

Congelamento inverso no modelo Ghatak-Sherrington com um campo aleatório

C. V. Morais¹, M. J. Lazo¹, S. G. Magalhães², F. M. Zimmer³

¹Programa de Pós-Graduação em Física - Instituto de Matemática, Estatística e Física,
Universidade Federal do Rio Grande, Rio Grande, Brasil

²Universidade Federal Fluminense, Niterói, Rio de Janeiro, Brasil

³Dep. de Física, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, Brasil

28 de junho de 2012

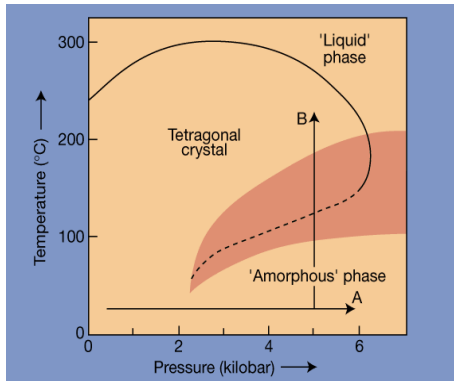


Apresentação

- Motivações
- Revisão
- Modelo
- Resultados
- Considerações finais



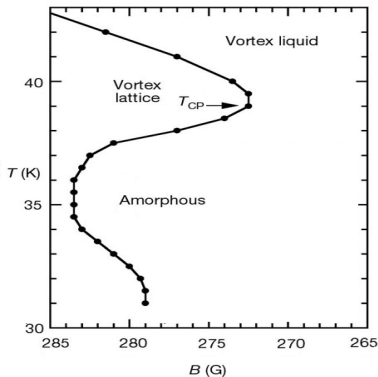
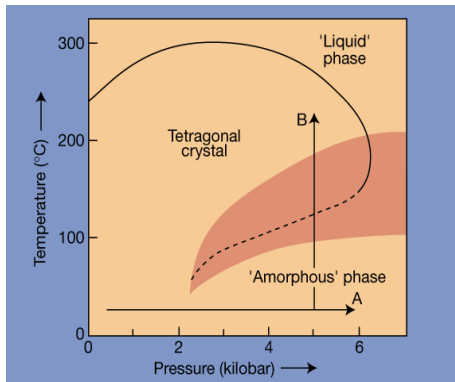
Motivação



Poli-Polímero (4-methylpentenel - P4MP1) (A. Lindsay Greer Nature 404, 134-135 (9 March 2000))



Motivação



Poli-Polímero (4-methylpentenel - P4MP1) (A. Lindsay Greer Nature 404, 134-135 (9 March 2000))

Composto $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$ (N. Avraham et al, Nature **411** 451 (2001))



System	Type of Transition on Heating
He ₃	fluid → bcc
He ₄	superfluid → hcp
Metallic alloys	amorphous → bcc
Liquid crystals	nematic → smectic A
Rochelle salt	paraelectric → ferroelectric
Water	liquid → amorphous
Superconductivity	disordered flux lines → ordered lattice
Ribonuclease A protein	denatured → renatured
P4MP1	amorphous → solid
PMM1 colloids-sticky spheres	liquid → glass
PEO-PPO-PEO triblock copolymer	micellar liquid → bcc
methylcellulose	liquid → gel

N. Schupper e N. M. Shnerb, PRE **72** 046107 (2005)



System	Type of Transition on Heating
He ₃	fluid → bcc
He ₄	superfluid → hcp
Metallic alloys	amorphous → bcc
Liquid crystals	nematic → smectic A
Rochelle salt	paraelectric → ferroelectric
Water	liquid → amorphous
Superconductivity	disordered flux lines → ordered lattice
Ribonuclease A protein	denatured → renatured
P4MP1	amorphous → solid
PMM1 colloids-sticky spheres	liquid → glass
PEO-PPO-PEO triblock copolymer	micellar liquid → bcc
methylcellulose	liquid → gel

N. Schupper e N. M. Shnerb, PRE **72** 046107 (2005)

Silva, C F ; Zimmer, F M ; Morais, C. V. ; Magalhaes, S G., v. 2011, jstat p. P05026, 2011



Transições inversas são classificadas em:

- Derretimento inverso $\left\{ \begin{array}{l} \text{Fases líquido-Cristalina} \\ \text{Fases vidro-Cristalina} \end{array} \right.$
- Congelamento inverso $\left\{ \begin{array}{l} \text{Fases líquido-Vidro} \end{array} \right.$



Inversão da entropia

- Transição inversa ocorre se, e somente se, a entropia da fase ordenada é maior que a entropia da desordenada.



- Abordagem teórica feita a partir de modelos magnéticos
 - Mecanismos físicos necessários para que um modelo apresente espontaneamente transições inversas
 - Modelo Magnético $\rightarrow$ Modelo Ghatak-Sherrington (GS)
 - Desordem e frustração $\rightarrow$ ingredientes chave

GS $\rightarrow$ Efeitos de desordem e frustração sempre aparecem combinados



Objetivos

- Verificar o papel somente da desordem nas transições inversas
 - Introduzir um campo aleatório ao modelo GS para checar o papel da desordem sobre o IF
 - Distinguir os efeitos vindos da desordem, daqueles vindos da frustração.

Em uma aproximação de campo médio, um campo aleatório é uma forma adicional de desordem, mas não de frustração. ¹

¹T. Schneider and E. Pytte, Phys. Rev. B **15**, 1519 (1977).
; A. Aharony, Phys. Rev. B **18**, 3318 (1978).



Transições inversas

Solução de Metilcelulose em água

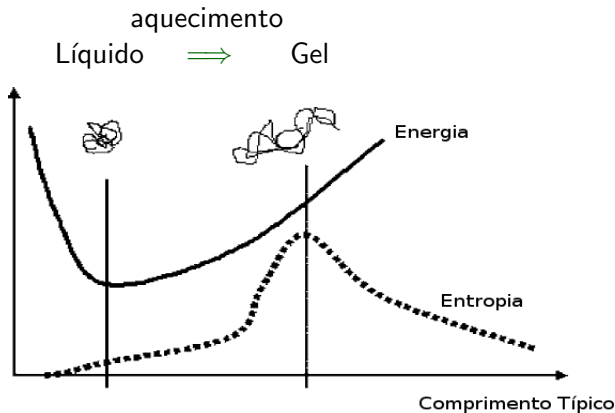


Figura: Esboço da dependência da energia e da entropia vs comprimento linear de polímero de metilcelulose em água. (N. Schupper, N. Shnerb, PRE **72** 046107 (2005)).

Congelamento Inverso

Definição da fase vidro de spin

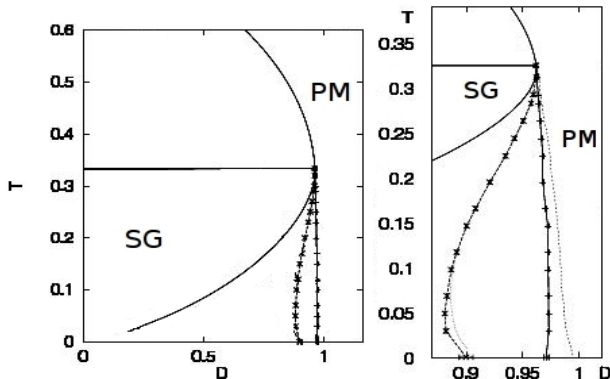
- Desordem
- Frustração



Modelo Ghatak-Sherrington

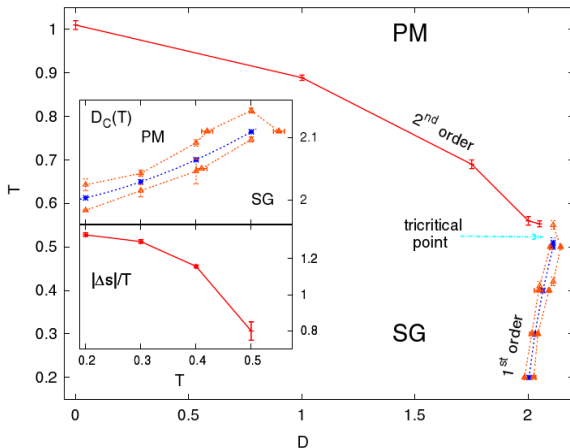
$$H = - \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j + D \sum_i S_i^2 \quad (1)$$

modelo de spin 1, $S = \pm 1, 0$



A. Crisanti and L. Leuzzi, Phys. Rev. Lett. 95, 087201 (2005)





A. Crisanti and L. Leuzzi, Phys. Rev. Lett. 104, 120602 (2010)



Mecanismos

Modelo GS

- Vantagem Energética (estados não interagentes) $\rightarrow$ parâmetro anisotrópico D
- Vantagem Entrópica (estados interagentes) $\rightarrow$ Desordem não-trivial



Transição Inversa

- Modelo de Muitos Estados
- Desordem não-trivial (Frustração)



Transição Inversa

- Modelo de Muitos Estados
- Desordem não-trivial (Frustração)

Qualquer espécie de desordem?



O modelo dado pelo Hamiltoniano

$$H = - \sum_{(i,j)} J_{ij} S_i S_j + D \sum_{i=1}^N S_i^2 - \sum_i h_i S_i, \quad (2)$$

onde os spins podem assumir os valores $S = \pm 1, 0$, o somatório (i,j) feito sobre sítios interagentes quaisquer e D um campo de cristal. O acoplamento spin-spin J_{ij} e campo magnético h_i são variáveis aleatórias seguindo distribuições Gaussianas independentes

$$P(J_{ij}) = \left[\frac{N}{2\pi J^2} \right]^{1/2} \exp \left[-\frac{N}{2J^2} J_{ij}^2 \right] \quad (3)$$



$$P(h_i) = \left[\frac{1}{2\pi\Delta^2} \right]^{1/2} \exp \left[-\frac{1}{2\Delta^2} h_i^2 \right]. \quad (4)$$

com Δ sendo a largura do campo aleatório.

De acordo com as referências abaixo ², a energia livre por spin

$$-\beta f = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \langle \langle \ln Z(\{J_{ij}\}, \{h_i\}) \rangle \rangle_{J,h} \quad (5)$$

pode ser obtida por meio do uso do método das réplicas, que consiste da identidade $\ln x = \lim_{n \rightarrow 0} [(x^n - 1)/n]$, tal que

$$-\beta f = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{Nn} (\langle \langle Z^n \rangle \rangle_{J,h} - 1), \quad (6)$$

²R. F. Soares, F. D. Nobre, J. R. L. de Almeida, Phys. Rev. B **50**, 6151(1994).
S. G. Magalhães, C. V. Morais, F. D. Nobre, J. Stat. Mech **2011**, p07014 (2011).



onde

$$\begin{aligned} \langle\langle Z^n \rangle\rangle_{J,h} = & \int \prod_{(i,j)} [dJ_{ij} P(J_{ij})] \\ & \times \prod_i [dh_i P(h_i)] Z^n(\{J_{ij}\}, \{h_i\}), \end{aligned} \quad (7)$$

com J_{ij} e h_i seguindo distribuições Gaussianas definidas nas Eqs. defined in Eq. 3 e 4, respectivamente e

$$Z^n = \text{Tr} \exp \left[- \sum_{\alpha=1}^n \beta \left(\sum_{(i,j)} J_{ij} S_{\alpha}^i S_{\alpha}^j + \sum_{i,\alpha} h_i S_{\alpha}^i - D \sum_i (S_{\alpha}^i)^2 \right) \right] \quad (8)$$



A média sobre J_{ij} e h_i resulta em

$$\langle\langle Z^n \rangle\rangle = Tre^{-\beta D \sum_{i,\alpha} (S_\alpha^i)^2} e^{\sum_{(i,j)} \frac{(\beta J)^2}{2N} (\sum_\alpha S_\alpha^i S_\alpha^j)^2} e^{\sum_i \frac{(\beta \Delta)^2}{2} (\sum_\alpha S_\alpha^i)^2} \quad (9)$$

Explicitando os termos com $\alpha = \beta$, $\alpha \neq \beta$ e reduzindo as somas de dois sítios para um único sítio

$$\begin{aligned} \langle\langle Z^n \rangle\rangle = Tre^{-\beta D \sum_{i,\alpha} (S_\alpha^i)^2} e^{\frac{(\beta J)^2}{2N} \left(\frac{1}{2} \sum_\alpha (\sum_i (S_\alpha^i)^2)^2 + \sum_{(\alpha\beta)} \left(\sum_i S_\alpha^i S_\beta^i \right) \right)} \\ \times e^{\sum_i \frac{(\beta \Delta)^2}{2} \left(\sum_\alpha (S_\alpha^i)^2 + 2 \sum_{(\alpha\beta)} S_\alpha^i S_\beta^i \right)} \end{aligned} \quad (10)$$



através do uso da transformação de Hubbard-Stratonovich:

$$\exp(\lambda a^2) = (2\pi)^{-1/2} \int dx \exp[-x^2/2 + (2\lambda)^{1/2} ax], \quad (11)$$

a seguinte equação é obtida:

$$\begin{aligned} &= \int \prod_{\alpha} dq_{\alpha} \int \prod_{(\alpha\beta)} dq_{\alpha\beta} \exp \left[-N \frac{(\beta J)^2}{4} \sum_{\alpha} q_{\alpha}^2 - N \frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta}^2 \right] \\ &\times T \exp \left[\frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{\alpha,i} q_{\alpha} (S_{\alpha}^i)^2 + \left(\frac{(\beta \Delta)^2}{2} - \beta D \right) \sum_{\alpha,i} (S_{\alpha}^i)^2 \right] \\ &\times \exp \left[\sum_{(\alpha\beta),i} ((\beta J)^2 q_{\alpha\beta} + (\beta \Delta)^2) S_{\alpha}^i S_{\beta}^i \right] \end{aligned} \quad (12)$$



$$\{Tr \exp(L)\}^N \equiv \exp(N \log Tre^L) \quad (13)$$

tal que

$$= \int \prod_{\alpha} dq_{\alpha} \int \prod_{(\alpha\beta)} dq_{\alpha\beta} \times \exp \left[-\frac{N(\beta J)^2}{4} \sum_{\alpha} q_{\alpha}^2 - \frac{N(\beta J)^2}{2} \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta}^2 + N \log Tre^L \right] \quad (14)$$

e

$$L = (\beta J)^2 \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta} S_{\alpha} S_{\beta} + (\beta \Delta)^2 \sum_{(\alpha\beta)} S_{\alpha} S_{\beta} + \left(\frac{(\beta \Delta)^2}{2} - \beta D \right) \sum_{\alpha} (S_{\alpha})^2 + \frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{\alpha} q_{\alpha\alpha} (S_{\alpha})^2, \quad (15)$$



Utilizando o método “steepest descent” e substituindo $\langle\langle Z^n \rangle\rangle$, é obtido

$$-\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left\{ -\frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{(\beta J)^2}{4} \sum_{\alpha} q_{\alpha\alpha}^2 + \ln \text{Tre}^L \right\}, \quad (16)$$

onde L o Hamiltoniano efetivo



os elementos diagonais $q_{\alpha\alpha}$ e no diagonais $q_{\alpha\beta}$ da matriz das réplicas so dados por

$$q_{\alpha\alpha} = \langle S_{\alpha}^2 \rangle, \quad q_{\alpha\beta} = \langle S_{\alpha} S_{\beta} \rangle, \quad (17)$$

respectivamente. O símbolo $\langle \dots \rangle$ representa a média termodinâmica sobre o Hamiltoniano efetivo L dado na Eq. 15.



Na solução com simetria de réplicas, a matriz das réplicas $\underline{Q}$ se torna

$$\underline{Q} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & & 1 & \\ & q_0 & & & 1 \end{pmatrix} \quad (18)$$



Na solução com simetria de réplicas, a matriz das réplicas $\underline{Q}$ se torna

$$\underline{Q} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & q_0 \\ & & 1 & & \\ & & & 1 & \\ q_0 & & & & 1 \\ & & & & & 1 \end{pmatrix} \quad (18)$$

Na solução com um passo de quebra de simetria de réplicas, um x positivo ($\leq n$) divide as réplicas em n/x blocos, e a matriz $\underline{Q}$ se torna (exemplo para $n = 6$ e $x = 3$).

$$\underline{Q} = \begin{pmatrix} 1 & q_1 & q_1 & & & \\ q_1 & 1 & q_1 & & & q_0 \\ q_1 & q_1 & 1 & & & \\ & & & 1 & q_1 & q_1 \\ & q_0 & & q_1 & 1 & q_1 \\ & & & q_1 & q_1 & 1 \end{pmatrix} \quad (19)$$



A aproximação de um 1P-QSR de Parisi usado na Eq. 16. Portanto, a matriz das réplicas q é parametrizada como mostrado abaixo ³

$$q_{\alpha\beta} = q_1 \text{ if } l(\alpha/x) = l(\beta/x) \quad (20)$$

$$q_{\alpha\beta} = q_0 \text{ if } l(\alpha/x) \neq l(\beta/x) \quad (21)$$

em que $l(m)$ dá o menor inteiro que é maior ou igual a m . Enquanto que

$$q_{\alpha\alpha} = p. \quad (22)$$

A parametrização introduzida nas Eqs. 20-22 é usada na soma sobre os índices das réplicas nas Eqs 16-15.

³G. Parisi, J. Phys. A **13**, 1101 (1980).



A partir da aproximação com 1P-QSB, a energia livre assume a forma

$$-\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left\{ -\frac{(\beta J)^2}{4} \left(n^2 q_0^2 + \frac{n}{x} x^2 (q_1^2 - q_0^2) - n q_1^2 \right) - \frac{(\beta J)^2}{4} n p^2 + \ln \text{Tre}^L \right\}, \quad (23)$$

e

$$L = \frac{(\beta J)^2}{2} \left[q_0 + \frac{\Delta^2}{J^2} \right] \left(\sum_{\alpha} S_{\alpha} \right)^2 + \frac{(\beta J)^2}{2} (q_1 - q_0) \sum_{block}^{n/x} \left(\sum_{\alpha}^x S_{\alpha} \right)^2 + \frac{1}{2} [(\beta J)^2 (p - q_1) - 2\beta D] \sum_{\alpha} (S_{\alpha})^2 \quad (24)$$



O passo final na aproximação de 1P-QSR é a linearização na Eq. 24 a qual introduz novos campos auxiliares z e v . Finalmente, tomando o limite $n \rightarrow 0$, a energia livre é obtida como

$$\beta f(q_0, q_1, p, x) = \frac{(\beta J)^2}{4} [(x-1)q_1^2 - xq_0^2 + p^2] - \frac{1}{x} \int Dz \ln \left[\int Dv [K(z, v)]^x \right], \quad (25)$$

onde

$$K(z, v) = 1 + 2e^\gamma \cosh h(z, v) \quad (26)$$

com $\int Dw = \int \frac{dw}{\sqrt{2\pi}} e^{-w^2/2}$ ($w = z, v$),

$$\gamma = \frac{(\beta J)^2}{2} (p - q_1) - \beta D, \quad (27)$$

e $h(z, v)$ is

$$h(z, v) = \beta J [\sqrt{q_0 + \Delta^2/J^2} z + \sqrt{q_1 - q_0} v]. \quad (28)$$



A extremização da energia livre produz as seguintes equações para os parâmetros de ordem (q_0, q_1, p) ,

$$\begin{aligned} q_0 &= \int \mathcal{D}z \left[\frac{\int \mathcal{D}v [K(z, v)]^{x-1} e^\gamma \sinh h(z, v)}{\int \mathcal{D}v [K(z, v)]^x} \right]^2, \\ q_1 &= \int \mathcal{D}z \frac{\int \mathcal{D}v [e^\gamma K(z, v)]^{x-2} [e^\gamma \sinh h(z, v)]^2}{\int \mathcal{D}v [K(z, v)]^x} \\ p &= \int \mathcal{D}z \frac{\int \mathcal{D}v [K(z, v)]^{x-1} e^\gamma \cosh h(z, v)}{\int \mathcal{D}v [K(z, v)]^x}, \end{aligned}$$



e x

$$\frac{(\beta J)^2}{4}(q_1^2 - q_0^2) + \frac{1}{x^2} \int \mathcal{D}z \ln \left\{ \int \mathcal{D}v [K(z, v)]^x \right\} \\ - \frac{1}{x} \int \mathcal{D}z \frac{\int \mathcal{D}v [K(z, v)]^x \ln[K(z, v)]}{\int \mathcal{D}v [K(z, v)]^x} = 0 ,$$

onde a última equação obtida pela extremização da energia livre com respeito ao tamanho do bloco x . Em adição, os parâmetros variacionais q_0, q_1, p e x tem alcance entre 0 e 1.



Resultados

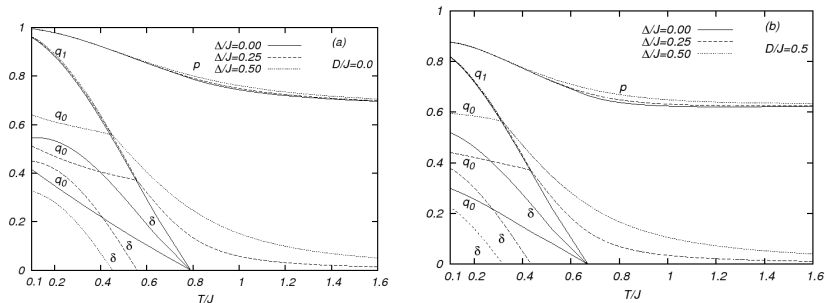


Figura: Parâmetros de ordem como uma função da temperatura para $D/J = 0$ e $D/J = 0.5$ e vários valores de Δ .

C. V. Morais, M. J. Lazo, S. G. Magalhães, F. M. Zimmer, Phys. Rev. E 85, 031133 (2012)



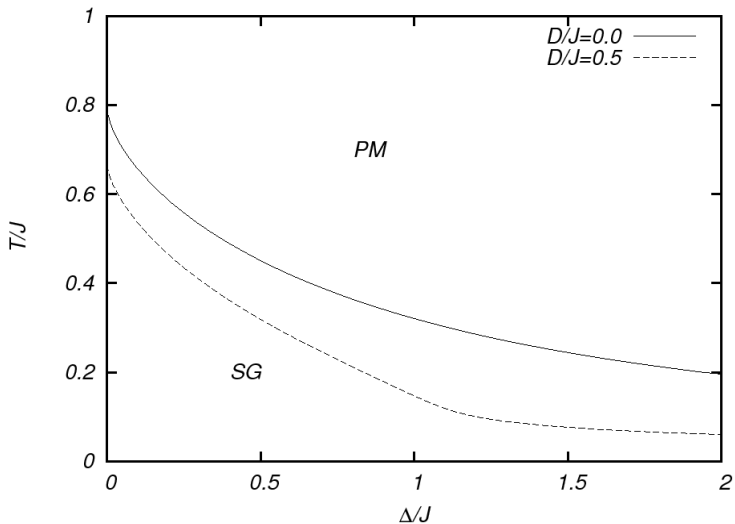


Figura: Diagramas de fase de temperatura versus Δ/J para $D/J = 0.0$ e $D/J = 0.5$.



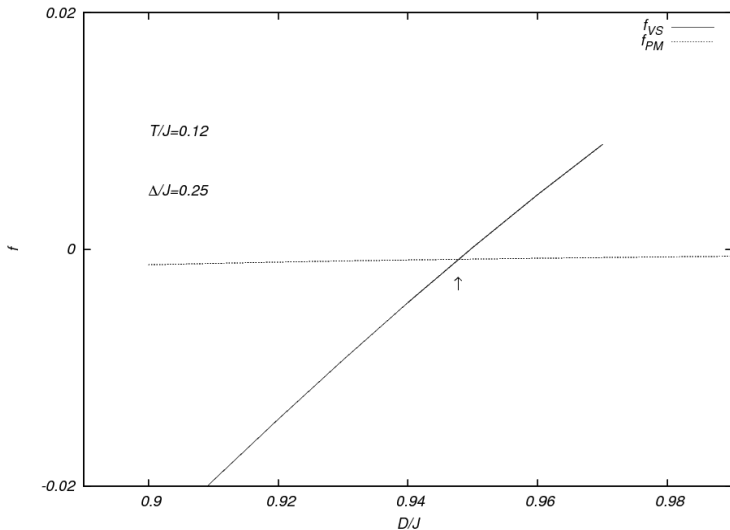


Figura: Energia livre como uma função de D/J para $T/J = 0.12$ e $\Delta/J = 0.25$.



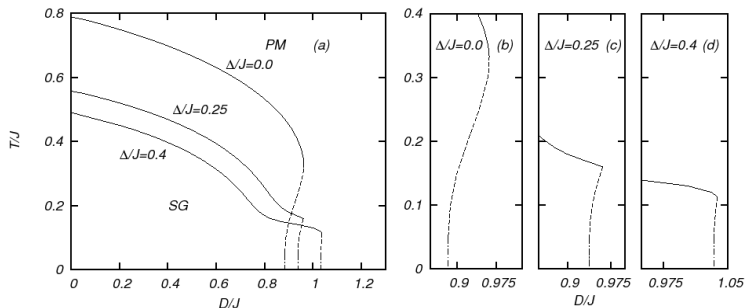


Figura: Diagramas de fase da temperatura versus D/J para diversos valores de Δ . Painéis (b), (c) e (d) mostram detalhes das transições de primeira ordem.



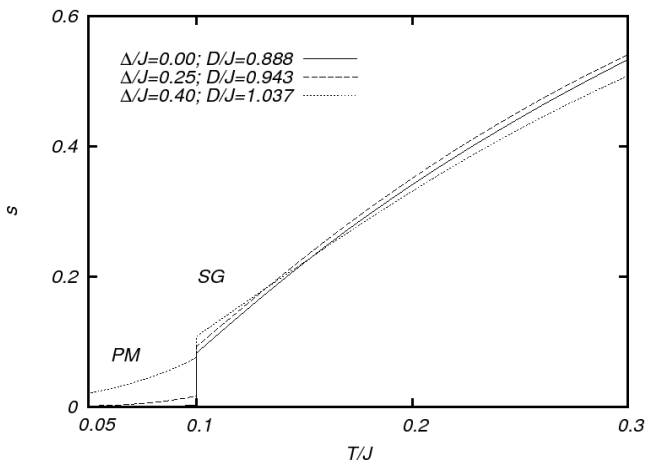


Figura: Entropia como uma função da temperatura para 3 valores de Δ e D . A temperatura de primeira ordem igual $T_{1f} = 0.1J$ para todas as curvas.



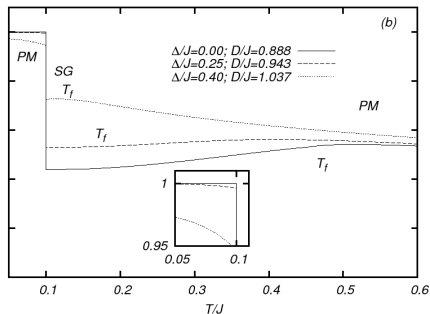
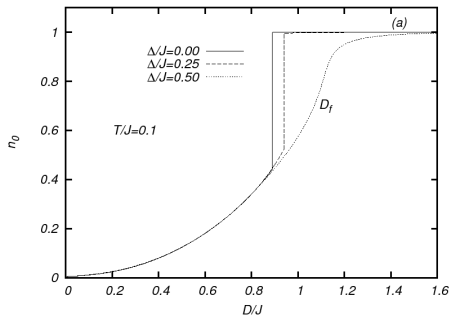


Figura: Paine (a) mostra o número médio de sítios com estados não magnéticos n_0 versus D/J para $T/J = 0.1$ e vários valores de Δ/J . Paine (b) mostra n_0 versus T/J para três valores de D/J e Δ/J .



Considerações Finais

Número de sítios não-magnéticos

- Campo aleatório tende a diminuir o número de sítios com estados não-magnéticos da fase PM em baixo T/J .

RF não reforça IF

- Desordem devido a presença do RF não reforça o IF.

Trabalho futuro

- Ghatak-Sherrington + campo aleatório com distribuição bimodal.

