísticos y los efectos de tamaño finito. En segundo lugar, usualmente necesitamos conocer las expresiones analíticas para algunas magnitudes en términos de sus variables de control, pero resulta muy difícil inferir esta clase de relaciones partiendo solamente del conjunto de datos.

Por otro lado, el uso de aproximaciones puede tornar accesible el tratamiento teórico de problemas complejos como la generalización del modelo de espín-bosón. En muchas ocasiones, el mejor complemento para los resultados hallados con métodos de Monte Carlo se obtiene a través de un método auto-consistente llamado de campo medio. La idea del método es enfocarse en una cierta partícula del sistema (en nuestro caso espín) y asumir que el rol de las partículas vecinas (espines) es formar un campo (magnético) promedio que actúa sobre la partícula inicial (espín). En esta aproximación, al eliminarse los efectos de las fluctuaciones que se extienden más allá de la partícula considerada, se reduce el problema inicial de física estadística de muchos cuerpos en el problema de un solo cuerpo.

Para continuar con el estudio de los modelos de espines con interacciones mutuas desordenadas y en contacto con el ambiente, consideraremos un modelo de campo medio muy simple que reproduce muchas características de otros más realistas. Este modelo es una generalización cuántica del modelo de *p*-espín esférico con interacciones aleatorias acoplado a un baño de osciladores armónicos cuánticos [27, 25]. La principal ventaja de este modelo es que es lo suficientemente simple como para ser estudiado en detalle. Al igual que en el capítulo 5 buscamos analizar los efectos de las interacciones mutuas, la disipación y las fluctuaciones cuánticas, en el contexto de un sistema vidrioso macroscópico pero con interacciones de largo alcance [28]. Esta situación tiene como realizaciones experimentales a los vidrios de espín uniaxiales en presencia de un campo transverso [11, 13, 14] y a las aleaciones de Kondo desordenadas [93, 94].

Los resultados de este Capítulo se muestran también en [28], y se comparan con los obtenidos resolviendo la dinámica en tiempo real del mismo sistema. En la investigación de este modelo hemos considerado dos escenarios diferentes. En el primero buscamos los posibles estados termodiámicos del sistema imponiendo las condiciones de equilibrio usuales. En el segundo, estudiamos las propiedades del sistema bajo la condición de estabilidad marginal (en inglés marginal stability anzatz, abreviado por AMS). Es sabido que para temperaturas suficientemente bajas la dinámica de los modelos de vidrios de espín sin baño se vuelve extremadamente lenta, y que la línea de transición dinámica predecida con la AMS coincide con la obtenida con el tratamiento en tiempo real [25]. Aplicando la AMS a nuestro sistema acoplado con el ambiente buscamos estudiar algunos aspectos de la dinámica del modelo.

6.2. Modelo de *p*-espín esférico cuántico

En la sección 2.2 mencionamos que el modelo de p-espín es un modelo que captura gran parte de la fenomenología observada en los vidrios de espín reales y se adopta frecuentemente debido a que conduce a cálculos más simples. En el caso clásico, estos modelos están descriptos por el Hamiltoniano

$$H_S^{\rm cl}(J) = -\sum_{i_1 < \dots < i_p}^N J_{i_1 \dots i_p} \, s_{i_1} \cdots s_{i_p} \,, \tag{6.1}$$

donde las s_i son variables de Ising y p es un entero siendo $p \ge 2$. Las sumas son sobre todas las p-uplas de espines posibles. De esta manera el modelo resulta totalmente conectado y define una teoría de campo medio.

Los $J_{i_1...i_p}$ representan una interacción al azar entre los espines de distintos sitios y se toman como variables Gaussianas independientes con media nula y varianza

$$[J_{i_1\cdots i_p}^2] = \frac{J^2 p!}{2N^{p-1}},\tag{6.2}$$

donde la relación de escala con N asegura el buen límite termodinámico.

Para aplicar los métodos de integral funcional es usual relajar la condición sobre el tamaño de los espines de tal manera que puedan tomar no sólo los valores discretos ± 1 sino un conjunto continuo. Por ejemplo, esta condición se fuerza a través de la introducción de un multiplicador de Lagrange z para el vínculo esférico que se suma al Hamiltoniano del sistema,

$$H_{\rm v} = z \left(\sum_{i=1}^{N} s_i^2 - N \right) \,.$$
 (6.3)

Este vínculo fue introducido por Jones, Kosterlitz y Thouless [51] para el modelo p = 2.

Cuando el sistema se encuentra en presencia de un campo magnético transverso pueden producirse transiciones de estado por efecto túnel. El Hamiltoniano que incorpora las fluctuaciones cuánticas se expresa por (sec. 3.2)

$$\hat{H}_{S}(J) = -\sum_{i_{1} < \dots < i_{p}}^{N} J_{i_{1} \dots i_{p}} \,\hat{\sigma}_{i_{1}}^{z} \cdots \hat{\sigma}_{i_{p}}^{z} - \sum_{i=1}^{N} \hbar \Delta \hat{\sigma}_{i}^{x} \,, \tag{6.4}$$

donde Δ es la frecuencia de túnel. La formulación es en términos de operadores de espín que se representan con las matrices de Pauli $\hat{\sigma}_i^a$ con a = x, y, z. Ahora, el vínculo esférico impone que

$$\sum_{i=1}^{N} \langle (\hat{\sigma}_i^z)^2 \rangle = N , \qquad (6.5)$$

donde $\langle \cdots \rangle$ denota el promedio estadístico cuántico.

6.3. Modelo de *p*-espín esférico cuántico acoplado al ambiente

Recordamos que el Hamiltoniano de un conjunto de N espines idénticos interactuantes acoplados a un baño de osciladores armónicos independientes se puede expresar como

$$\hat{H}(J) = \hat{H}_S(J) + \hat{H}_B + \hat{H}_I,$$
(6.6)

donde $\hat{H}_S(J)$ es el Hamiltoniano (6.4) del modelo *p*-espín cuántico, \hat{H}_B es el Hamiltoniano del baño (ec. 4.7)

$$\hat{H}_B = \sum_{l=1}^{N} \frac{\hat{p}_l^2}{2m_l} + \frac{1}{2} m_l \omega_l^2 \hat{x}_l^2 \,, \tag{6.7}$$

y \hat{H}_I es el término de interacción entre el sistema de interés y el baño térmico

$$\hat{H}_{I} = -\sum_{l=1}^{\tilde{N}} \sum_{i=1}^{N} c_{il} \, \hat{x}_{l} \hat{\sigma}_{i}^{z} \,. \tag{6.8}$$

Notamos que en el Hamiltoniano de interacción (6.8) no se escribe el contra-término. Al igual que en la sección 5.3, asumimos que cada espín está acoplado a un conjunto propio de \tilde{N}/N osciladores armónicos independientes, con \tilde{N} su número total. De esta manera la densidad espectral del ambiente es

$$J_{ij}(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{l=1}^{N} \frac{c_{il} c_{jl}}{m_l \omega_l} \delta(\omega - \omega_l) = \delta_{ij} J(\omega) , \qquad (6.9)$$

donde $J(\omega)$ está definida en la ec. (4.11), y los índices i, j identifican a los espines. Tomando este resultado junto a la condición de vínculo esférico llegamos a que el contra-término (ec. (4.10)) es constante y su valor es irrelevante para el cálculo de magnitudes promedio.

Los métodos descriptos en la sección 4.4 que incorporan los efectos del baño térmico en el funcional de la influencia se extienden sin dificultad a sistemas con más de un grado de libertad. El mayor problema que surge en la resolución del problema cuántico estadístico proviene de la naturaleza discreta de los espines. Es por este motivo que permitimos a los espines tomar valores continuos $-\infty < s_i < \infty$ reemplazando el vínculo rígido $s_i^2 = 1$ por el vínculo esférico (6.5). En el apéndice A.1 derivamos un modelo continuo efectivo usando la condición de vínculo esférico a partir del Hamiltoniano definido por las ecuaciones (6.4)–(6.8). La función de partición para la versión continua viene dada por

$$Z(J)_{\text{cont}} = \int \mathcal{D}\mathbf{s} \exp\left(-\frac{S_{\text{cont}}}{\hbar}\right) \,, \tag{6.10}$$

 con

$$-\frac{S_{\text{cont}}}{\hbar} \equiv -\frac{M}{2\hbar} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial s_{i}}{\partial \tau}\right)^{2} + \frac{1}{\hbar} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \sum_{i_{1} < \dots < i_{p}}^{N} J_{i_{1} \dots i_{p}} s_{i_{1}}(\tau) \cdots s_{i_{p}}(\tau) -\frac{1}{\beta\hbar^{2}} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau' \sum_{i=1}^{N} K(\tau - \tau') s_{i}(\tau) s_{i}(\tau') - \frac{1}{\hbar} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau z(\tau) \left(\sum_{i=1}^{N} s_{i}^{2}(\tau) - N\right),$$

$$(6.11)$$

donde introducimos la masa

$$M \equiv \frac{\hbar \Delta \tau}{2} \ln \left(\frac{1}{\Delta \tau \Delta} \right) \,, \tag{6.12}$$

que mide la fuerza del túnel cuántico. $\Delta \tau$ es el tiempo microscópico de cambio de dirección del espín que identificamos con ω_c^{-1} . El vínculo esférico se traduce ahora en

$$\left\langle \sum_{i=1}^{N} s_i(\tau) s_i(\tau') \right\rangle \bigg|_{\tau=\tau'} = \sum_k \left\langle \left| \sum_{i=1}^{N} s(\omega_k) \right|^2 \right\rangle = N , \qquad (6.13)$$

donde $\langle \cdots \rangle$ representa el promedio respecto a la acción (6.11). La dependencia en τ o ω en las variables de espín denotan si los cálculos se realizan en el espacio de los tiempos imaginarios o en el de las frecuencias de Matsubara, respectivamente (ver Apéndice A.1). Las ecuaciones (6.11) y (6.13) definen el modelo de *p*-espín esférico cuántico sobre el que discutiremos en el resto del presente Capítulo.

Antes de pasar a la solución del modelo es conveniente discutir sobre dos puntos. El primero se refiere a la dependencia con p. En el caso que p = 2 la acción es cuadrática y el problema se torna diagonalizable con una transformación de Fourier. Este caso más simple ha sido extensamente discutido tanto con baño térmico [95] como sin baño térmico [96]. En el primer caso la competencia entre la masa y el término de interacción en la ec. (6.11) conduce a la existencia de una masa crítica $M_c \propto \hbar^2/J$ por encima de la cual el estado fundamental del sistema se sobrepone a las fluctuaciones cuánticas y adquiere orden de vidrio [28]. Sin embargo, la fase ordenada es trivial y sus propiedades físicas son cualitativamente diferentes de aquellas con espines discretos. La presencia de un acoplamiento con un baño térmico no cambia esta situación.

Un escenario completamente diferente se observa cuando se toma $p \ge 3$. En estos casos el estado fundamental ordenado es no trivial y los modelos comparten un número de características cualitativas con modelos más realistas. De aquí en adelante sólo discutiremos sobre los casos con $p \ge 3$ y en particular tomaremos el valor p = 3 para nuestros cálculos numéricos.

El segundo punto es sobre el caso con J = 0. En este caso la ec. (6.11) se reduce a un modelo simplificado de sistema de dos niveles cuya física difiere en algún sentido de uno más realista. Para J = 0 encontramos

$$\langle |s(\omega_k)|^2 \rangle_{J=0} = \beta^{-1} \left(M \omega_k^2 + 2z + 2K(\omega_k) \right)^{-1} ,$$
 (6.14)

donde $K(\omega_k)$ se define en la ec. (4.42), y para T = 0 la ec. (6.13) cumple

$$1 = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{\hbar}{M\omega^2 + 2K(\omega) + 2z} \equiv f_s(z) .$$
 (6.15)

Veamos primero el caso Óhmico. Para s = 1, la ec. (6.14) es el propagador de un oscilador armónico simple con frecuencia $\omega_0 = \sqrt{2z/M}$ determinada autoconsistentemente por la ec. (6.15). Por la posición de los polos de la ec. (6.14) observamos que existe una transición entre un régimen subamortiguado y otro sobreamortiguado para $2z = \pi^2 \alpha^2 \hbar^2/M$. Usando este valor de z en la ec. (6.15) (con s = 1) y resolviendo para α encontramos que esto ocurre para $\alpha = 1/\pi^2$, independientemente de M. Lejos de este valor encontramos los comportamientos límite

$$2z = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{4M} \left(1 - 4\alpha + \cdots\right), & \alpha \ll 1\\ \\ \frac{\pi^2 \hbar^2 \alpha^2}{M} \exp\left(-\pi^2 \alpha\right), & \alpha \gg 1 \end{cases}$$
(6.16)

Para $\alpha \ll 1$ el sistema exhibe oscilaciones débilmente atenuadas de frecuencia $\omega_0 \sim \hbar/M$. En el límite opuesto, $\alpha \gg 1$, la función de correlación decae exponencialmente con una constante de tiempo que se incrementa exponencialmente con la intensidad del acoplamiento , $\tau \sim \alpha^{-2} \exp(\pi^2 \alpha)$.

Comparando con los resultados del modelo de espín-bosón resumidos en la sección 5.2, vemos que para el modelo esférico la transición entre estados coherentes y movimiento incoherente se preserva para un valor universal de $\alpha < 1$, pero la transición de localización para $\alpha = 1$ es reemplazada por una región con un régimen de alto acoplamiento caracterizado por una energía exponencialmente pequeña $\propto \exp(-\pi^2 \alpha)$. En este régimen, el efecto túnel no es suprimido pero sus efectos son fuertemente reducidos.

En el caso super-Óhmico, tampoco se encuentra transición de localización. Fácilmente se puede mostrar que para s > 1 la expresión en la segunda línea de la ec. (6.16) se reemplaza por $z \sim \hbar \omega_{\rm ph} \alpha^{1/(1-s)}$ para $\alpha \gg 1$. La tasa de decaimiento de la función de correlación todavía decrece continuamente, pero sólo como una ley de potencias, mientras que la fuerza del acoplamiento con el baño se incrementa.

En el caso de ambiente sub-Óhmico la situación es diferente. Para s < 1 la integral en el miembro derecho de la ec. (6.15) es finita para z = 0 donde toma el valor máximo posible. Para $f_s(0) < 1$, la Ec. (6.15) no puede ser satisfecha para ningún valor positivo de z. Este fenómeno es completamente análogo a la condensación de Bose-Einstein, señalando una transición de localización. Resolviendo la ecuación $f_s(0) = 1$ encontramos que el acoplamiento crítico viene dado por

$$\alpha^{\rm crit} \sim \left(\frac{\hbar}{M\omega_{\rm ph}}\right)^{1-s} .$$
(6.17)

Contrariamente, para cualquier valor de α , el sistema se localiza para un valor suficientemente grande de M. Estos resultados son análogos a los obtenidos para sistemas de dos niveles discretos [31]. Las diferencias y similitudes entre el modelo original y su versión esférica deberán ser tenidas en cuenta cuando interpretemos nuestros resultados.

6.4. Formalismo con réplicas

Es un resultado bien establecido que las propiedades de sistemas desordenados pueden ser derivadas con la ayuda del truco de las réplicas (sec. 2.3). La presencia de desorden hace necesario promediar todas las magnitudes físicas, en particular la energía libre. En este sentido usamos "el truco de las réplicas" para escribir

$$\beta \overline{f} = -\frac{1}{N} [\ln Z] = -\frac{1}{N} \lim_{n \to 0} \frac{1}{n} \ln[Z^n] .$$
(6.18)

La derivación de la expresión para la energía libre asociada a la acción de la ec. (6.11) es similar al cálculo para el sistema aislado desarrollado en [25]. El parámetro de orden dependiente del tiempo imaginario, $Q^{ab}(\tau, \tau')$, se define como

$$Q^{ab}(\tau,\tau') = \frac{1}{N} [\langle \sum_{i=1}^{N} s_i^a(\tau) s_i^b(\tau') \rangle], \qquad (6.19)$$

donde a, b son índices de réplicas. El vínculo esférico impone la restricción $Q^{aa}(0) = 1$. Como estamos interesados en estudiar el estado estacionario, el parámetro de orden es sólo función de la diferencia de tiempos

$$Q^{ab}(\tau,\tau') = Q^{ab}(\tau-\tau') = Q^{ab}(\tau'-\tau), \qquad (6.20)$$

donde la última igualdad resulta de la invariancia del Hamiltoniano frente inversiones temporales. Dado que $Q_{ab}(\tau)$ es una función periódica de período $\hbar\beta$, es conveniente pasar a una formulación en término de los coeficientes de Fourier, $Q^{ab}(\omega_k) = \frac{1}{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau Q^{ab}(\tau) \exp(i\omega_k \tau)$, siendo la energía libre promedio (Apéndice A.1)

$$\beta \overline{f} = \lim_{n \to 0} G_0 , \qquad (6.21)$$

donde

$$G_{0} = -\frac{1}{n} \sum_{k} \operatorname{Tr} \ln \left(Q^{ab}(\omega_{k}) \right) - \sum_{k} \left(1 - \frac{i\beta^{2}\hbar}{n} \sum_{ab}^{n} O^{ab}(\omega_{k}) Q^{ab}(\omega_{k}) \right) - \frac{J^{2}\beta}{4\hbar n} \sum_{ab}^{n} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \left(\sum_{k} \exp(-i\omega_{k}\tau) Q^{ab}(\omega_{k}) \right)^{p} - \beta z , \qquad (6.22)$$

y el operador $O^{ab}(\omega_k)$ se define como

$$O^{ab}(\omega_k) \equiv \frac{-i}{\beta\hbar} \delta^{ab} \left(\frac{M}{2} \omega_k^2 + z + K(\omega_k) \right) .$$
(6.23)

Las ecuaciones de movimiento se encuentran buscando extremos de la energía libre con respecto a variaciones de $Q_{ab}(\omega_k)$. El resultado es

$$\left(\frac{M}{2}\omega_k^2 + z + K(\omega_k)\right)\delta_{ab} = \left(\beta Q^{ab}(\omega_k)\right)^{-1} + \frac{J^2 p}{4\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \exp(i\omega_k\tau) \left(Q^{ab}(\tau)\right)^{p-1} .$$
(6.24)

La ecuación (6.24) junto con el vínculo esférico $Q^{aa}(\tau)|_{\tau=0} = 1$ determinan las diferentes fases del modelo.

En lo siguiente, discutiremos sobre las soluciones de la ec. (6.24) trabajando con variables adimensionales. Estas se introducen midiendo las energías en unidades de J, y los tiempos en unidades de \hbar/J . La intensidad del túnel cuántico y el acoplamiento con el baño se miden ahora por los parámetros

$$\Gamma \equiv \frac{2\hbar^2}{J^2\beta M}, \quad , \qquad \alpha_s \equiv \frac{\beta\pi\alpha J}{\sin\left(\pi s/2\right)} \left(\frac{\hbar\omega_{\rm ph}}{J}\right)^{1-s}, \tag{6.25}$$

respectivamente.

6.4.1. Solución con réplicas

Las soluciones con las propiedades características de las distintas fases resultan de las distintas parametrizaciones del parámetro de orden.

Solución paramagnética

En la fase paramagnética, (PM), la matriz del parámetro de orden es diagonal,

$$Q^{ab}(\omega_k) = q_{\rm d}(\omega_k)\delta^{ab} . ag{6.26}$$

Reemplazando en la ecuación (6.24) obtenemos la siguiente ecuación para $q_{\rm d}(\omega_k)$,

$$\frac{\omega_k^2}{\Gamma} + z + \alpha_s |\omega_k|^s = \frac{1}{q_d(\omega_k)} + \Sigma(\omega_k), \qquad (6.27)$$

donde definimos la auto-energía

$$\Sigma(\omega_k) \equiv \frac{p}{4} \int_0^\beta d\tau \, \exp(i\omega_k \tau) \, q_{\rm d}^{p-1}(\tau) \,. \tag{6.28}$$

El multiplicador de Lagrange z se determina con el vínculo esférico

$$q_{\rm d}(0) = \sum_{k} q_{\rm d}(\omega_k) = 1,$$
 (6.29)

que lleva a un conjunto de ecuaciones implícitas no triviales.

Solución de vidrio de espín

En la fase de vidrio de espín, (SG), vamos a buscar soluciones con un esquema de ruptura de simetría de réplicas de un paso (1s-RSB)

$$Q^{ab}(\omega_k) = (q_d(\omega_k) - q^{\text{EA}})\delta^{ab} + q_{\text{EA}}\epsilon^{ab}, \qquad (6.30)$$

donde

$$\epsilon^{ab} = \begin{cases} 1 & \text{si } a \neq b \text{ pertendence al mismo bloque diagonal de } m \times m, \\ 0 & \text{en otro caso}, \end{cases}$$
(6.31)

e introducimos el parámetro de orden de Ewards-Anderson, q_{EA} . En la referencia [25] se demostró que esta propuesta es una solución *exacta* del modelo aislado. La misma demostración es igualmente válida en presencia de un baño térmico si lím_{$\omega \to 0$} $K(\omega) = 0$ (que aquí se verifica en la ec. (4.42)).

La matriz inversa $Q_{ab}^{-1}(\omega_k)$ puede ser escrita como

$$\left(Q^{-1}\right)^{ab}(\omega_k) = A(\omega_k)\delta^{ab} + B(\omega_k)\epsilon^{ab} , \qquad (6.32)$$

donde (en el límite $n \to 0$)

$$A(\omega_k) = \frac{1}{q_{\rm d}(\omega_k) - q_{\rm EA}}, \qquad (6.33)$$

у

$$B(\omega_k) = \frac{-q_{\rm EA}}{q_{\rm d}^2(\omega_k) - q_{\rm EA}^2(m-1) + q_{\rm d}(\omega_k)q_{\rm EA}(m-2)} .$$
(6.34)

Las ecuaciones para el extremo de q_{EA} y $q_{d}(\omega_{k})$ pueden ser obtenidas introduciendo las ecuaciones (6.30) y (6.32) en la ecuación (6.24) si $a \neq b, \omega_{k} = 0$ y a = b, respectivamente. Estas son

$$\frac{1}{q_{\rm d}^2(0) - q_{\rm EA}^2(m-1) + q_{\rm EA}q_{\rm d}(0)(m-2)} + \frac{p\beta}{4}q_{\rm EA}^{p-2} = 0, \qquad (6.35)$$

у

$$\frac{\omega_k^2}{\Gamma} + z + \alpha_s |\omega_k|^s = \frac{q_{\rm d}(\omega_k) + q_{\rm EA}(m-2)\delta_{\omega_k,0}}{q_{\rm d}^2(\omega_k) - q_{\rm EA}^2(m-1)\delta_{\omega_k,0} + q_{\rm EA}q_{\rm d}(\omega_k)(m-2)\delta_{\omega_k,0}} + \Sigma(\omega_k) , \quad (6.36)$$

donde $\Sigma(\omega_k)$ se define en la ec (6.28). Las ecuaciones (6.35) y (6.36) deben ser suplementadas con una ecuación para el parámetro m, que debe ser evaluado de acuerdo a alguna de las dos posibles prescripciones que conducen a estados físicos diferentes. La primera es la condición de equilibrio usual en la que el valor de m debe ser un extremo de la energía libre. En la segunda m se elige de manera que la estabilidad del estado ordenado es marginal, es decir que el espectro de excitaciones tiene un modo de energía cero.

Solución de equilibrio de vidrio de espín

En el equilibrio la energía libre por espín, f, debe ser estacionaria con respecto a variaciones en m. Los únicos términos dependientes de m en f son

$$\frac{1}{\beta} \lim_{n \to 0} \frac{1}{n} \left(-\operatorname{Tr} \ln \left(Q^{ab}(0) \right) - \frac{\beta}{4} n(m-1) q_{\mathrm{EA}}^p \right) \,, \tag{6.37}$$

que pueden ser evaluados con el resultado

$$-\frac{1}{\beta} \left(\ln\left(q_{\rm d}(0) - q_{\rm EA}(1-m)\right) + \frac{m-1}{m} \ln\left(\frac{q_{\rm d}(0) - q_{\rm EA}}{q_{\rm d}(0) - q_{\rm EA}(1-m)}\right) \right) - \frac{m-1}{4} q_{\rm EA}^p. \quad (6.38)$$

La ecuación de extremización $\partial f/\partial m = 0$ es

$$\frac{1}{m}\frac{q_{\rm EA}}{q_{\rm d}(0) - q_{\rm EA}(1-m)} + \frac{1}{m^2}\ln\left(\frac{q_{\rm d}(0) - q_{\rm EA}}{q_{\rm d}(0) - q_{\rm EA}(1-m)}\right) + \frac{\beta}{4}q_{\rm EA}^p = 0.$$
(6.39)

Combinando las ecuaciones (6.35) y (6.39) y definiendo

$$y' = \frac{q_{\rm EA}}{q_{\rm d}(0)}, \qquad x_p = \frac{my'}{1 - y'},$$
 (6.40)

obtenemos

$$\ln\left(\frac{1}{1+x_p}\right) + \frac{x_p}{1+x_p} + \frac{x_p^2}{p(1+x_p)} = 0.$$
 (6.41)

Esta es una ecuación maestra para x_p que sólo depende del parámetro p. Para p = 3, el caso que consideraremos en detalle

$$x_3 = 1,81696. \tag{6.42}$$

Usando la ec. (6.35) y las definiciones (6.40), tenemos

$$\frac{p\beta m^2 q_{\rm EA}^p}{4} = \frac{x_p^2}{1+x_p},\tag{6.43}$$

у

$$\frac{p\beta m^2 q_{\rm d}^p(0)}{4} = x_p^{2-p} \frac{(m+x_p)^p}{1+x_p} \,. \tag{6.44}$$

Es conveniente descomponer la parte diagonal del parámetro de orden $q_d(\omega_k)$ y la auto-energía $\Sigma(\omega_k)$ en una parte singular (constante) y una regular (dependiente de τ),

$$q_{\rm d}(\tau) = q_{\rm EA} + q_{\rm reg}(\tau) , \qquad (6.45)$$

$$\Sigma(\tau) = \frac{p\beta}{4}q_{\rm EA}^{p-1} + \Sigma_{\rm reg}(\tau) . \qquad (6.46)$$
Sustituyendo en la ec. (6.36) y usando las ecs. (6.43) y (6.44), los términos que son proporcionales a $\delta_{\omega_k,0}$ se cancelan y obtenemos una ecuación para la parte regular de $q_d(\omega_k)$,

$$\frac{\omega_k^2}{\Gamma} + z' + \alpha_s |\omega_k|^s = \frac{1}{q_{\text{reg}}(\omega_k)} + \Sigma_{\text{reg}}(\omega_k) - \Sigma_{\text{reg}}(0) , \qquad (6.47)$$

donde

$$z' = \frac{p}{4} \beta m q_{\rm EA}^{p-1} \frac{1+x_p}{x_p}, \qquad (6.48)$$

у

$$\Sigma_{\rm reg}(\omega_k) - \Sigma_{\rm reg}(0) = \frac{p}{4} \int_0^\beta d\tau \, \left(\cos(\omega_k \tau) - 1\right) \left(q_{\rm d}^{p-1}(\tau) - q_{\rm EA}^{p-1}\right) \,. \tag{6.49}$$

Solución de vidrio de espín marginalmente estable

La condición de estabilidad marginal corresponde a anular el autovalor transverso (replicón) de la matriz de variaciones a segundo orden de G_0 con respecto a $Q^{ab}(\omega_k)$. Esta condición se cumple si $x_p = p - 2$ (Apéndice A.2). Las ecuaciones (6.43),(6.44) y (6.47)-(6.49), derivadas para el estado de equilibrio, siguen valiendo reemplazando $x_p \to p - 2$.

6.5. Diagrama de fase

El diagrama de fase para el sistema acoplado con p = 3 y α fijo se construye usando los métodos numéricos descriptos en la referencia [25]. La fase paramagnética está descripta por la ec. (6.27) sujeta al vínculo esférico (6.29). Para cada temperatura, las ecuaciones se resuelven iterativamente como función de Γ , comenzando por valores grandes o pequeños de este parámetro. En estos límites podemos encontrar soluciones perturbativas analíticas que sirven de punto de partida para el proceso de auto-consistencia.

Las soluciones a las ecuaciones que describen la fase de vidrio de espín se encuentran de la siguiente manera: primero elegimos x_p de acuerdo a si queremos estudiar las soluciones de equilibrio ($x_{p=3} = 1,81696$) o las marginalmente estables ($x_{p=3} = p-2 = 1$). Fijamos β y m y calculamos q_{EA} , $q_d(0)$ y z' con las ecuaciones (6.43),(6.44) y (6.48), respectivamente. Luego resolvemos (6.47) iterativamente variando Γ , comenzando con $\Gamma = 0$, hasta que encontramos un valor que satisface el vínculo esférico.

Para un dado $p \ge \alpha$, las ecuaciones (6.43),(6.44) y (6.47)-(6.49) tienen soluciones con $q_{\text{EA}} \neq 0$ sólo para valores suficientemente bajos de $\Gamma \ge T$. En otro caso, tanto las fluctuaciones térmicas como las cuánticas destruyen el estado ordenado. Entonces, existe una curva $\Gamma_c(T)$ en el plano (T, Γ) por encima de la cual el sistema está en la fase paramagnética. La curva de transición de fase es el lugar de los puntos donde las energías libres



Figura 6.1: Diagramas de fase estáticos (Izq.) y dinámicos (Der.) para el modelo con p = 3 acoplado a un baño Óhmico (s = 1). Los acoplamientos con el baño son $\alpha = 0, 0.25, y 0.5$ de abajo hacia arriba. La línea de trazo continuo y la línea de puntos representan transiciones de segundo y primer orden, respectivamente.

de las soluciones PM y SG coinciden. En la figura 6.1 se aprecia que las características cualitativas de los diagramas de fases construídos en base a las soluciones de equilibrio y marginalmente estables son similares. Observamos que la curva crítica dinámica está siempre por encima de la de equilibrio, es decir que la región de vidrio de espín que se obtiene con la condición AMS es más amplia que la que se obtiene con la condición de equilibrio.

Al igual que en el modelo aislado, encontramos una línea crítica con una transición de segundo orden y una sección de primer orden. Sobre la línea crítica de segundo orden se cumple la condición m = 1.

Las características cualitativas del diagrama de fases para p > 2 son las siguientes. Por un lado, el parámetro de orden q_{EA} cambia discontinuamente de valor al cruzar la frontera entre las fases. Por otro lado, la curva de transición de fases contiene un punto tricrítico (T^*, Γ^*) donde cambia el orden de la transición termodinámica. Para $T \ge T^*$, la transición de fase es de segundo orden de acuerdo a la clasificación de Ehrenfest. Esto significa que la entropía es una función continua sobre la curva crítica a pesar que el parámetro de orden no lo sea. En cambio, cuando $T < T^*$ la transición termodinámica es discontinua o de primer orden según la clasificación de Ehrenfest. En este caso la energía interna cambia discontinuamente de valor y esta diferencia define al calor latente. El origen de este comportamiento proviene del hecho que el parámetro m toma valores diferentes por encima y por debajo de T^* . Para $T > T^*$, m = 1 sobre la curva de transición. Este también es su valor en la fase paramagnética y por lo tanto m es continuo sobre la transición al igual que las magnitudes observadas. Para $T < T^*$, $m \neq 1$ sobre la curva de transición y es una función decreciente de T que se anula linealmente cuando $T \rightarrow 0$. Al cruzar la frontera entre las fases para $T < T^*$, m es discontinuo y en consecuencia también lo son las magnitudes físicas.

En el panel derecho (izquierdo) de la figura 6.1 mostramos los diagramas de fase dinámicos (para el equilibrio) obtenidos para p = 3 y tres valores diferentes de acoplamiento con un baño Óhmico, $\alpha = 0, 0, 25, 0, 5$. La línea de trazo continuo y la línea de puntos representan transiciones de segundo y primer orden, respectivamente.

Podemos realizar las siguientes observaciones:

- 1. En el límite $\Gamma \to 0$ la temperatura de la transición es independiente de la intensidad del acoplamiento con el baño.
- 2. La región del espacio de fases correspondiente a la fase ordenada ocupa un mayor tamaño cuando se incrementa α . El acoplamiento a un sistema disipativo estabiliza este estado.
- 3. La temperatura dinámica tricrítica decrece rápidamente cuando α se incrementa (en menor grado para la solución para el equilibrio).

Nuestra primera observación es una consecuencia del hecho que en el límite de $\Gamma \rightarrow 0$ la función de partición está esencialmente determinada por las componentes del pseudoespín de frecuencia cero que se desacoplan del baño.

La segunda observación resulta de simples consideraciones físicas. El término de interacción en la acción favorece el orden de vidrio de espín. El acoplamiento con el baño favorece la localización y su efecto se percibe como una reducción de la frecuencia efectiva del mecanismo de túnel. Entonces, en la presencia de un baño térmico, el valor de la frecuencia de túnel desnuda necesaria para destruir el estado ordenado debe incrementarse con α . Aunque el estado localizado y el estado de vidrio pueden parecer superficialmente similares, en realidad son muy diferentes. En el primero, la función de correlación simetrizada $C(t + t_w, t_w)$ converge hacia un plateau como función de t pero nunca decae a cero [31]. En el segundo, la función de correlación pasa por un plateau, pero finalmente para tiempos muy grandes, $t \gg t_w$, converge a cero [28]. En la figura 6.2 representamos la evolución en tiempo real de la función de correlación simetrizada $C(t + t_w, t_w)$ y la respuesta $R(t + t_w, t_w)$ en función del tiempo t y del tiempo de espera t_w en la fase paramagnética y en la de vidrio de espín. El cálculo de estas funciones se encuentra en [27, 28] y aquí sólo se presentan las gráficas correspondientes para ejemplificar el comportamiento en tiempo real del modelo acoplado a un baño Ohmico. En la figura 6.2 vemos que la fase paramagnética se presenta para $\alpha = 0,2$ y está caracterizada por una función de correlación simetrizada que rápidamente alcanza un régimen estacionario y oscila alrededor de cero. Al aumentar el acoplamiento con el baño térmico ($\alpha = 1,0$) manteniendo el resto de los parámetros constantes se entra en una fase de vidrio de espín donde primero ocurre un decaimiento rápido hacia un plateua de valor bajo, para luego pasar a un decaimiento monótono a cero. La función de respuesta también muestra un comportamiento diferente de acuerdo al valor elegido para α . En un caso rápidamente adquiere un comportamiento estacionario con oscilaciones alrededor de cero mientras que en la fase de vidrio de espín presenta una cola muy larga. En base a estas observaciones podemos decir que el sistema sufre una transición dinámica de fase entre las fases PM y SG para un valor intermedio de α .

El hecho que el acoplamiento con el baño favorezca el estado ordenado también se refleja en los valores que toman los parámetros de orden $q_d(\tau)$ y q_{EA} . En la figura 6.3 mostramos la dependencia en τ de la parte diagonal del parámetro de orden $q_d(\tau)$ tanto para la solución estática como para la dinámica para valores fijos de T y Γ y distintos valores de α . Vemos que cuando α se incrementa, $q_d(\tau)$ alcanza un plateau más elevado para tiempos imaginarios grandes.

En la figura 6.4 mostramos la dependencia de Γ con m para una temperatura fija $(T < T^*)$, y distintos valores de acoplamiento con el baño térmico. La función $\Gamma(m)$ es multivaluada y la rama con sentido físico es aquella para la cual $dm/d\Gamma > 0$. Esta es una consecuencia de la ec. (6.48) que muestra que m es una función decreciente de $q_{\rm EA}$ quien a su vez es una función decreciente de Γ . Se puede ver que para valores fijos de Γ y T, m decrece cuando α se incrementa. Entonces, el acoplamiento con el baño térmico produce una temperatura efectiva más alta en la fase de vidrio [2, 97].

También estudiamos el diagrama de fase con baños no Ohmicos. En la figura 6.5 comparamos los efectos de un baño Óhmico con los de un baño sub-Óhmico (s = 1/2)y con los de un baño super-Óhmico (s = 3/2) para los mismos valores de α . Parecería que con los valores de parámetros elegidos, la región de estabilidad de la fase ordenada es ampliada (reducida) con un baño sub-Óhmico (super-Óhmico) en comparación al caso Óhmico. Esta característica no es general ya que con otros valores de $\omega_{\rm ph}$ los tamaños relativos de los efectos de los baños Óhmicos y sub-Óhmicos son diferentes. En realidad, estas figuras fueron preparadas tomando $\omega_{\rm ph} = 10$ en los casos no Óhmicos, y este factor modifica el acoplamiento con el baño en un factor $\omega_{\rm ph}^{s-1}$ (ver la definición (4.14)).



Figura 6.2: (Izq.) Función de correlación simetrizada $C(t + t_w, t_w)$ como función de t para $\alpha = 0,2$ (fase PM) y $\alpha = 1$ (fase de SG). La temperatura es T = 0,1en ambos casos. Las diferentes curvas corresponden a diferentes tiempos de espera $t_w = 5, 10, 20$. Para $\alpha = 0,2$ las curvas colapsan en la asintótica, mientras que para $\alpha = 1$ muestran efectos de envejecimiento. (Der.) Función de respuesta $R(t + t_w, t_w)$ en función de t para los mismos parámetros. Se observa un efecto similar.



Figura 6.3: Parte diagonal de $q_d(\tau)$ para las soluciones estáticas (Izq.) y dinámicas (Der.).



Figura 6.4: El parámetro m como función de Γ para tres valores diferentes de acoplamiento con el baño térmico Óhmico. $\beta = 20 > \beta^*$.



Figura 6.5: Curva crítica dinámica para diferentes baños térmicos: sub-Óhmico (s = 1/2, curva superior), Óhmico (s = 1, curva central) y super-Óhmico (s = 1,5, curva inferior). Para los casos no Óhmicos tomamos $\hbar \omega_{\rm ph}/J = 10$. La constante de acoplamiento adimesional con el baño es en todos los casos $\alpha = 0,5$.

6.6. Conclusión

En este Capítulo discutimos los efectos de distintos tipos de baños térmicos cuánticos sobre el modelo de *p*-espín esférico cuántico desordenado. Encontramos que los acoplamientos con el baño más fuertes favorecen a la fase de vidrio de espín para cualquier tipo de baño. Con esto queremos decir que cuanto más grande es la constante de acoplamiento α mayor es la región de vidrio de espín en el plano (T, Γ) .

Para los baños no Óhmicos es difícil extraer conclusiones generales ya que se suma un nuevo parámetro a la densidad espectral, la frecuencia de fonón $\omega_{\rm ph}$. Si $\omega_{\rm ph} \neq 1$, el efecto de los distintos baños es complicado, exhibimos algunos ejemplos de la problemática de ubicar la línea crítica en el plano (T, Γ) .

Encontramos que las fluctuaciones cuánticas deprimen la temperatura para la cual se produce la transición a la fase de vidrio de espín pero no la eliminan completamente. Sin embargo, las propiedades en el régimen cuántico se manifiestan cualitativamente diferentes de las que se observan en el límite clásico. Para temperaturas suficientemente bajas ($T < T^*$) la transición de fase termodinámica es de primer orden mientras que en el caso opuesto la transición es de segundo orden.

Los diagramas de fases obtenidos mediante la condición de equilibrio usual y con la condición de estabilidad marginal presentan características similares. La región de vidrio de espín en el plano (T, Γ) obtenida con la última condición es algo mayor que la obtenida para el equilibrio.

Si adoptamos como evidencia de una fase localizada el hecho de que para tiempos de espera t_w suficientemente grandes la función de correlación simetrizada no decae a cero para ninguna diferencia finita de $t - t_w$, entonces nuestro modelo no tiene una fase localizada según se ve de los gráficos en tiempo real. Sin embargo, al quitar la interacción entre espines se recupera la fase localizada en baños Óhmicos y sub-Óhmicos, como se demostró con un breve cálculo analítico.

Capítulo 7

Efectos de la disipación en modelos de espines cuánticos s = 1/2 desordenados

7.1. Introducción

En los Capítulos 5 y 6 encontramos que el acoplamiento con un entorno disipativo tiene efectos decisivos sobre las propiedades de los sistemas de espines cuánticos. En este Capítulo continuaremos el estudio de los efectos de la disipación sobre las propiedades dinámicas y de equilibrio de sistemas cuánticos vidriosos analizando un modelo de espines interactuantes s = 1/2 que reemplazan a los espines esféricos tratados en el Capítulo 6. Consideraremos nuevamente el caso en que las interacciones mutuas involucran a *p*-uplas de espines y son de rango infinito. Para p = 2 recobramos un modelo de vidrio de espín metálico estudiado previamente en [98]. Para p > 3, el modelo exhibe un comportamiento más rico [25, 26, 57], incluyendo la posibilidad de transiciones de primer orden (como las halladas en la sec. 6.5). Los resultados para las distintas magnitudes estudiadas [29], obtenidos luego de resolver numéricamente las expresiones analíticas, son compatibles con los del modelo esférico.

7.2. Modelo de *p*-espín cuántico s = 1/2 desordenado acoplado al ambiente

Nos enfocamos en el estudio de modelos de espines cuánticos s = 1/2 desordenados en presencia de un campo magnético transverso. Al igual que en los Capítulos 5 y 6, nuestro

sistema de interés está descripto por el Hamiltoniano

$$\hat{H}_{S}(J) = -\sum_{i_{1} < \dots < i_{p}}^{N} J_{i_{1} \dots i_{p}} \,\hat{\sigma}_{i_{1}}^{z} \cdots \hat{\sigma}_{i_{p}}^{z} - \sum_{i=1}^{N} \Gamma \hat{\sigma}_{i}^{x} \,, \tag{7.1}$$

donde $\hat{\sigma}_i^x, \hat{\sigma}_i^z$ son operadores de espín que se representan por las matrices de Pauli. La interpretación de los parámetros es la misma que la dada en la sección 6.2; Γ representa la intensidad del campo magnético transverso, y $J_{i_1\cdots i_p}$ denota la intensidad de las interacciones de intercambio aleatorias entre grupos de p espines. Para estas interacciones elegimos una distribución de probabilidad Gaussiana con media nula y varianza $p!J^2/2N^{p-1}$.

Vamos a estudiar la termodinámica y algunos aspectos de la dinámica de este modelo acoplado a un ambiente cuántico representado por un conjunto de \tilde{N} osciladores armónicos independientes. Al igual que en los casos anteriormente estudiados, el Hamiltoniano para el sistema acoplado está dado por

$$\hat{H}(J) = \hat{H}_S(J) + \hat{H}_B + \hat{H}_I,$$
(7.2)

donde $\hat{H}_S(J)$ es el Hamiltoniano del modelo *p*-espín cuántico (ec. (7.1)), \hat{H}_B es el Hamiltoniano del baño (ec. 4.7),

$$\hat{H}_B = \sum_{l=1}^{N} \frac{\hat{p}_l^2}{2m_l} + \frac{1}{2} m_l \omega_l^2 \hat{x}_l^2 , \qquad (7.3)$$

y \hat{H}_I es el término de interacción entre el sistema de interés y el baño térmico,

$$\hat{H}_{I} = -\sum_{l=1}^{\tilde{N}} \sum_{i=1}^{N} c_{il} \, \hat{x}_{l} \hat{\sigma}_{i}^{z} + \sum_{l=1}^{\tilde{N}} \frac{1}{2m_{l}\omega_{l}^{2}} \left(\sum_{i=1}^{N} c_{il} \, \hat{\sigma}_{i}^{z}\right)^{2} \,, \tag{7.4}$$

que incluye un contra-término para eliminar una posible renormalización de la masa inducida por el acoplamiento con el baño (ver la ec. (5.7)). Este Hamiltoniano se diferencia del que se tomó en la sección 6.3 en que se abandonan los grados de libertad continuos y se pasa a una formulación en términos de espines s = 1/2.

7.3. Función de partición para el sistema total

La función de partición del sistema total para una realización particular de las interacciones aleatorias es

$$Z(J) = \operatorname{Tr}\left(e^{-\beta \hat{H}(J)}\right), \qquad (7.5)$$

e involucra la suma sobre todos los estados del sistema de interés y del baño. La traza sobre las variables del baño puede ser tomada de manera explícita usando las técnicas desarrolladas en la sección 4.4. Las características del acoplamiento con el baño térmico permanecen representadas por la densidad espectral,

$$J_{ij}(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{l=1}^{\tilde{N}} \frac{c_{il} c_{jl}}{m_l \omega_l} \delta(\omega - \omega_l) = \delta_{ij} J(\omega) , \qquad (7.6)$$

donde usamos que cada espín está acoplado a un conjunto propio de \tilde{N}/N osciladores armónicos y sustituimos con la definición de $J(\omega)$ (ec. (4.11)). En particular, vamos a considerar solamente un baño Óhmico parametrizado por (ec. (4.14) con s = 1)

$$J(\omega) = 2\pi\alpha\hbar\omega\theta(\omega_{\rm max} - \omega), \qquad (7.7)$$

donde ω_{\max} es una frecuencia de corte dura ultravioleta.

El planteo de este problema guarda una notoria similitud con el de la cadena de espines de la sección 5.3. Luego, puede ser vinculado con un modelo de Ising clásico usando el formalismo de Trotter-Suzuki. Al igual que en esa sección, particionamos el intervalo $[0, \beta\hbar]$ en N_{τ} subintervalos de longitud $\Delta \tau = \beta\hbar/N_{\tau}$. Como se trata del cálculo de una traza tomamos condiciones perídicas de contorno. La transformación es exacta en el límite $N_{\tau} \to \infty$. Las expresiones con N_{τ} finito dan una sucesión de aproximaciones al valor asintótico de las magnitudes físicas que nos interesan estudiar. A partir de esta sucesión de valores extrapolamos el comportamiento para $N_{\tau} \to \infty$.

En adelante tomamos las unidades de manera tal que $\hbar = k_B = 1$. La aproximación de orden N_{τ} para la función de partición luego de eliminar las variables del baño es

$$Z = \operatorname{Tr}_{\{s_i^t\}} \exp\left(\frac{\beta}{N_{\tau}} \sum_{t=0}^{N_{\tau}-1} \sum_{i_1 < \dots < i_p}^{N} J_{i_1 \dots i_p} s_{i_1}^t \cdots s_{i_p}^t + \sum_{t=0}^{N_{\tau}-1} \sum_{i=1}^{N} \left(A + B s_i^t s_i^{(t+1)}\right) - \sum_{t,t'=0}^{N_{\tau}-1} \sum_{i=1}^{N} (1 - s_i^t s_i^{t'}) \mathcal{C}_{(t-t')}\right),$$
(7.8)

donde

$$A = \frac{1}{2} \ln \left(\sinh \left(\frac{\beta \Gamma}{N_{\tau}} \right) \cosh \left(\frac{\beta \Gamma}{N_{\tau}} \right) \right) , \qquad (7.9)$$

$$B = \frac{1}{2} \ln \left(\coth \left(\frac{\beta \Gamma}{N_{\tau}} \right) \right) , \qquad (7.10)$$

$$\mathcal{C}_{(t-t')} = 2\alpha \int_0^{\omega_{\max}} d\omega \, \frac{\cosh\left(\omega\left(\beta\hbar|t-t'|/N_\tau - \beta\hbar/2\right)\right)\sinh^2\left(\omega\beta\hbar/2N_\tau\right)}{\omega\sinh\left(\omega\beta\hbar/2\right)} \,. \tag{7.11}$$

La traza representa la suma sobre todas las $2^{N \times N_{\tau}}$ configuraciones distintas de espines de Ising clásicos, $s_i^t = \pm 1$. El índice t indexa los extremos de los subintervalos definidos por

 $\tau_t = t\Delta\tau$, con $t = 0, \ldots, N_{\tau} - 1$. El último término de la ecuación (7.8) corresponde a la influencia del baño. Este término resulta de reemplazar la densidad espectral (7.7) en la ecuación (4.35) e integrar en el tiempo imaginario. Como consecuencia se obtiene una interacción efectiva en el tiempo imaginario entre los estados del espín de un dado sitio.

El promedio sobre el desorden de la función de partición se calcula usando el truco de las replicas (sec. 2.3)

$$\beta \overline{F} = -[\ln Z] = -\lim_{n \to 0} \frac{[Z^n] - 1}{n} ,$$
 (7.12)

con n el número de réplicas. Después de algunos pasos matemáticos empleando las relaciones

$$1 = \int \prod_{ab}^{n} \prod_{tt'}^{N_{\tau}-1} \mathcal{D}Q^{atbt'} \delta\left(NQ^{atbt'} - \sum_{i=1}^{N} s_i^{at} s_i^{bt'}\right)$$
(7.13)

$$\propto \int \prod_{ab}^{n} \prod_{tt'}^{N_{\tau}-1} \mathcal{D}Q^{atbt'} \mathcal{D}\Lambda^{atbt'} \exp\left(\frac{i}{N_{\tau}^2} \sum_{ab}^{n} \sum_{tt'}^{N_{\tau}-1} \Lambda^{atbt'} \left(NQ^{atbt'} - \sum_{i=1}^{N} s_i^{at} s_i^{bt'}\right)\right) , (7.14)$$

y luego de eliminar los términos constantes por ser irrelevantes, obtenemos

$$[Z^n] = \prod_{a,b=1}^n \prod_{t,t'=0}^{N_\tau - 1} \int \mathcal{D}Q^{atbt'} \mathcal{D}\Lambda^{atbt'} \exp\left(-NP(\Lambda, Q)\right) , \qquad (7.15)$$

 con

$$P(\Lambda, Q) = \sum_{a,b=1}^{n} \sum_{t,t'=0}^{N_{\tau}-1} \left(\frac{\Lambda^{atbt'}}{N_{\tau}^{2}} Q^{atbt'} - \frac{\beta^{2} J^{2}}{4 N_{\tau}^{2}} (Q^{atbt'})^{\bullet p} + \mathcal{C}_{(t-t')} \delta^{ab} (1 - Q^{atbt'}) \right) - \ln \operatorname{Tr}_{\{s^{at}\}} \left(e^{H_{\text{eff}}} \right) , \qquad (7.16)$$

$$H_{\text{eff}} = \sum_{a,b=1}^{n} \sum_{t,t'=0}^{N_{\tau}-1} \frac{\Lambda^{atbt'}}{N_{\tau}^2} s^{at} s^{bt'} + \sum_{a=1}^{n} \sum_{t=0}^{N_{\tau}-1} \left(A + Bs^{at} s^{a(t+1)}\right) , \qquad (7.17)$$

donde el símbolo • se usa para distinguir la potenciación ordinaria de la potenciación de matrices. En esta expresión, las interacciones entre distintos sitios se han desacoplado. A cambio de esta simplificación, debemos trabajar con las interacciones entre réplicas de un mismo sitio.

En el límite termodinámico, $N \to \infty$, las integrales en $[Z^n]$ pueden ser evaluadas con el método del punto de ensilladura con el cuidado de intercambiar los límites $N \to \infty$ y $n \to 0$. La energía libre promediada sobre el desorden por espín es entonces

$$\beta \overline{f} = -\lim_{n \to 0} \frac{P[\Lambda_0, Q_0]}{n}, \qquad (7.18)$$

donde Λ_0 y Q_0 son tales que

$$\frac{\delta P(Q,\Lambda)}{\delta Q}\Big|_{Q_0,\Lambda_0} = 0 , \qquad \frac{\delta P(Q,\Lambda)}{\delta \Lambda}\Big|_{Q_0,\Lambda_0} = 0 .$$
(7.19)

En lo siguiente omitiremos los subíndices en los valores del punto de ensilladura Q_0 y Λ_0 .

La entropía promedio se obtiene fácilmente de la energía libre promediada sobre el desorden,

$$-\frac{\overline{s}}{k_B} = \beta \overline{f} + \frac{1}{n} \sum_{a,b=1}^n \sum_{t,t'=0}^{N_\tau - 1} \left(\frac{\beta^2 J^2}{2N_\tau^2} (Q^{atbt'})^{\bullet p} - \delta^{ab} (1 - Q^{atbt'}) \frac{\partial \mathcal{C}_{(t-t')}}{\partial \beta} \right) + \frac{\beta \Gamma}{\sinh(2\beta\Gamma/N_\tau)} \left(\cosh(2\beta\Gamma/N_\tau) - \frac{1}{n} \sum_{a=1}^n Q^{a(t+1)at} \right) .$$
(7.20)

La susceptibilidad magnética es otro observable físico de interés que se define por

$$\chi = \left. \frac{\partial m}{\partial h} \right|_{h=0} \,, \tag{7.21}$$

donde $m = N^{-1} \sum_{i=1}^{N} [\langle \sigma_i^z \rangle]$ es la magnetización total promediada sobre el desorden y h es un campo magnético externo longitudinal. En términos de $Q^{atbt'}$ la susceptibilidad viene dada por

$$\chi = \frac{\beta}{N_{\tau}^2} \sum_{a,b=1}^n \sum_{t,t'=0}^{N_{\tau}-1} Q^{atbt'} .$$
(7.22)

En las ecuaciones (7.20) y (7.22) los términos a la derecha del igual se especializan en el valor del punto de ensilladura.

7.3.1. Solución con réplicas

Los elementos de matriz $Q^{atbt'}$ son el parámetro de orden del modelo,

$$Q^{atbt'} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} [\langle s_i^{at} s_i^{bt'}] \rangle .$$
 (7.23)

En general se necesita resolver de manera autoconsistente un número de ecuaciones igual al número de componentes independientes en la matriz de $Q^{atbt'}$. En la aproximación estática introducida por Bray y Moore [23] se toma a la matriz $Q^{atbt'}$ independiente de los índices t y t'. Por un lado, esta aproximación lleva a cálculos más sencillos, pero por el otro, puede conducir a resultados equivocados como en el problema de la estabilidad de la solución RS del modelo SK [99, 100].

En este trabajo es inapropiado emplear la aproximación estática ya que el baño térmico introduce interacciones de largo alcance en el tiempo imaginario y es necesario considerar todas las dependencias en los índices t y t'. El método que emplearemos para resolver nuestras ecuaciones dependientes de t y t' es una extensión al modelo p-espín con baño del método originalmente desarrollado por Goldschmidt y Lai [101] para resolver el modelo SK aislado fuera de la aproximación estática.

Afortunadamente, las simetrías del Hamiltoniano efectivo, H_{eff} , reducen el número de elementos independientes de la matriz $Q^{atbt'}$ que debemos calcular. Debido a la invariancia de H_{eff} frente a traslaciones en el tiempo imaginario, los términos diagonales en los índices de réplicas sólo dependen de la diferencia de tiempos,

$$Q^{atat'} = q_{\rm d} |t - t'| . (7.24)$$

Notamos que por las condiciones periódicas de contorno también se cumple $q_d(t) = q_d(N_\tau - t)$. Además, como $q_d(0) = 1$, solamente se requiere considerar los valores $(t - t') = 1, 2, \dots, \operatorname{int} \frac{N_\tau}{2}$. Más aún, los elementos de la matriz de réplicas fuera de la diagonal son independientes de t y t' como fuera demostrado por Bray y Moore [23].

Finalmente, las distintas fases del modelo se determinan con distintas parametrizaciones del parámetro de orden.

Solución paramagnética

Las matrices de Q y Λ se toman diagonales en el espacio de réplicas

$$Q^{atbt'} = q_{\rm d}(t-t')\delta^{ab} , \qquad \Lambda^{atbt'} = \lambda_{\rm d}(t-t')\delta^{ab} . \qquad (7.25)$$

Usando las ecuaciones (7.16), (7.17) y (7.18) la energía libre promediada sobre el desorden por espín puede ser expresada como

$$\beta \overline{f} = \frac{\beta^2 J^2}{4N_{\tau}^2} (p-1) \sum_{t \neq t'}^{N_{\tau}-1} q_{\rm d}^p(t-t') + \sum_{t \neq t'}^{N_{\tau}-1} \mathcal{C}_{(t-t')} - \frac{\beta^2 J^2}{4N_{\tau}} - \ln \operatorname{Tr}_{\{s^t\}} \left(e^{H_{\rm eff}^{\rm PM}} \right) , \qquad (7.26)$$

 con

$$H_{\text{eff}}^{\text{PM}} = \frac{1}{N_{\tau}^2} \sum_{t \neq t'}^{N_{\tau} - 1} \lambda_{\text{d}}(t - t') s^t s^{t'} + \sum_{t=0}^{N_{\tau} - 1} (A + B s^t s^{(t+1)}) .$$
(7.27)

Los parámetros de orden $q_{\rm d}(t-t')$ y $\lambda_{\rm d}(t-t')$ satisfacen la condición de extremo cuando

$$q_{\rm d}(t-t') = \frac{{\rm Tr}_{\{s^t\}} \left(s^t s^{t'} e^{H_{\rm eff}^{\rm PM}}\right)}{{\rm Tr}_{\{s^t\}} \left(e^{H_{\rm eff}^{\rm PM}}\right)}, \qquad (7.28)$$

$$\lambda_{\rm d}(t-t') = \frac{\beta^2 J^2 p}{4} q_d^{p-1}(t-t') + N_{\tau}^2 \mathcal{C}_{(t-t')} .$$
(7.29)

Sus valores se obtienen resolviendo de manera auto-consistente las ecuaciones (7.28) y (7.29) sumando sobre las $2^{N_{\tau}}$ configuraciones diferentes de espines, $s^t = \pm 1$.

Solución de vidrio de espín para el equilibrio

Para caracterizar la fase de vidrio de espín en el equilibrio proponemos un esquema de ruptura de simetría de réplicas de un paso (1s-RSB, sec. 2.4). Esta propuesta resulta exacta para el modelo *p*-espín clásico con $p \ge 3$ a temperaturas que sin ser extremadamente bajas son adecuadas para observar la transición de vidrio de espín [102]. Más tarde probaremos que nuestra propuesta sigue siendo válida para estudiar las transiciones de fase inducidas por las fluctuaciones cuánticas.

Las matrices Q y Λ se parametrizan como

$$Q^{atbt'} = (q_{\rm d}(t-t') - q_{\rm EA})\delta^{ab} + q_{\rm EA}\epsilon^{ab} , \qquad (7.30)$$

$$\Lambda^{atbt'} = (\lambda_{\rm d}(t-t') - \lambda_{\rm EA})\delta^{ab} + \lambda_{\rm EA}\epsilon^{ab} .$$
(7.31)

donde ϵ^{ab} es una matriz diagonal por bloques en el espacio de réplicas.

Usando nuevamente las ecuaciones (7.16), (7.17) y (7.18), se llega a la energía libre promediada sobre el desorden

$$\beta \overline{f} = \frac{\beta^2 J^2}{4N_\tau^2} (p-1) \sum_{t \neq t'}^{N_\tau - 1} q_d^p (t-t') + (m-1) \frac{\beta^2 J^2}{4} (p-1) q_{\text{EA}}^p + \sum_{t \neq t'}^{n_\tau - 1} \mathcal{C}_{(t-t')} - \frac{\beta^2 J^2}{4N_\tau} - \frac{1}{m} \ln \int d\mathcal{X} (\mathcal{S})^m , \qquad (7.32)$$

donde la medida de integración es $d\mathcal{X} \equiv (\sqrt{2\pi})^{-1} e^{-x^2/2} dx$. Aquí, y en lo siguiente las integrales sobre x van de $-\infty$ a ∞ . Definimos

$$S \equiv \operatorname{Tr}_{\{s^{t}\}} \left(e^{H_{\text{eff}}^{\text{eqSG}}} \right),$$

$$H_{\text{eff}}^{\text{eqSG}} \equiv \frac{1}{N_{\tau}^{2}} \sum_{t \neq t'}^{N_{\tau} - 1} (\lambda_{d}(t - t') - \lambda_{\text{EA}}) s^{t} s^{t'} - \frac{\lambda_{\text{EA}}}{N_{\tau}} + \frac{\sqrt{2\lambda_{\text{EA}}}}{N_{\tau}} x \sum_{t=0}^{N_{\tau} - 1} s^{t}$$

$$+ \sum_{t=0}^{N_{\tau} - 1} \left(A + B s^{t} s^{(t+1)} \right).$$

$$(7.33)$$

Los parámetros de orden $q_d(t - t')$, q_{EA} , $\lambda_d(t - t')$ y λ_{EA} que satisfacen la condición de extremo son las soluciones obtenidas de manera auto-consistente a las siguientes ecuaciones:

$$q_{\rm d}(t-t') = \left\langle \mathcal{S}^{-1} \operatorname{Tr}_{\{s^t\}} \left(s^t s^{t'} e^{H_{\rm eff}^{\rm eqSG}} \right) \right\rangle_{\rm eff} , \qquad (7.35)$$

$$q_{\text{EA}} = \left\langle \mathcal{S}^{-2} \left(\text{Tr}_{\{s^t\}} \left(N_{\tau}^{-1} \sum_{t=0}^{N_{\tau}} s^t e^{H_{\text{eff}}^{\text{eqSG}}} \right) \right)^2 \right\rangle_{\text{eff}} , \qquad (7.36)$$

$$\lambda_d(t-t') = \frac{\beta^2 J^2 p}{4} q_d^{p-1}(t-t') + N_\tau^2 \mathcal{C}_{(t-t')} , \qquad (7.37)$$

$$\lambda_{\rm EA} = \frac{\beta^2 J^2 p}{4} q_{\rm EA}^{p-1} , \qquad (7.38)$$

donde

$$\langle \cdots \rangle_{\text{eff}} \equiv \frac{\int d\mathcal{X} \, \mathcal{S}^m \cdots}{\int d\mathcal{X} \, \mathcal{S}^m}.$$
 (7.39)

En la sección 6.5 vimos que la determinación del parámetro m (el tamaño del bloque diagonal) con la condición de equilibrio usual o con la condición de estabilidad marginal conduce a resultados físicos diferentes. La primera es una condición de extremo y corresponde a tomar el valor de m para el cual la energía libre promediada sobre el desorden es estacionaria. Así se llega a

$$m = I^{-1} \left(m^2 \frac{\beta^2 J^2 p}{4} (p-1) q_{\rm EA}^p + \ln \int d\mathcal{X} (\mathcal{S})^m \right), \qquad (7.40)$$

donde $I \equiv \langle \ln S \rangle_{\text{eff}}$. Con esta elección se describen las propiedades del modelo en el equilibrio.

Si bien se ha demostrado que las soluciones de vidrio de espín 1s-RSB resultan exactas para los modelos con espines esféricos [25], no esperamos que esta solución sea estable en todo el diagrama de fases del modelo con espines de Ising. La estabilidad de la solución 1s-RSB puede ser confirmada extendiendo al modelo cuántico el análisis implementado por de Almeida y Thouless [103] para el caso clásico. Cuando el menor autovalor de la matriz de estabilidad (conocido como replicón) se anula, la solución 1s-RSB es marginalmente estable. Cuando el replicón es negativo, la solución propuesta es inestable. Evaluando al replicón para los valores de los parámetros de orden y de m obtenidos bajo la condición de extremo encontramos que la solución 1s-RSB es inestable en toda la fase de vidrio de espín cuando p = 2 (en el modelo SK) indicando que es necesario continuar rompiendo la simetría de réplicas.

Sin embargo, en el modelo clásico con p = 3, Gardner [102] halló que la solución 1s-RSB se vuelve inestable por debajo de una temperatura T_g que cumple $T_g < T_{\rm SG}^{\rm cl}$, con $T_{\rm SG}^{\rm cl}$ la temperatura para la transición de vidrio de espín. T_g depende del parámetro p, y como es de esperar, tiende a $T_{\rm SG}^{\rm cl}$ cuando $p \to 2^+$ y se anula cuando $p \to \infty$. Esperamos encontrar una línea de Gardner de inestabilidades también en el caso con fluctuaciones cuánticas. Como veremos más adelante, la región donde la solución 1s-RSB es inestable es pequeña. Fuera de esta región la solución 1s-RSB es exacta (en particular sobre la frontera de fases) y puede ser utilizada para estudiar las propiedades del modelo de pespín cuántico con $p \ge 3$. En otro caso, o para p = 2, consideraremos a esta solución como una aproximación adecuada a la solución correcta.

Solución de vidrio de espín marginalmente estable

La condición de estabilidad marginal conduce a una ecuación diferente para m. Para satisfacer esta condición se requiere que el punto de ensilladura sea marginalmente estable, es decir que la matriz de fluctuaciones cuadráticas se anule en el autovalor del replicón. Por medio de una comparación con la dinámica en tiempo real [27], se pudo confirmar que esta prescripción conduce a la transición de congelamiento del modelo de p-espín cuántico esférico con $p \ge 3$ acoplado a un baño de osciladores armónicos. Aquí la usamos como un indicador de dónde podría ubicarse la curva de transición dinámica para un sistema de espines s = 1/2.

Adaptando el cálculo de de Almeida y Thouless [103] al problema cuántico en estudio (Apéndice B.1), encontramos que el replicón viene dado por

$$\lambda_R = P - 2Q + R, \qquad (7.41)$$

con

$$P = 1 - kq_{\text{EA}}^{p-2}t ,$$

$$Q = -kq_{\text{EA}}^{p-2}u ,$$

$$R = -kq_{\text{EA}}^{p-2}r .$$
(7.42)

Los factores $r, u \ge t$ son

$$r = \langle s^a s^b s^c s^d \rangle = \left\langle \mathcal{S}^{-4} \left(\operatorname{Tr}_{\{s^t\}} \left(N_\tau^{-1} \sum_{t=0}^{N_\tau - 1} s^t e^{H_{\text{eff}}^{\text{dSG}}} \right) \right)^4 \right\rangle_{\text{eff}} , \qquad (7.43)$$

$$u = \frac{1}{N_{\tau}^2} \sum_{t\mu=0}^{N_{\tau}-1} \langle s^{at} s^b s^{a\mu} s^d \rangle$$
(7.44)

$$= \left\langle \mathcal{S}^{-3} \left(\operatorname{Tr}_{\{s^t\}} \left(N_{\tau}^{-1} \sum_{t=0}^{N_{\tau}-1} s^t e^{H_{\text{eff}}^{\text{dSG}}} \right) \right)^2 \left(\operatorname{Tr}_{\{s^t\}} \left(N_{\tau}^{-2} \sum_{tt'=0}^{N_{\tau}-1} s^t s^{t'} e^{H_{\text{eff}}^{\text{dSG}}} \right) \right) \right\rangle_{\text{eff}} (7.45)$$

$$t = \frac{1}{N_{\tau}^{4}} \sum_{tt'\mu\mu'=0}^{N_{\tau}-1} \langle s^{at} s^{bt'} s^{a\mu} s^{b\mu'} \rangle = \left\langle \mathcal{S}^{-2} \left(\operatorname{Tr}_{\{s^{t}\}} \left(N_{\tau}^{-2} \sum_{tt'=0}^{N_{\tau}-1} s^{t} s^{t'} e^{H_{\text{eff}}^{\text{dSG}}} \right) \right)^{2} \right\rangle_{\text{eff}} .$$
(7.46)

Definimos

$$k \equiv \frac{\beta^2 J^2}{2} p(p-1) , \qquad (7.47)$$

y tomamos un nuevo nombre, $H_{\text{eff}}^{\text{dSG}}$, para el Hamiltoniano de la ec. (7.34) que resalta su importancia en la determinación de la línea crítica dinámica. La solución de vidrio de espín marginalmente estable se obtiene resolviendo de manera auto-consistente las ecuaciones (7.35)–(7.38), junto con la ecuación (7.41) igualada a cero.

7.4. Resultados

En esta sección describimos los resultados obtenidos luego de resolver las ecuaciones que hemos derivado en las secciones previas y discutimos como el acoplamiento con un baño Óhmico representado por osciladores armónicos modifica el comportamiento del modelo de espines desordenados.

7.4.1. Método numérico

La energía libre y las magnitudes físicas que se derivan de ella dependen del parámetro N_{τ} que en la práctica toma un conjunto finito de valores. Distintas estrategias se han propuesto para evaluar el límite $N_{\tau} \to \infty$. Usadel y Schmitz [104] notaron que se tiene una buena aproximación a la solución asintótica si N_{τ} es tal que $\beta\Gamma/N_{\tau} \ll 1$. Sin embargo, para temperaturas bajas este criterio no se satisface ya que N_{τ} debe incrementarse haciendo impracticable el cómputo de las $2^{N_{\tau}}$ configuraciones distintas de espines. Como alternativa, estos autores proponen emplear métodos de Monte Carlo para estimar la suma sobre todas las configuraciones de espines cunado N_{τ} es grande [104, 105].

En este trabajo adoptamos otro método que ha sido usado previamente para estudiar el modelo SK cuántico aislado [101] y para el modelo *p*-espín con s = 1/2 en un campo transverso [57]. Las cantidades físicas se calculan por una suma directa de espines (en inglés direct spin summation, abreviado por DSS) para valores de N_{τ} en el rango entre 8 y 13. Los resultados son ajustados con un polinomio en potencias de $1/N_{\tau}$ que permite la extrapolación a $N_{\tau} \to \infty$. En casi todos los casos se verifica una ley de la forma $(1/N_{\tau})^2$ [58].

Como ejemplo, consideremos la densidad de energía libre de las diferentes fases del modelo con p = 3 y $\alpha = 1$ que se muestran en la figura 7.1. Las cuatro curvas corresponden a tres valores de N_{τ} , $N_{\tau} = 8, 9, 10$, y al resultado de extrapolar para $N_{\tau} \to \infty$.

En la figura 7.2 mostramos la dependencia de la energía libre con N_{τ} para un valor del campo transverso para el cual las soluciones paramagnéticas y de vidrio de espín coinciden (es decir en un punto de la curva de transición de fase). Los círculos representan los datos para $N_{\tau} = 8, 9, 10, 11, 12$ y 13. Las líneas de trazos y continuas son los ajustes por medio de leyes $1/N_{\tau}$ y $(1/N_{\tau})^2$, respectivamente. La diferencia en el valor asintótico obtenido con cada uno de los procesos de extrapolación es del 10%. Los últimos tres puntos representados con estrellas son el resultado de aplicar la técnica de DSS para $N_{\tau} = 14, 15, 16$. Se puede apreciar que estos puntos adicionales siguen la curva de $(1/N_{\tau})^2$ obtenida previamente con valores menores de N_{τ} . Este resultado alienta el uso de la ley $(1/N_{\tau})^2$ en la extrapolación de otras cantidades.



Figura 7.1: Densidad de energía libre promedio, \overline{f} , del modelo de Ising cuántico con s = 1/2, p = 3 a una temperatura T = 0,3 como función del campo magnético transverso Γ . El acoplamiento con el baño es $\alpha = 1,0$. Se representan las tres fases del modelo: una solución paramagnética usual (PM1), una solución paramagnética sin sentido físico que desechamos (PM2), y la solución de vidrio de espín (SG). Los valores de \overline{f} obtenidos para N_{τ} finitos se grafican con líneas finas [$N_{\tau} = 8$ (inferior), $N_{\tau} = 9$ (central) y $N_{\tau} = 10$ (superior)]. El resultado de la extrapolación para $N_{\tau} \to \infty$ se grafica con trazos gruesos.



Figura 7.2: Densidad de energía libre promedio crítica, \overline{f} , a la temperatura inversa $\beta = 3,3$, como función de la inversa del número de subintervalos en el tiempo imaginario, $1/N_{\tau}$. El acoplamiento con el baño es $\alpha = 1,0$. La línea de trazos y la línea continua son el resultado de ajustes lineales, $1/N_{\tau}$, y cuadráticos $(1/N_{\tau})^2$, respectivamente. Los círculos se obtienen con la técnica de DSS para $N_{\tau} = 8,9,10,11,12,13$, las estrellas corresponden a $N_{\tau} = 14,15,16$.

Este mismo método también puede utilizarse para determinar la parte diagonal del parámetro de orden, $q_d(\tau)$. Dado que este último sólo se conoce en una grilla de puntos del tiempo imaginario $\tau = 0, \beta \hbar / N_{\tau}, 2\beta \hbar / N_{\tau}, \cdots, \beta \hbar$, que a su vez dependen de N_{τ} , fue necesario interpolar previamente los datos para cada valor de N_{τ} con *splines* para luego pasar esta información al algoritmo de extrapolación descripto en el párrafo anterior.

El método se ilustra en el panel superior de la figura 7.3 donde mostramos la parte diagonal del parámetro de orden $q_d(\tau)$ como función de τ para una temperatura y campo magnético constantes con p = 3. Los datos para seis valores de N_{τ} , $N_{\tau} = 8, 9, 10, 11, 12, 13$, se representan con símbolos y los trazos que los unen representan la interpolación por splines. La curva menor resulta de extrapolar para $N_{\tau} \to \infty$.

El método de Goldschmitz y Lai [101] recién descripto es eficiente y simple de implementar, pero debemos tener presente que cuando se reduce la temperatura el proceso de extrapolación para $N_{\tau} \to \infty$ es menos confiable.

7.4.2. Diagrama de fases

A continuación mostramos los efectos del acoplamiento con el ambiente sobre el diagrama de fases de los modelos de espines cuánticos s = 1/2 con p = 2 (modelo SK) y con $p \ge 3$. Las propiedades en la fase de vidrio de espín se obtienen mediante una solución 1s-RSB (sec. 7.3.1). Posteriormente discutiremos sobre los límites de validez de dicha solución.

Al igual que en otros modelos de espines cuánticos desordenados, dos soluciones paramagnéticas coexisten [25, 26, 57]. Por ejemplo, en la figura 7.1 observamos la existencia de una segunda solución paramagnética llamada PM2. Sin embargo esta se desecha porque su entropía se vuelve negativa para valores suficientemente bajos de temperatura. Por este motivo, esta segunda solución no será tomada en cuenta para los estudios siguientes.

La curva crítica (T_c, Γ_c) que separa la fase paramagnética de la de vidrio de espín se determina por los valores de los pares (T, Γ) para los cuales la densidad de energía libre de las solución paramagnética y de vidrio de espín coinciden. En los paneles superior e inferior de la figura 7.4 mostramos las curvas críticas en el plano (T, Γ) que separan una fase PM de alta T, alto Γ de una de SG de baja T, bajo Γ para los modelos SK y p-espín con p = 3, respectivamente. Las tres curvas en cada figura corresponden a $(\alpha = 0)$ y dos acoplamientos no nulos $(\alpha = 0,5,1,0)$ de abajo hacia arriba. Para ambos modelos, la temperatura de la transición clásica, $T_{\rm SG}^{\rm cl}$, correspondiente a $\Gamma \to 0$, permanece sin cambios a pesar del acoplamiento con el baño térmico. Este valor es $T_{\rm SG}^{\rm cl} = 1 = J$ cuando p = 2 [48], y concuerda con el dado por Gross y Mézard, $T_{\rm SG}^{\rm cl} = 0,67$, para el problema



Figura 7.3: Panel superior: Componente diagonal del parámetro de orden en el tiempo imaginario para el modelo p = 3 como función de $\tau/(\beta\hbar) = t/N_{\tau}$ con t el tiempo de Trotter, $t = 0, 1, \dots, N_{\tau}$. La temperatura se fijó en T = 0,3, y el campo transverso en $\Gamma = 0,8$. El acoplamiento con el baño es $\alpha = 1.$ Las soluciones para $N_{\tau} = 8,9,10,11,12,13$ se muestran de arriba hacia abajo, (con puntos los datos numéricos, y las curvas que los unen corresponden a ajustes con *splines*) y la curva menor es el resultado de extrapolar $N_{\tau} \to \infty$. Panel inferior: Curva obtenida para lím $_{N_{\tau}\to\infty} q_{\rm d}^{N_{\tau}}(\tau)$ para tres acoplamientos con el ambiente: $\alpha = 0$ (abajo) $\alpha = 0,5$ (centro) y $\alpha = 1$ (arriba). El resto de los parámetros se toman iguales a los del panel superior.



Figura 7.4: Panel superior: Diagrama de fases para el modelo SK. Las curvas para $\alpha = 0, 0, 5, 1, 0$ (de abajo para arriba) se obtienen luego de extrapolar los resultados con N_{τ} finito hallados mediante la técnica de DSS. Panel inferior: Diagrama de fases del modelo *p*-espín con p = 3 obtenido con el mismo método numérico. La línea continua (de trazos) indica una transición de fase de segundo (primer) orden. Las curvas críticas continúan más allá del menor valor de temperatura con datos confiables, $T \approx 0,25$, que resultan de aplicar la técnica de DSS. Se espera que estas curvas terminen en un punto crítico cuántico a T = 0.

clásico con p = 3 [106]. Notamos que este fenómeno también fue observado en la sección 6.5 con el modelo de espines cuánticos esféricos.

Para los tres valores de α el campo crítico transverso, $\Gamma_c(T_c)$, es una función decreciente de T, que es consistente con el hecho de que las fluctuaciones cuánticas tienden a destruir la fase ordenada de vidrio. También vemos en la figura 7.4 que el acoplamiento con el baño térmico favorece la formación de una fase de vidrio; el acoplamiento con el ambiente efectivamente reduce la intensidad de las fluctuaciones cuánticas que tienden a destruir la fase ordenada. La extensión de la fase de vidrio de espín es mayor cuanto más fuerte es el acoplamiento con el baño térmico para todo valor de temperatura que satisface $T < T_{\rm SG}^{\rm cl}$. Más aún, este efecto es más importante para temperaturas bajas. Este conjunto de observaciones también fueron expuestas en la sección 6.5.

Cuando p = 2, la transición es siempre continua y de segundo orden termodinámico. En cambio, para p = 3, cuando la temperatura se disminuye por debajo de T^* ocurre un interesante pasaje de transiciones termodinámicas de segundo orden a transiciones de primer orden (al igual que en el modelo esférico (sec. 6.5) y para espines s = 1/2aislados [26, 57]). Estas afirmaciones se prueban en las figuras 7.5 y 7.6, donde se muestra el comportamiento de la densidad de energía libre, la entropía y la susceptibilidad para el modelo *p*-espín con p = 3 como función del campo transverso para $T > T^*$ y $T < T^*$.

Para temperaturas suficientemente altas, $T \ge T^*$, se encuentra una solución de vidrio de espín que al crecer el campo transverso incrementa al parámetro m alcanzando el valor m = 1 en Γ_c . Este Γ_c es el mismo que surge del diagrama de fases. Si bien los parámetros de orden $q_d(\tau)$ y q_{EA} no se anulan en este punto, la transición de fase termodinámica es continua, de segundo orden de acuerdo a la clasificación de Erhenfest. En la figura 7.5 vemos que las curvas de entropía y susceptibilidad son continuas en todo punto, y la transición de fase se manifiesta con un pico de la susceptibilidad.

La situación es diferente para temperaturas bajas. En la figura 7.6 mostramos, la densidad de energía libre, la entropía y la susceptibilidad del modelo *p*-espín con p = 3 para $T = 0.3 < T^*$. En este caso, en el punto donde ocurre la transición de fase m < 1 y conduce a una discontinuidad en la entropía y la susceptibilidad. La transición de fase termodinámica es entonces discontinua o de primer orden.

En la figura 7.7 mostramos la dependencia de $q_{\rm EA}$ y m con la temperatura crítica T_c para tres valores diferentes de acoplamiento con el baño térmico. Como se mencionó anteriormente, observamos que $q_{\rm EA}$ es diferente de cero para toda temperatura, y m = 1 si $T_c \geq T^*$ pero m < 1 si $T_c < T^*$. Esta figura también muestra que T^* decrece con el acoplamiento con el baño.



Figura 7.5: Densidad de energía libre, \overline{f} , entropía, \overline{s} , y susceptibilidad, χ , como función del campo transverso Γ para el modelo *p*-espín con p = 3 a $T = 0,5 > T^*$ para tres valores de acoplamiento con el baño térmico diferentes, $\alpha = 0, 0, 5, 1$. La línea continua (de trazos) corresponde a la solución paramagnética (de vidrio de espín). La entropía y la susceptibilidad son continuas en la transición señalando una transición de fase termodinámica de segundo orden.



Figura 7.6: Densidad de energía libre, \overline{f} , entropía, \overline{s} , y susceptibilidad, χ , como función del campo transverso Γ para el modelo *p*-espín con p = 3 a $T = 0,3 < T^*$ para tres valores de acoplamiento con el baño térmico diferentes, $\alpha = 0, 0, 5, 1$. La línea continua (de trazos) corresponde a la solución paramagnética (de vidrio de espín). La entropía y la susceptibilidad son discontinuas en la transición señalando una transición de fase termodinámica de primer orden.



Figura 7.7: Dependencia de m y $q_{\rm EA}$ con la temperatura crítica $T_c(\Gamma, \alpha)$ para el modelo con p = 3. Consideramos tres valores de α , $\alpha = 0, 0, 5, 1$. Para valores crecientes de α , el intervalo en el cual m = 1 se extiende, y por lo tanto se reduce la región donde ocurren transiciones de fase termodinámicas de primer orden.

7.4.3. Estabilidad de la solución 1s-RSB

Para estudiar la estabilidad de la solución 1s-RSB evaluamos al replicón λ_R en los valores de los parámetros de orden y de *m* obtenidos bajo la condición de extremo, y buscamos los puntos del espacio de fases (T, Γ) para los que $\lambda_R = 0$. En el límite clásico, esto conduce a la temperatura crítica hallada por Gardner [102], $T_g(\Gamma = 0) \approx 0.25$. Dado que esperamos encontrar que la temperatura para la cual se produce la inestabilidad $(\lambda_R = 0)$ decrece con Γ , necesitamos emplear nuestro algoritmo numérico para T < 0.25. Si bien esto en principio parece difícil, hemos obtenido resultados confiables tomando $N_{\tau} \leq 13$ ya que los pequeños valores de campo transverso Γ compensan a los grandes valores de β en la condición $\beta \Gamma/N_{\tau} < 1$.

Primero analizamos el caso p = 2 que corresponde al modelo SK en presencia de un campo transverso. Encontramos que la solución 1s-RSB es inestable en toda la fase de vidrio de espín, apoyando la idea de que la solución de equilibrio de este modelo requiere una ruptura completa de la simetría de réplicas.

En la figura 7.8 comparamos la curva crítica (T_c, Γ_c) tal como fue hallada con la condición de extremo aplicada a la solución 1s-RSB y la curva de inestabilidades de Gardner para el modelo *p*-espín con p = 3. Vemos que la región donde la solución 1s-RSB no es estable es relativamente pequeña. Si bien por las limitaciones inherentes a la



Figura 7.8: Comparación entre la curva crítica (T_c, Γ_c) y la curva de inestabilidades de Gardner (T_g, Γ_g) para el modelo *p*-espín con p = 3 y $\alpha = 0$.

técnica DSS no podemos continuar la línea de Gardner para temperaturas menores a 0.1, el gráfico sugiere que en el límite de temperatura nula el campo crítico transverso, Γ_c , y el campo crítico de Gardner, Γ_g , no coincidirían. Resultados análogos también se obtienen con $\alpha \neq 0$.

7.4.4. Transición dinámica

Como se explicó en la sección 7.3.1, el valor de m hallado con la condición de que se anule el autovalor del replicón conduce a un conjunto de ecuaciones diferentes que contienen alguna información sobre la relajación del sistema fuera del equilibrio. Usando esta prescripción obtenemos para $p \ge 3$ diferentes curvas críticas que se ubican por encima de las obtenidas con la condición usual de equilibrio. Este resultado es similar a los hallados en una serie de artículos sobre el problema clásico [50] y cuántico [25, 57].

En la figura 7.9 comparamos la transición de equilibrio y la dinámica para el modelo de p-espín cuántico con p = 10. Elegimos un valor más grande de p para una mejor visualización de las diferencias entre ambos tipos de soluciones. La región de vidrio de espín de equilibrio es más pequeña que la determinada con la condición de estabilidad marginal. Cuando nos aproximamos a la fase de vidrio de espín desde cualquier dirección del espacio de fases, la transición dinámica, asociada con la solución AMS, se presenta antes que la transición para el equilibrio. Al igual que en el equilibrio, la curva determinada con el criterio de AMS está formada por dos tramos. El tramo indicado con una línea



Figura 7.9: Comparación entre las curvas críticas obtenidas bajo la condición de equilibrio y bajo la condición de estabilidad marginal (AMS) para el modelo *p*-espín con p = 10. Las líneas continuas representan transiciones termodinámicas de segundo orden y las líneas de trazos de primer orden. El conjunto de curvas con $T_{\rm SG}^{\rm cl} \approx 0.6$ (trazo fino) se obtuvo con la condición de equilibrio para $\alpha = 0$ (curva menor) y $\alpha = 1$ (curva mayor); el conjunto de curvas con $T_{\rm SG}^{\rm cl} \approx 0.82$ (trazo grueso) corresponde a la transición dinámica para $\alpha = 0$ (curva menor) y $\alpha = 1$ (curva mayor);

continua representa las transiciones de segundo orden, el que se dibuja a trazos representa las transiciones de primer orden. La naturaleza de la transición dinámica de primer orden se manifiesta como un salto en el valor promedio asintótico de la energía interna. El punto tricrítico dinámico ocurre a una temperatura mayor que en el equilibrio, $T_d^* > T^*$.

El ruido también tiene un efecto fuerte sobre la curva de transición dinámica. Cuanto más fuerte es el acoplamiento con el ambiente, más amplia es la región que ocupa la fase de vidrio de espín en el diagrama de fases. Esto también se muestra en la figura 7.9 donde se representan un par de curvas correspondientes a los valores de acoplamiento $\alpha = 0$ y 1,0.

7.5. Conclusión

En este Capítulo estudiamos los efectos de un baño cuántico Óhmico sobre las propiedades del equilibrio y algunos aspectos de la dinámica de modelos de espines cuánticos s = 1/2desordenados. Encontramos que el acoplamiento con el ambiente favorece la aparición de una fase de vidrio de espín reduciendo la intensidad de las fluctuaciones cuánticas que tienden a desestabilizarla. Al igual que en el modelo esférico, para p = 2 la transición es siempre de segundo orden [28]. Para $p \geq 3$ existe una temperatura tricrítica T^* por debajo de la cual las fluctuaciones cuánticas conducen a una transición termodinámica de primer orden. Observamos que el aumento del acoplamiento con el baño no sólo amplia la región de vidrio de espín en el plano (T, Γ) , sino que también desplaza la temperatura T^* hacia valores más bajos.

La aplicación de la condición de estabilidad marginal señala que la transición dinámica precede a la transición de equilibrio. El estudio del autovalor del replicón para la solución 1s-RSB demuestra que esta solución es estable en un entorno de la curva crítica si T > 0,1. El comportamiento observado para T > 0,1 permite suponer que esta solución también es estable en el punto crítico cuántico.

Capítulo 8 Conclusión

En este trabajo estudiamos los efectos combinados de la disipación, el desorden y las fluctuaciones cuánticas en sistemas de espines que pueden ser utilizados como modelos de vidrios de espín. Para ello analizamos tanto sistemas de dimensión finita como modelos de campo medios acoplados a osciladores armónicos cuánticos que representan los efectos del baño térmico.

Para el caso de dimensión finita, consideramos una anillo de espines s = 1/2 con interacciones a primeros vecinos tanto constantes como con una distribución de probabilidad uniforme en el intervalo [0, 1]. Estudiamos las propiedades de estos sistemas en presencia de un campo transverso y acoplados a un baño térmico Óhmico para temperatura nula por medio de simulaciones de Monte Carlo efectuadas sobre un modelo clásico equivalente en (1 + 1)-dimensiones. En cadenas de tamaño finito obtuvimos una curva crítica que define una región del espacio de parámetros donde el sistema se localiza por efecto del acoplamiento con el baño térmico. En el límite termodinámico, mostramos que el sistema posee una fase ferromagnética o de vidrio de espín según si las interacciones a primeros vecinos son constantes o aleatorias, respectivamente. El efecto del baño térmico se traduce en una ampliación de las fases ordenadas para valores crecientes de la constante de acoplamiento. Dentro de la fase paramagnética del modelo desordenado encontramos evidencias de la existencia de singularidades de Griffiths-McCoy.

Consideramos dos modelos de campo medio. En primer término estudiamos el modelo *p*-espín esférico desordenado en presencia de un campo transverso y acoplado a distintos tipos de baños térmicos. Las soluciones de este problema halladas con el formalismo de tiempo imaginario y el método de las réplicas enseñan que la fase de vidrio de espín se ve favorecida por los acoplamientos más fuertes con cualquier tipo de baño térmico. Al igual que en el modelo aislado, la fase de vidrio de espín se extiende hasta temperatura nula, y para $p \ge 3$ se presenta un punto tricrítico donde las transiciones de fase pasan de segundo a primer orden. Los diagramas de fase que obtuvimos aplicando la condición de equilibrio usual como la condición de estabilidad marginal (AMS) son cualitativamente iguales. Observamos que, al igual que en los modelos clásicos, la transición dinámica ocurre antes que la estática al ir disminuyendo la temperatura. Un fenómeno análogo se observa cuando se reduce el campo transverso.

En segundo término estudiamos el modelo p-espín desordenado con espines s = 1/2 en presencia de un campo transverso y acoplado a un baño térmico Óhmico. Las soluciones de este problema las construimos en base al comportamiento de un número finito de espines para los que calculamos la función de partición haciendo la suma sobre todas las posibles configuraciones. El comportamiento en el límite termodinámico lo obtenemos luego de extrapolar los comportamientos para cantidades finitas de espines. Al igual que en el modelo con espines esféricos y $p \ge 3$, el acoplamiento con el baño favorece a la fase de vidrio de espín, y también se presenta un punto tricrítico. Además, la transición dinámica siempre precede a la de equilibrio si se viene de una fase de alta T y alto Γ .

En general vemos que los sistemas de espines cuánticos acoplados al ambiente tienen una fase ordenada que crece con el acoplamiento con el ambiente y que las fluctuaciones cuánticas, si bien deprimen la temperatura para la cual ocurre la transición de fase, no la eliminan completamente. El origen físico de estos fenómenos se explica simplemente: los efectos combinados de las interacciones entre espines y la disipación se contraponen a los efectos de un campo transverso, tendiendo a suprimir las fluctuaciones cuánticas. Cuando ambos efectos se presentan simultáneamente se refuerzan mutuamente.

Esperamos que los resultados de estas investigaciones puedan colaborar en el estudio de diversos problemas. En el contexto de los vidrios de espín, nuestros resultados son un primer paso hacia la caracterización de los efectos del ambiente. En estos momentos nos encontramos interesados en el análisis de modelos más realistas que puedan ser comparados con resultados experimentales.

Recientemente se ha comenzado a trabajar con cadenas de qbits en el contexto de la computación cuántica donde los qbits están representados por espines. La búsqueda de una respuesta a las preguntas de cómo controlar los efectos de decoherencia que se producen por el acoplamiento con el ambiente y cuál es el efecto de la presencia de impurezas en estas cadenas es de mucho interés. En particular, nuestros algoritmos pueden ser de utilidad para evaluar los observables que se proponen en el estudio del entrelazamiento de los qbits, y para analizar cómo son afectados por el acoplamiento con el baño térmico.

Agradecimientos

La elaboración de esta tesis ha sido favorecida por una intensa colaboración científica con Leticia Cugliandolo, Daniel Grempel, Gustavo Lozano y Constantino da Silva Santos.

Quiero agradecer especialmente a Leticia Cugliandolo y Gustavo Lozano por su constante incentivo en la preparación de esta tesis y principalmente por haberme guiado en el aprendizaje de la física de la materia condensada. Deseo agradecer a Marcelo Rozenberg y Daniel Grempel con quienes mantuve valiosas discusiones. También a Guillermo Dussel agradezco su apoyo.

Agradezco al Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires por prestarme los recursos informáticos imprescindibles para la realización de este trabajo. A la Universidad de Buenos Aires, que gracias a su programa de becas de doctorado, me permitió completar esta tesis. Agradezco el apoyo económico recibido en parte por los proyectos UBA x204(1999-2003) y x053(2003-2007), PICT 03-11609 y ECOS-SECYT PA99E10.

Por último, nada de esto hubiera sido posible sin el apoyo de mi familia, mi esposa Mariela y mis padres Gerónimo y Juanita.

Apéndice A

A.1. Cálculo de la función de partición para el modelo *p*-espín esférico cuántico desordenado acoplado al ambiente

En este apéndice desarrollamos el cálculo de la energía libre para el modelo p-espín esférico cuántico acoplado a un baño de osciladores armónicos cuánticos. El Hamiltoniano del sistema total está definido por las ecuaciones (6.4)–(6.8),

$$\hat{H}(J) = \hat{H}_{S}(J) + \hat{H}_{B} + \hat{H}_{I},$$

$$\hat{H}_{S}(J) = -\sum_{i_{1} < \dots < i_{p}}^{N} J_{i_{1} \dots i_{p}} \hat{\sigma}_{i_{1}}^{z} \cdots \hat{\sigma}_{i_{p}}^{z} - \sum_{i=1}^{N} \hbar \Delta \hat{\sigma}_{i}^{x},$$

$$\hat{H}_{B} = \sum_{l=1}^{\tilde{N}} \frac{\hat{p}_{l}^{2}}{2m_{l}} + \frac{1}{2} m_{l} \omega_{l}^{2} \hat{x}_{l}^{2},$$

$$\hat{H}_{I} = -\sum_{l=1}^{\tilde{N}} \sum_{i=1}^{N} c_{il} \hat{x}_{l} \hat{\sigma}_{i}^{z},$$

e introducimos un multiplicador de Lagr
nage z para el vínculo esférico $\sum_i^N s_i^2 = N$. Para realizar el cálculo de la función de partición para una dada realización de desorden

$$Z(J) = \operatorname{Tr}\left(e^{-\beta \hat{H}(J)}\right)$$

practicamos una descomposición de Trotter-Suzuki análoga a la realizada en la sección 5.3. Así, se llega a una expresión similar a la ec. (5.13),

$$Z(J) = \operatorname{Tr}_{\{s_{i}^{t}\}} \exp\left(\frac{\beta}{N_{\tau}} \sum_{t=0}^{N_{\tau}-1} \sum_{i_{1} < \dots < i_{p}}^{N} J_{i_{1} \cdots i_{p}} s_{i_{1}}^{t} \cdots s_{i_{p}}^{t} - \frac{1}{4} \ln\left(\frac{N_{\tau}}{\beta \hbar \Delta}\right) \sum_{t=0}^{N_{\tau}-1} \sum_{i=1}^{N} \left(s_{i}^{t+1} - s_{i}^{t}\right)^{2} - \frac{1}{\beta \hbar^{2}} \int_{0}^{\beta \hbar} d\tau \int_{0}^{\beta \hbar} d\tau' \sum_{i=1}^{N} K(\tau - \tau') s_{i}(\tau) s_{i}(\tau') \right),$$
(A.1)

donde usamos la aproximación para $\beta \hbar \Delta / N_{\tau} \ll 1$

$$\left(\frac{\beta\hbar\Delta}{N_{\tau}}\right)^{\frac{1}{4}\left(s_{i}^{t+1}-s_{i}^{t}\right)^{2}} \approx \left\langle s_{1}^{t},\cdots,s_{N}^{t}\right|\exp\left(\frac{\beta}{N_{\tau}}\sum_{i=1}^{N}\Gamma\hat{\sigma}_{i}^{x}\right)\left|s_{1}^{t+1},\cdots,s_{N}^{t+1}\right\rangle$$
(A.2)

en lugar de la ecuación (5.17). El último término de la ec. (A.1) representa la influencia del baño. El núcleo K se define en el espacio de frecuencias por la ec. (4.42), e introduce los efectos del baño término como una interacción de largo alcance en el tiempo imaginario para el espín en el sitio *i*. Este tipo de interacciones no se presenta entre espines de distintos sitios debido a que cada espín está acoplado a un conjunto propio de \tilde{N}/N osciladores armónicos independientes, siendo la densidad espectral $J_{ij}(\omega) = \delta_{ij}J(\omega)$.

Si se relaja el vínculo rígido $s_i^t = \pm 1$ por el vínculo esférico, las variables de espín se vuelven continuas. Siendo consistentes con las aproximaciones anteriores, las escalas de tiempo satisfacen $\tau \gg \Delta \tau \equiv \beta \hbar / N_{\tau}$ y por lo tanto podemos pasar a una versión continua donde

$$Z(J)_{\rm cont} = \int \mathcal{D}s_i \exp\left(-\frac{S_{\rm cont}}{\hbar}\right) \,, \tag{A.3}$$

 con

$$-\frac{S_{\text{cont}}}{\hbar} \equiv -\frac{M}{2\hbar} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial s_{i}}{\partial \tau}\right)^{2} + \frac{1}{\hbar} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \sum_{i_{1} < \dots < i_{p}}^{N} J_{i_{1} \cdots i_{p}} s_{i_{1}}(\tau) \cdots s_{i_{p}}(\tau)$$
$$-\frac{1}{\beta\hbar^{2}} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau' \sum_{i=1}^{N} K(\tau - \tau') s_{i}(\tau) s_{i}(\tau') - \frac{1}{\hbar} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau z(\tau) \left(\sum_{i=1}^{N} s_{i}^{2}(\tau) - N\right),$$
(A.4)

у

$$M \equiv \frac{\hbar \Delta \tau}{2} \ln \left(\frac{1}{\Delta \tau \Delta} \right) \,. \tag{A.5}$$

La derivación del modelo continuo efectivo con la presencia del baño térmico es análoga a la propuesta en [25].

Para estudiar las propiedades del modelo calculamos la densidad de energía libre promediada sobre el desorden con ayuda del "truco de las réplicas"

$$\beta \overline{f} = -\frac{1}{N} [\ln Z] = -\frac{1}{N} \lim_{n \to 0} \frac{[Z^n] - 1}{n}, \qquad (A.6)$$

donde $[\cdots]$ denota el promedio sobre todas las realizaciones del potencial aleatorio. Para desacoplar las interacciones de p espines que aparecen en el término potencial introducimos en $[Z^n]$ la relación

$$1 \propto \int \mathcal{D}Q^{ab} \,\delta\left(NQ^{ab}(\tau,\tau') - \sum_{i=1}^{N} s_i^a(\tau)s_i^b(\tau')\right)$$
$$\propto \int \mathcal{D}Q^{ab} \,\mathcal{D}\Lambda^{ab} \,\exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum_{ab}^{n}\int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau' \Lambda^{ab}(\tau,\tau') \left(NQ^{ab}(\tau,\tau') - \sum_{i=1}^{N}s_{i}^{a}(\tau)s_{i}^{b}(\tau')\right)\right) \,.$$

La función de partición replicada promedio se puede expresar por

$$[Z^n] = \int \mathcal{D}s \mathcal{D}Q^{ab} \mathcal{D}\Lambda^{ab} \exp\left(-\frac{N}{\hbar}S_{\text{eff}}\right) , \qquad (A.7)$$

 con

$$-\frac{S_{\text{eff}}}{\hbar} = -\sum_{ab}^{n} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau' s^{a}(\tau) \frac{i}{\hbar} \left(O^{ab}(\tau - \tau') + \Lambda^{ab}(\tau, \tau') \right) s^{b}(\tau') + \frac{i}{\hbar} \sum_{ab}^{n} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau' \Lambda^{ab}(\tau, \tau') Q^{ab}(\tau, \tau') + \frac{1}{\hbar} \sum_{a=1}^{n} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau z^{a}(\tau) + \frac{J^{2}}{4\hbar^{2}} \sum_{ab}^{n} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau' \left(Q^{ab}(\tau, \tau') \right)^{\bullet p}, \quad (A.8)$$

donde

$$O^{ab}(\tau - \tau') = i\delta^{ab} \left(\delta(\tau - \tau') \left(\frac{M}{2}\frac{\partial^2}{\partial\tau^2} - z^a(\tau)\right) - \frac{1}{\beta\hbar}K(\tau - \tau')\right).$$
(A.9)

Denotamos con • el producto usual $(Q^{ab}(\tau, \tau'))^{\bullet p} = Q^{ab}(\tau, \tau') \cdots Q^{ab}(\tau, \tau'), p$ veces. Usando que la matriz del parámetro de orden es invariante frente a traslaciones en el tiempo imaginario,

$$Q^{ab}(\tau,\tau') = Q^{ab}(|\tau-\tau'|), \qquad (A.10)$$

$$\Lambda^{ab}(\tau,\tau') = \Lambda^{ab}(|\tau-\tau'|), \qquad (A.11)$$

la acción efectiva se simplifica y se escribe como

$$-\frac{S_{\text{eff}}}{\hbar} = -\sum_{ab}^{n} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau' s^{a}(\tau) \frac{i}{\hbar} \left(O^{ab}(\tau - \tau') + \Lambda^{ab}(\tau - \tau') \right) s^{b}(\tau') + i\beta \sum_{ab}^{n} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \Lambda^{ab}(\tau) Q^{ab}(\tau) + n\beta z + \frac{J^{2}\beta}{4\hbar} \sum_{ab}^{n} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \left(Q^{ab}(\tau) \right)^{\bullet p} , \qquad (A.12)$$

donde asumimos que $z^a(\tau)$ no depende del índice de réplicas ni del tiempo imaginario. Aprovechando la periodicidad del problema en el tiempo imaginario vamos a emplear las transformaciones de Fourier

$$s^{a}(\omega_{k}) = \frac{1}{\beta\hbar} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \, e^{i\omega_{k}\tau} s^{a}(\tau) ,$$

$$s^{a}(\tau) = \sum_{k} e^{-i\omega_{k}\tau} s^{a}(\omega_{k}) , \qquad (A.13)$$

con las frecuencias de Matsubara dadas por

$$\omega_k = \frac{2\pi k}{\beta\hbar} \qquad k = 0, \pm 1, \dots$$
 (A.14)

Esto implica que

$$Q^{ab}(\omega_k) = \frac{1}{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \, e^{i\omega_k\tau} \, Q^{ab}(\tau) \,, \qquad (A.15)$$

$$Q^{ab}(\tau) = \sum_{k} e^{-i\omega_k \tau} Q^{ab}(\omega_k) . \qquad (A.16)$$

En términos de las variables transformadas de Fourier la acción efectiva es

$$-\frac{S_{\text{eff}}}{\hbar} = -\sum_{k} \sum_{ab}^{n} s^{a}(-\omega_{k})i\beta^{2}\hbar \left(O^{ab}(\omega_{k}) + \Lambda^{ab}(\omega_{k})\right)s^{b}(\omega_{k}) + n\beta z$$
$$+i\beta^{2}\hbar \sum_{k} \sum_{ab}^{n} \Lambda^{ab}(\omega_{k})Q^{ab}(\omega_{k}) + \frac{J^{2}\beta}{4\hbar} \sum_{ab}^{n} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \left(\sum_{k} \exp(-i\omega_{k}\tau)Q^{ab}(\omega_{k})\right)^{p} (A.17)$$

donde usamos $Q^{ab}(\omega_k) = Q^{ab}(-\omega_k)$. La integral funcional sobre las funciones $s^a(\omega_k)$ es cuadrática y puede efectuarse explícitamente. Esto lleva a reemplazar el término cuadrático en la acción por

$$-\sum_{k} \operatorname{Tr} \ln \left(i\beta^2 \hbar \left(O^{ab}(\omega_k) + \Lambda^{ab}(\omega_k) \right) \right) , \qquad (A.18)$$

donde tomamos en consideración el factor $(\beta\hbar)^{-n/2}$ que proviene del cambio de variables $s^a(\tau) \to s^a(\omega_k)$ en la función de partición. La traza se toma sobre índices de réplicas.

Como la acción efectiva está multiplicada por N, en el límite termodinámico podemos evaluar la función de partición por el método semiclásico o de punto de ensilladura. El punto de ensilladura con respecto a $\Lambda^{ab}(\omega_k)$ es

$$Q^{ab}(\omega_k) = (i\beta^2\hbar)^{-1} \left(O^{ab}(\omega_k) + \Lambda^{ab}(\omega_k) \right)^{-1} .$$
(A.19)

Reemplazando este valor de $\Lambda^{ab}(\omega_k)$ en (A.17) obtenemos

$$-\frac{S_{\text{eff}}}{\hbar} = \sum_{k} \operatorname{Tr} \ln \left(Q^{ab}(\omega_{k}) \right) + \sum_{k} \left(n - i\beta^{2}\hbar \sum_{ab}^{n} O^{ab}(\omega_{k}) Q^{ab}(\omega_{k}) \right) + \frac{J^{2}\beta}{4\hbar} \sum_{ab}^{n} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \left(\sum_{k} \exp(-i\omega_{k}\tau) Q^{ab}(\omega_{k}) \right)^{p} + n\beta z .$$
(A.20)

Finalmente, la función de partición replicada y promediada sobre el desorden, como función de $Q^{ab}(\omega_k)$, es

$$[Z^n] = \exp\left(-nNG_0\right) \tag{A.21}$$

donde

$$G_{0} = -\frac{1}{n} \sum_{k} \operatorname{Tr} \ln \left(Q^{ab}(\omega_{k}) \right) - \sum_{k} \left(1 - \frac{i\beta^{2}\hbar}{n} \sum_{ab}^{n} O^{ab}(\omega_{k}) Q^{ab}(\omega_{k}) \right) - \frac{J^{2}\beta}{4\hbar n} \sum_{ab}^{n} \int_{0}^{\beta\hbar} d\tau \left(\sum_{k} \exp(-i\omega_{k}\tau) Q^{ab}(\omega_{k}) \right)^{p} - \beta z , \qquad (A.22)$$

y la energía libre por espín es

$$\beta \overline{f} = \lim_{n \to 0} G_0 . \tag{A.23}$$

El punto de ensilladura con respecto al parámetro de orden $Q^{ab}(\omega_k)$ es

$$\left(\frac{M}{2}\omega_k^2 + z + K(\omega_k)\right)\delta_{ab} = \left(\beta Q^{ab}(\omega_k)\right)^{-1} + \frac{J^2 p}{4\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \exp(i\omega_k\tau) \left(Q^{ab}(\tau)\right)^{\bullet p-1} .$$
(A.24)

La ecuación (A.24) junto con el vínculo esférico, $\sum_k Q^{aa}(\omega_k) = 1$ son las ecuaciones que caracterizan las distintas fases del modelo.

A.2. Cálculo del autovalor del replicón para el modelo *p*-espín esférico cuántico desordenado acoplado al ambiente

Para derivar el autovalor del replicón, primero calculamos las variaciones de G_0 a segundo orden con respecto a $Q^{ab}(\omega_k)$ que da las fluctuaciones Gaussianas de \mathbf{Q} ,

$$\delta^{2}G_{0} = \sum_{\omega_{k}} \operatorname{Tr} \left(\mathbf{Q}^{-1}(\omega_{k}) \cdot \delta \mathbf{Q}(\omega_{k}) \right)^{2} - \frac{1}{4} p(p-1) \sum_{ab}^{n} \sum_{\omega_{k}'} \sum_{\omega_{k}''} \int d\tau \left(\sum_{\omega_{k}} \exp(-i\omega_{k}\tau) Q^{ab}(\omega_{k}) \right)^{p-2} \times \exp\left(-i\tau \left(\omega_{k}' + \omega_{k}'' \right) \right) \delta Q^{ab}(\omega_{k}') \delta Q^{ab}(\omega_{k}'') .$$
(A.25)

Para la solución 1s-RSB los autovalores y los autovectores pueden ser obtenidos resolviendo la ecuación

$$A^{2}(\omega_{k})\delta Q^{ab}(\omega_{k}) + A(\omega_{k})B(\omega_{k})\left(\left(\delta\mathbf{Q}(\omega_{k})\cdot\epsilon\right)^{ab} + \left(\epsilon\cdot\delta\mathbf{Q}(\omega_{k})\right)^{ab}\right) + B^{2}(\omega_{k})\left(\epsilon\cdot\delta\mathbf{Q}(\omega_{k})\cdot\epsilon\right)^{ab} - \frac{p(p-1)\beta}{4}q_{\mathrm{EA}}^{p-2}\epsilon^{ab}\delta Q^{ab}(\omega_{k}) = \lambda_{R}(\omega_{k})\delta Q^{ab}(\omega_{k}), \quad (A.26)$$

donde $a \neq b$ y $A(\omega_k)$ y $B(\omega_k)$ se definen con las ecs. (6.33) y (6.34). Ya que buscamos al autovalor del replicón, entonces imponemos los vínculos

$$\left(\epsilon \cdot \delta \mathbf{Q}(\omega_k)\right)^{ab} = 0 , \qquad (A.27)$$

$$(1 - \epsilon^{ab}) \,\delta Q^{ab}(\omega_k) = 0 \;, \tag{A.28}$$

y fijamos $\omega_k = 0$ para obtener

$$\lambda_R = A^2(0) - \frac{\beta}{4} p(p-1) q_{\rm EA}^{p-2}.$$
 (A.29)

La condición de estabilidad marginal corresponde a $\lambda_R = 0$ y reemplaza a la (6.39) para la determinación de m.

A.2.1. El tamaño de bloque m

Imponiendo $\lambda_R = 0$ y usando la ec. (6.35) obtenemos

$$m = \frac{(p-2)q_{\rm d}(0) - q_{\rm EA}}{q_{\rm EA}} = (p-2)\frac{1-y'}{y'}.$$
 (A.30)

De esta expresión se sigue que $x_p = p - 2$. Para obtener las soluciones dinámicas basta con resolver las mismas ecuaciones que se aplican al equilibrio simplemente reemplazando x_p por su nuevo valor p - 2.

Apéndice B

B.1. Cálculo del replicón para el modelo p-espín cuántico s = 1/2 desordenado acoplado al ambiente

La función de partición replicada y promediada sobre el desorden del modelo p-espín cuántico s = 1/2 desordenado acoplado al ambiente se expresa por las ecuaciones (7.15)–(7.17),

$$[Z^n] = \prod_{a,b=1}^n \prod_{t,t'=0}^{N_\tau - 1} \int \mathcal{D}Q^{atbt'} \mathcal{D}\Lambda^{atbt'} \exp\left(-NP(\Lambda, Q)\right) \,,$$

con

$$\begin{split} P(\Lambda,Q) &= \sum_{a,b=1}^{n} \sum_{t,t'=0}^{N_{\tau}-1} \left(\frac{\Lambda^{atbt'}}{N_{\tau}^{2}} Q^{atbt'} - \frac{\beta^{2} J^{2}}{4 N_{\tau}^{2}} (Q^{atbt'})^{\bullet p} + \mathcal{C}_{(t-t')} \delta^{ab} (1-Q^{atbt'}) \right) \\ &- \ln \operatorname{Tr}_{\{s^{at}\}} \left(e^{H_{\text{eff}}} \right) \;, \\ H_{\text{eff}} &= \sum_{a,b=1}^{n} \sum_{t,t'=0}^{N_{\tau}-1} \frac{\Lambda^{atbt'}}{N_{\tau}^{2}} s^{at} s^{bt'} + \sum_{a=1}^{n} \sum_{t=0}^{N_{\tau}-1} \left(A + B s^{at} s^{a(t+1)} \right) \;. \end{split}$$

Separamos las contribuciones de las partes diagonal $q_{\rm d}^{att'}$, $\lambda_{\rm d}^{att'}$, y no diagonal (que no depende de los índices t, t') Q^{ab} , Λ^{ab} , de la matriz del parámetro de orden y llegamos a

$$P(\Lambda, Q) = -\sum_{(a,b)}^{n} \Lambda^{ab} Q^{ab} - \sum_{a=1}^{n} \sum_{(t,t')}^{N_{\tau}-1} \frac{\lambda_{d}^{att'}}{N_{\tau}^{2}} q_{d}^{att'} + \sum_{(a,b)}^{n} \frac{\beta^{2} J^{2}}{4} (Q^{ab})^{\bullet p} + \sum_{a=1}^{n} \sum_{(t,t')}^{N_{\tau}-1} \frac{\beta^{2} J^{2}}{4N_{\tau}^{2}} (q_{d}^{att'})^{\bullet p} + \frac{\beta^{2} J^{2} n}{4N_{\tau}} - \sum_{a=1}^{n} \sum_{(t,t')}^{N_{\tau}-1} \mathcal{C}_{(t-t')} (1 - q_{d}^{att'}) + \ln \operatorname{Tr}_{\{s^{at}\}} \left(e^{H_{\text{eff}}}\right) , \qquad (B.1)$$

$$H_{\rm eff}[\Lambda^{atbt'}] = \sum_{(a,b)}^{n} \sum_{t,t'}^{N_{\tau}-1} \frac{\Lambda^{ab}}{N_{\tau}^2} s^{at} s^{bt'} + \sum_{a=1}^{n} \sum_{(t,t')}^{N_{\tau}-1} \frac{\lambda^{att'}}{N_{\tau}^2} s^{at} s^{at'} + \sum_{a=1}^{n} \sum_{t=1}^{N_{\tau}-1} \left(A + B s^{at} s^{a(t+1)}\right) .$$
(B.2)

De la condición de extremo sobre $Q^{ab}, q_{\rm d}^{att'}$ obtenemos

$$\Lambda^{ab} = \frac{\beta^2 J^2}{4} p(Q^{ab})^{\bullet p-1} , \qquad (B.3)$$

$$\lambda_{\rm d}^{att'} = \frac{\beta^2 J^2}{4} p(q_d^{att'})^{\bullet p-1} + \mathcal{C}(t-t') N_{\tau}^2 \,. \tag{B.4}$$

Notamos que a través de estas dos últimas relaciones, las únicas dependencias que necesitaremos considerar son $Q^{ab}, q_d^{att'}$.

Para estudiar la estabilidad de la solución 1s-RSB de vidrio de espín, vamos a realizar un desarrollo perturbativo a segundo orden de P(Q). Tomamos los siguientes incrementos: $Q^{ab} + \xi^{ab} \ge q_d^{att'} + \epsilon^{att'}$. Recogiendo solo los términos de segundo orden para $P(Q^{ab}, q_d^{att'})$ encontramos Δ

$$\begin{split} \Delta &= -\sum_{(a,b)} k \frac{p-1}{2} (Q^{ab})^{\bullet p-2} (\xi^{ab})^{\bullet p-2} - \sum_{a} \sum_{(t,t')} \frac{k(p-1)}{2N_{\tau}^{2}} (q_{d}^{att'})^{\bullet p-2} (\epsilon^{att'})^{\bullet p-2} \\ &+ \sum_{(a,b)} \sum_{t,t'} \frac{k(p-2)}{2N_{\tau}^{2}} (Q^{ab})^{\bullet p-3} < s^{at} s^{bt'} > (\xi^{ab})^{\bullet p-2} \\ &+ \sum_{a} \sum_{(t,t')} \frac{k(p-2)}{2N_{\tau}^{2}} (q_{d}^{att'})^{\bullet p-3} < s^{at} s^{at'} > (\epsilon^{att'})^{\bullet p-2} \\ &+ \sum_{a} \sum_{(t,t')} \frac{k(p-2)}{2N_{\tau}^{2}} (q_{d}^{att'})^{\bullet p-3} < s^{at} s^{at'} > (\epsilon^{att'})^{\bullet p-2} \\ &+ \sum_{(a,b)(c,d)} \sum_{tt',\tau\tau'} \frac{k^{2}}{2N_{\tau}^{4}} (Q^{ab})^{\bullet p-2} (Q^{cd})^{\bullet p-2} < s^{at} s^{bt'} s^{c\tau} s^{d\tau'} > \xi^{ab} \xi^{cd} \\ &+ \sum_{ab} \sum_{(t,t')(\tau,\tau')} \frac{k^{2}}{2N_{\tau}^{4}} (Q^{ab})^{\bullet p-2} (q_{d}^{b\tau\tau'})^{\bullet p-2} < s^{at} s^{bt'} s^{b\tau} s^{b\tau'} > \epsilon^{att'} \epsilon^{b\tau\tau'} \\ &+ \sum_{(a,b)d} \sum_{tt',(\tau,\tau')} \frac{k^{2}}{N_{\tau}^{4}} (Q^{ab})^{\bullet p-2} (Q^{cd})^{\bullet p-2} < s^{at} s^{bt'} s^{d\tau} s^{d\tau'} > \xi^{ab} \epsilon^{d\tau\tau'} \\ &- \sum_{(a,b)(c,d)} \sum_{tt',\tau\tau'} \frac{k^{2}}{2N_{\tau}^{4}} (Q^{ab})^{\bullet p-2} (Q^{cd})^{\bullet p-2} < s^{at} s^{bt'} > (s^{c\tau} s^{d\tau'}) > \xi^{ab} \xi^{cd} \\ &- \sum_{a,b} \sum_{(t,t')(\tau,\tau')} \frac{k^{2}}{2N_{\tau}^{4}} (Q^{ab})^{\bullet p-2} (Q^{d\tau\tau'})^{\bullet p-2} < s^{at} s^{bt'} > (s^{c\tau} s^{d\tau'}) > \xi^{ab} \xi^{cd} \\ &- \sum_{(a,b)d} \sum_{(t,t')(\tau,\tau')} \frac{k^{2}}{2N_{\tau}^{4}} (Q^{ab})^{\bullet p-2} (q_{d}^{d\tau\tau'})^{\bullet p-2} < s^{at} s^{bt'} > (s^{b\tau} s^{b\tau'}) > \epsilon^{att'} \epsilon^{b\tau\tau'} \\ &- \sum_{(a,b)d} \sum_{(t,t')(\tau,\tau')} \frac{k^{2}}{N_{\tau}^{4}} (Q^{ab})^{\bullet p-2} (q_{d}^{d\tau\tau'})^{\bullet p-2} < s^{at} s^{bt'} > (s^{d\tau} s^{d\tau'}) > \xi^{ab} \xi^{d\tau} \end{cases}$$

donde

$$k \equiv \frac{\beta^2 J^2}{2} p(p-1)$$
, (B.6)

y los valores medios se calculan como

$$<\cdots>=\frac{\operatorname{Tr}_{\{s^{at}\}}\exp(H_{\operatorname{eff}}^{\operatorname{SG}})\cdots}{\operatorname{Tr}_{\{s^{at}\}}\exp(H_{eff})},$$
(B.7)

siendo

$$H_{\text{eff}}^{\text{SG}} = \sum_{(a,b)} \sum_{tt'} \frac{\beta^2 J^2}{4N_{\tau}^2} p(Q^{ab})^{\bullet p-1} s^{at} s^{bt'} + \sum_a \sum_{(t,t')} \frac{\beta^2 J^2}{4N_{\tau}^2} p(q_d^{att'})^{\bullet p-1} s^{at} s^{at'} + \sum_{at} (A + Bs^{at} s^{at+1}).$$
(B.8)

 Q^{ab} y $q_{\rm d}^{att'}$ se obtienen también bajo la condición de extremo y corresponden a

$$Q^{ab} = \langle s^a s^b \rangle, \tag{B.9}$$

$$q_{\rm d}^{att'} = \langle s^{at} s^{at'} \rangle$$
 (B.10)

En particular con un esquema 1s-RSB Q^{ab} es cero si a, b no pertenecen al mismo bloque diagonal. Dentro de cada bloque diagonal tenemos simetría de réplicas y la expresión de los autovalores es la misma que la hallada por de Almeida-Thouless [103]. Para el autovalor asociado al replicón se obtiene

$$\lambda_R = P - 2Q + R, \qquad (B.11)$$

siendo P el coeficiente que multiplica a $\xi^{ab}\xi^{ab}$ en el desarrollo de segundo orden, Q esta asociado con el coeficiente de $\xi^{ab}\xi^{ad}$ y R con $\xi^{ab}\xi^{cd}$.

Así resulta

$$P = 1 - kq_{ea}^{p-2}(t - q_{ea}^{2}),$$

$$Q = -kq_{ea}^{p-2}(s - q_{ea}^{2}),$$

$$R = -kq_{ea}^{p-2}(r - q_{ea}^{2}),$$
(B.12)

 ${\rm donde}$

$$r = \langle s^a s^b s^c s^d \rangle = \left\langle \mathcal{S}^{-4} \left(\operatorname{Tr}_{\{s^t\}} \left(N_\tau^{-1} \sum_{t=0}^{N_\tau} s^t e^{H_{\text{eff}}^{\text{SG}}} \right) \right)^4 \right\rangle_{\text{eff}}, \qquad (B.13)$$

$$u = \frac{1}{N_{\tau}^2} \sum_{t\mu=0}^{N_{\tau}} \langle s^{at} s^b s^{a\mu} s^d \rangle \tag{B.14}$$

$$= \left\langle \mathcal{S}^{-3} \left(\operatorname{Tr}_{\{s^t\}} \left(N_{\tau}^{-1} \sum_{t=0}^{N_{\tau}} s^t e^{H_{\text{eff}}^{\text{SG}}} \right) \right)^2 \left(\operatorname{Tr}_{\{s^t\}} \left(N_{\tau}^{-2} \sum_{tt'=0}^{N_{\tau}} s^t s^{t'} e^{H_{\text{eff}}^{\text{SG}}} \right) \right) \right\rangle_{\text{eff}}, (B.15)$$

$$t = \frac{1}{N_{\tau}^{4}} \sum_{tt'\mu\mu'=0}^{N_{\tau}} \langle s^{at} s^{bt'} s^{a\mu} s^{b\mu'} \rangle = \left\langle \mathcal{S}^{-2} \left(\operatorname{Tr}_{\{s^{t}\}} \left(N_{\tau}^{-2} \sum_{tt'=0}^{N_{\tau}} s^{t} s^{t'} e^{H_{\text{eff}}^{\text{SG}}} \right) \right)^{2} \right\rangle_{\text{eff}} , (B.16)$$

y finalmente

$$H_{\text{eff}}^{\text{SG}} = \sum_{(t,t')} \left(\frac{\lambda_{\text{d}}(t-t') - \lambda_{\text{EA}}}{N_{\tau}^2} \right) s^t s^{t'} - \frac{\lambda_{\text{EA}}}{N_{\tau}} + \frac{\sqrt{2\lambda_{\text{EA}}}}{N_{\tau}} x \sum_t s^t + \sum_t (A + Bs^t s^{t+1}), \quad (B.17)$$

 con

$$\lambda_{\rm EA} = \frac{\beta^2 J^2}{4} p q_{\rm EA}^{p-1} \,, \tag{B.18}$$

$$\lambda_{\rm d}(t-t') = \frac{\beta^2 J^2}{4} p q_{\rm d}^{p-1}(t-t') + \mathcal{C}(t-t') N_{\tau}^2.$$
 (B.19)

Evaluando las expresiones anteriores en distintos puntos (T, Γ) del diagrama de fases se concluye que la solución 1s-RSB es estable, marginalmente estable o inestable según sea el autovalor del replicón positivo, nulo o negativo, respectivamente.

Bibliografía

- H. Horner, Glassy dynamics and aging in disordered systems, cond-mat/0312039, Lectures given at the WE-HERAEUS-Summer School on collective dynamics of nonlinear and disordered systems, Chemnitz, 2002, in: G. Radons, W. Just, P. Häussler (Eds.) Collective Dynamics of Nonlinear and Disordered Systems, (Springer, Berlin, 2004).
- [2] L. Cugliandolo, Dynamics of glassy systems, lecture notes in Slow Relaxation and non equilibrium dynamics in condensed matter, Les Houches Session 77 July 2002
 J. L. Barrat, J. Dalibard, J. Kurchan, M. V. Feigel'man eds. cond-mat/0210312.
- [3] W. Kob, Supercooled liquids, the glass transition, and computer simulations, lecture notes in Slow Relaxation and non equilibrium dynamics in condensed matter, Les Houches Session 77 July 2002 J. L. Barrat, J. Dalibard, J. Kurchan, M. V. Feigel'man eds. cond-mat/0212344.
- [4] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, R. P. Behringer, Granular solids, liquids, and gases, Rev. Mod. Phys. 68 (1996) 1259.
- [5] M. Mezard, G. Parisi, M. A. Virasoro, Spin-glasses and beyond, World Scientific, Singapore, 1987.
- [6] K. H. Fischer, J. A. Hertz, Spin Glasses, Cambridge University Press, 1991.
- [7] M. D. Ediger, C. A. Angell, S. R. Nagel, Supercooled liquids and glasses, J. Phys. Chem. 100 (1996) 13200.
- [8] S. F. Edwards, P. W. Anderson, Theory of spin glasses, Journal of Physics F 5 (1975) 965.
- [9] G. Parisi, Infinite number of order parameters for spin-glasses, Phys. Rev. Lett. 43 (1979) 1754.

- [10] Y. J. Uemura, A. Keren, K. Kojima, L. P. Le, G. M. Luke, W. D. Wu, Y. Ajiro, T. Asano, Y. Kuriyama, M. Mekata, H. Kikuchi, K. Kakurai, Spin fluctuations in frustrated Kagomé lattice system SrCr₈Ga₄O₁₉ studied by muon spin relaxation, Phys. Rev. Lett. **73** (1994) 3306.
- [11] W. Wu, B. Ellman, T. F. Rosenbaum, G. Aeppli, D. H. H. Reich, From classical to quantum glass, Phys. Rev. Lett. 67 (1991) 2076.
- [12] T. Rosenbaum, Quantum magnets and glasses, J. Phys.: Condens. Matter 8 (1996) 9759.
- [13] W. Wu, D. Bitko, T. F. Rosenbaum, G. Aeppli, Quenching of the nonlinear susceptibility at a T = 0 spin glass transition, Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 1919.
- [14] J. Brooke, D. Bitko, T. F. Rosenbaum, G. Aeppli, Quantum annealing of a disordered magnet, Science 284 (1999) 779.
- [15] A. Aharony, R. J. Birgeneau, A. Coniglio, M. A. Kastner, H. E. Stanley, Magnetic phase diagram and magnetic pairing in doped La₂CuO₄, Phys. Rev. Lett. **60** (1988) 1330.
- [16] F. C. Chou, N. R. Belk, M. A. Kastner, R. J. Birgeneau, Spin-glass behavior in La_{1,96}Sr_{0,04}CuO₄, Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 2204.
- [17] M. A. Kastner, R. J. Birgenau, G. Shirane, Y. Endoh, Magnetic, transport, and optical properties of monolayer copper oxides, Rev. Mod. Phys. 70 (1998) 897.
- [18] M. Ben-Chorin, Z. Ovadyahu, M. Pollak, Nonequilibrium transport and slow relaxation in hopping conductivity, Phys. Rev. B 48 (1993) 15025.
- [19] A. Vaknin, Z. Ovadyahu, M. Pollak, Aging effects in an Anderson insulator, Phys. Rev. Lett. 84 (2000) 3402.
- [20] F. Ladieu, J. Le Cochec, P. Pari, P. Trouslard, P. Ailloud, Dielectric constant of glasses: Evidence for dipole-dipole interactions, Phys. Rev. Lett. 90 (2003) 205501.
- [21] S. Ludwig, D. D. Osheroff, Field-induced structural aging in glasses at ultralow temperatures, Phys. Rev. Lett. 91 (2003) 105501.
- [22] H. Rieger, A. P. Young, Quantum spin glasses, cond-mat/9607005, Review article for XIV Sitges Conference: Complex Behavior of Glassy Systems.

- [23] A. J. Bray, M. A. Moore, Replica theory of quantum spin glasses, Journal of Physics C 13 (1980) L655.
- [24] J. A. Hertz, R. A. Klemm, Critical dynamics of a heisenberg spin-glass, Phys. Rev. Lett. 40 (1978) 1397.
- [25] L. F. Cugliandolo, D. R. Grempel, C. A. da Silva Santos, Imaginary-time replica formalism study of a quantum spherical *p*-spin-glass model, Phys. Rev. B 64 (2001) 014403.
- [26] H. F. Lozza, First-order phase transitions in spin-glass models with multiple paramegnetic solutions, Physica B 354 (2004) 352.
- [27] L. F. Cugliandolo, G. S. Lozano, Real-time nonequilibrium dynamics of quantum glassy systems, Physical Review B 59 (1999) 915.
- [28] L. Cugliandolo, D. Grempel, G. Lozano, H. Lozza, C. da Silva Santos, Dissipative effects on quantum glassy systems, Phys. Rev. B 66 (2002) 014444.
- [29] L. Cugliandolo, D. Grempel, G. Lozano, H. Lozza, Effects of dissipation on disordered quantum spin models, Phys. Rev. B 70 (2004) 024422.
- [30] L. Cugliandolo, G. Lozano, H. Lozza, Static properties of the dissipative random quantum Ising ferromagnetic chain, Phys. Rev. B 71 (2005) 224421.
- [31] A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, M. P. A. Fisher, A. Garg, W. Zwerger, Dynamics of the dissipative two-state system, Rev. Mod. Phys. 59 (1987) 1.
- [32] U. Weiss, Quantum Dissipative Systems, 2nd Edition, Series in Modern Condensed Matter Physics - Vol. 10, World Scientific, 1999.
- [33] R. P. Feynman, F. L. Vernon, Jr., The theory of a general quantum system interacting with a linear dissipative system, Annals of Physics **24** (1963) 118.
- [34] H. Rieger, A. P. Young, Zero-temperature quantum phase transitions of a twodimensional Ising spin glass, Phys. Rev. Lett. 72 (1994) 4141.
- [35] H. Rieger, A. P. Young, Griffiths singularities in the disordered phase of a quantum Ising spin glass, Phys. Rev. B 54 (1996) 3328.
- [36] M. Guo, R.Ñ. Bhatt, D. A. Huse, Quantum critical behavior of a three-dimensional Ising spin glass in a transverse magnetic field, Phys. Rev. Lett. 72 (1994) 4137.

- [37] M. Guo, R.N. Bhatt, D. A. Huse, Quantum Griffiths singularities in the transversefield Ising spin glass, Phys. Rev. B 54 (1996) 3336.
- [38] D. S. Fisher, Random transverse field Ising spin chains, Phys. Rev. Lett. 69 (1992) 534.
- [39] D. S. Fisher, Critical behavior of random transverse-field Ising spin chains, Phys. Rev. B 51 (1995) 6411.
- [40] D. S. Fisher, Phase transitions and singularities in random quantum systems, Physica A 263 (1999) 222.
- [41] C. Pich, A. P. Young, H. Rieger, N. Kawashima, Critical behavior and Griffiths-McCoy singularities in the two-dimensional random quantum Ising ferromagnet, Phys. Rev. Lett. 81 (1998) 5916.
- [42] L. Cugliandolo, G. Lozano, H. Lozza, Memory effects in classical and quantum mean-field disordered models, Eur. Phys. J. B 41 (2004) 87.
- [43] K. Binder, A. P. Young, Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions, Rev. Mod. Phys. 58 (1986) 801.
- [44] V. Cannella, J. A. Mydosh, Magnetic ordering in gold-iron alloys, Phys. Rev. B 6 (1972) 4220.
- [45] C. A. M. Mulder, A. J. van Duyneveldt, J. A. Mydosh, Susceptibility of the Cu Mn spin-glass: Frequency and field dependences, Phys. Rev. B 23 (1981) 1384.
- [46] M. W. Klein, R. Brout, Statistical mechanics of dilute copper manganese, Phys. Rev. 132 (1963) 2412.
- [47] N. W. Ashcroft, D. Mermin, Solid State Physics, Holt, Rinehart and Winston, New York, 1976.
- [48] D. Sherrington, S. Kirkpatrick, Solvable model of a spin-glass, Phys. Rev. Lett. 35 (1975) 1792.
- [49] B. Derrida, Random-energy model: An exactly solvable model of disordered systems, Phys. Rev. B 24 (1981) 2613.
- [50] T. R. Kirkpatrick, D. Thirumalai, p-spin interaction spin-glass model: Connections with structural glass problem, Phys. Rev. B 36 (1987) 5388.

- [51] J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless, R. C. Jones, Spherical model of a spin-glass, Phys. Rev. Lett. 36 (1976) 1217.
- [52] S. L. Sondhi, S. M. Girvin, J. P. Carini, D. Shahar, Continuos quantum phase trasnitions, Rev. Mod. Phys. 69 (1997) 315.
- [53] S. Sachdev, Quantum phase transitions, Cambridge University Press, 1999.
- [54] D. Belitz, T. R. Kirkpatrick, The Anderson-Mott transition, Rev. Mod. Phys. 66 (1994) 261.
- [55] R. G. Palmer, Broken ergodicity, Advanced Physics **31** (1982) 669.
- [56] R. A. Klemm, Quantum effects in spin glasses, J. of Phys. C: Solid State Phys. 12 (1979) L735.
- [57] T. M. Nieuewenhuizen, F. Ritort, Quantum phase transitions in spin glasses with multi-spin interactions, Physica A 250 (1998) 89.
- [58] M. Suzuki, Relationship between d-dimensional quantal spin system and (d + 1)dimensional Ising systems, Prog. Theor. Phys. **56** (1976) 1454.
- [59] R. B. Griffiths, Nonanalytical behavior above the critical point in a random Ising ferromagnet, Phys. Rev. Lett. 23 (1969) 17.
- [60] B. M. McCoy, Incompleteness of the critical exponent description for ferromagnetic systems containing random impurities, Phys. Rev. Lett. 23 (1969) 383.
- [61] J. Miller, D. A. Huse, Zero-temperature critical behavior of the infinite-range quantum Ising spin glass, Phys. Rev. Lett. 70 (1993) 3147.
- [62] A. P. Young, H. Rieger, Numerical study of the random transverse-field Ising spin chain, Phys. Rev. B 53 (1996) 8486.
- [63] B. M. McCoy, T. T. Wu, Theory of two-dimensional Ising model with random impurities. i. thermodynamics, Phys. Rev. 176 (1968) 631.
- [64] B. M. McCoy, T. T. Wu, Theory of two-dimensional Ising model with random impurities. i. spin correlation functions, Phys. Rev. 188 (1969) 982.
- [65] R. Kubo, M. Toda, N. Hatshitsume, Statistical Physics II, 2nd Edition, Springer series in solid-state sciences, Springer-Verlag, 1991.

- [66] H. Dekker, Quantization of the linearly damped harmonic oscillator, Phys. Rev. A 16 (1977) 2126.
- [67] N. Gisin, Quantum measurements and stochastic processes, Phys. Rev. Lett. 52 (1984) 1657.
- [68] J. Dalibard, Y. Castin, K. Mølmer, Wave-function approach to dissipative processes in quantum optics, Phys. Rev. Lett. 68 (1992) 580.
- [69] A. O. Caldeira, A. J. Leggett, Quantum tunnelling in a dissipative system, Ann. Phys. (N. Y.) 149 (1983) 374.
- [70] R. P. Feynman, A. R. Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals, 1st Edition, International Series in Pure and Applied Physics, McGraw-Hill, 1965.
- [71] R. P. Feynman, Statistical Mechanics: a set of lectures, 1st Edition, Frontiers in physics, Reading, MA: Addison-Wesley, 1972.
- [72] A. J. Bray, M. A. Moore, Influence of dissipation on quantum coherence, Phys. Rev. Lett. 49 (1982) 1545.
- [73] M. Vojta, Impurity quantum phase transitions, cond-mat/0412208.
- [74] P. Werner, K. Völker, M. Troyer, S. Chakravarty, Phase diagram and critical exponents of a dissipative Ising spin chain in a transverse magnetic field, Phys. Rev. Lett. 94 (2005) 047201.
- [75] I. S. Anderson, N. F. Berk, J. J. Rush, T. J. Udovic, R. G. B. Barnes, A. Magerl, D. Richter, Rapid low-temperature hopping of hydrogen in a pure metal: The ScH_x system, Phys. Rev. Lett. 65 (1990) 1439.
- [76] M. Tinkham, Introduction to Superconductivity, 2nd Edition, International Series in Pure and Applied Physics, McGraw-Hill, 1996.
- [77] M. Garst, S. Kehrein, T. Pruschke, A. Rosch, M. Vojta, Quantum phase transition of Ising-coupled Kondo impurities, Phys. Rev. B 69 (2004) 214413.
- [78] N. J. Craig, J. M. Taylor, E. A. Lester, C. M. Marcus, M. p. Hanson, A. C. Gossard, Tunable nonlocal spin control in a coupled-quantum dot system, Science 304 (2004) 565.

- [79] B. Georgeot, D. L. Shepelyansky, Quantum chaos border for quantum computing, Phys. Rev. E 62 (2000) 3504.
- [80] C. Miquel, J. P. Paz, W. Zurek, Quantum computation with phase drift errors, Phys. Rev. Lett. 78 (1997) 3971.
- [81] D. Braun, Creation of entanglement by interaction with a common heat bath, Phys. Rev. Lett. 89 (2002) 277901.
- [82] F. Igloi, R. Juhasz, H. Rieger, Griffiths McCoy singularities in the random transverse - field Ising spin chain, Phys. Rev. B 59 (1999) 11308.
- [83] P. W. Anderson, G. Yuval, Exact results in the Kondo problem: Equivalence to a classical one-dimensional coulomb gas, Phys. Rev. Lett 23 (1969) 89.
- [84] V. J. Emery, A. Luther, Low-temperature properties of the Kondo hamiltonian, Phys. Rev. B 9 (1974) 215.
- [85] S. Chakravarty, J. Rudnick, Dissipative dynamics of a two-state system, the Kondo problem, and the inverse-square Ising model, Phys. Rev. Lett 75 (1995) 501.
- [86] U. Wolf, Collective Monte Carlo updating for spin systems, Phys. Rev. Lett 62 (1989) 361.
- [87] E. Luijten, H. W. J. Blöte, Monte Carlo method for spin models with long-range interactions, Int. J. Mod. Phys. C 6 (1995) 359.
- [88] A. M. Ferrenberg, R. H. Swendsen, New Monte Carlo technique for studyng phase transitions, Phys. Rev. Lett. 61 (1988) 2635.
- [89] A. Crisanti, H. Rieger, Random bond Ising chain in a transverse magnetic field: A finite-size scaling analysis, J. Stat. Phys. 77 (1994) 1087.
- [90] K. Binder, The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics, 2nd Edition, Topics in Applied Physics, Vol 71, Springer-Verlag, 1988.
- [91] L. Onsager, Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition, Phys. Rev. 65 (1944) 117.
- [92] D. P. Landau, Finite-size behavior of the Ising square lattice, Phys. Rev. B 13 (1976) 2997.

- [93] R. Vollmer, T. Pietrus, H. V. Löhneysen, Phase transitions and non-Fermi-liquid behavior in UCu_{5-x}Pd_x at low temperatures, Phys. Rev. B 61 (2000) 1218.
- [94] Y. Tabata, D. R. Grempel, M. Ocio, T. Taniguchi, Y. Miyako, Non-Fermi-liquid scaling in Ce(Ru_{0.5}Rh_{0.5})₂Si₂, Phys. Rev. Lett. 86 (2001) 524.
- [95] S. Sachdev, N. Read, R. Oppermann, Quantum field theory of metallic spin glasses, Phys. Rev. B 52 (1995) 10286.
- [96] T. Vojta, Quantum version of a spherical model: Crossover from quantum to classical critical behavior, Phys. Rev. B 53 (1996) 710.
- [97] L. F. Cugliandolo, J. Kurchan, L. Peliti, Energy flow, partial equilibration, and effective temperatures in systems with slow dynamics, Phys. Rev. E 55 (1997) 3898.
- [98] D. R. Grempel, M. J. Rozenberg, Non-Fermi-liquid behavior in a disordered Kondoalloy model, Phys. Rev. B 60 (1999) 4702.
- [99] D. Thirumalai, L. Qiang, T. R. Kirkpatrick, Infinite-range Ising spin glass in a transverse field, J. Phys. A: Math. Gen 22 (1989) 3339.
- [100] G. Büttner, K. D. Usadel, Stability analysis of an Ising spin glass with transverse field, Phys. Rev. B 41 (1990) 428.
- [101] Y. Y. Goldschmidt, P. Y. Lai, Ising spin glass in atransverse field: Replica-symmetrybreaking solution, Phys. Rev. Lett. 64 (1990) 2467.
- [102] E. Gardner, Spin glasses with p-spin interactions, Nucl. Phys. B, [FS14] **257** (1985) 747.
- [103] J. R. L. de Almeida, D. J. Thouless, Stability of the Sherrington-Kirkpatrick solution of a spin glass model, J. Phys. A: Math. Gen. 11 (1978) 983.
- [104] K. D. Usadel, B. Schmitz, Quantum fluctuations in an Ising spin glass with transverse field, Solid State Communications 64 (1987) 975.
- [105] J. V. Alvarez, F. Ritort, Quantum Monte Carlo study of infinite-range Ising spin glass in a transverse field, J. Phys. A: Math. Gen. 29 (1996) 7355.
- [106] D. J. Gross, M. Mézard, The simplest spin glass, Nucl. Phys. B, [FS12] 240 (1984) 431.