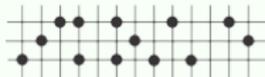




Universidade Federal de Santa Maria
Centro de Ciências Naturais e Exatas
Grupo de Teoria da Matéria Condensada

Laboratório de Teoria
da Matéria Condensada



TCMCC aplicada ao Modelo de van Hemmen

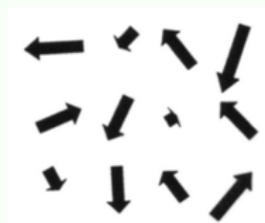
Competição entre vidro de spin e ferromagnetismo

Mateus Schmidt

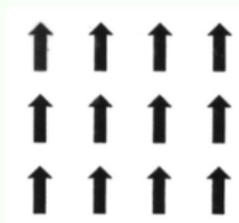
Santa Maria - RS, 2013

- Vidro de Spin e Ferromagnetismo - resultados experimentais;
- O hamiltoniano do sistema;
- Geometrias de rede - hexagonal e quadrada;
- A Aproximação da TCMCC;
- Comportamento da magnetização e do parâmetro q ;
- Resultados obtidos;

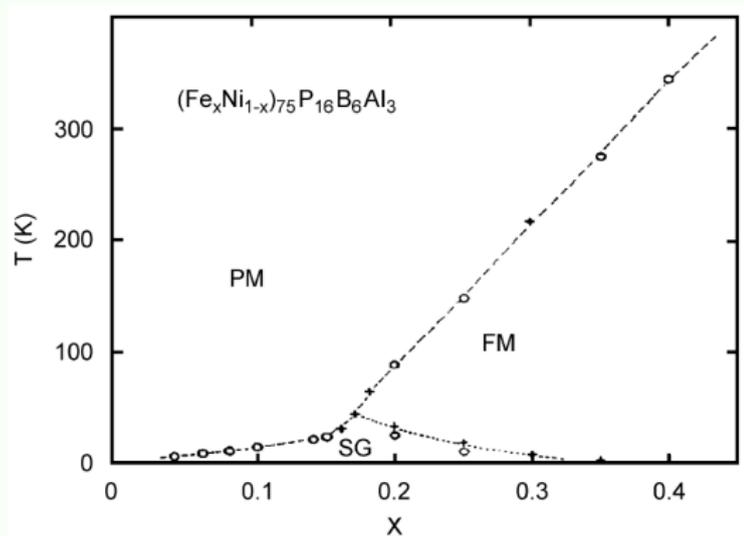
Vidro de Spin e Ferromagnetismo - resultados experimentais



Vidro de Spin



Ferromagnetismo



Fonte: O. Beckman, E. Figueroa, K. Gramm, L. Lundgren, K.V. Rao, H.S. Chen, Phys. Scr. 25 (1982) 726.

O hamiltoniano do sistema

Para descrever o hamiltoniano do sistema partimos do Modelo de Ising clássico:

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

Onde σ_i e σ_j são spins vizinhos, cujos valores podem ser ± 1 . J é a interação de troca entre os primeiros vizinhos da rede e H é o campo externo. Porém, em nossa abordagem do problema não será considerada a presença de nenhum campo agindo sobre o sistema. Então o segundo termo deste hamiltoniano do modelo de Ising é desnecessário.

Por outro lado, como característica do modelo de van Hemmen, incluímos um termo que caracteriza a desordem do sistema:

$$\mathcal{H}_{\mathcal{VH}} = - J \sum_{(ij)} \sigma_i \sigma_j - J_1 \cdot \sqrt{2} \cdot q \cdot x \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

Onde q é um parâmetro associado à desordem do sistema e x é um parâmetro que varia de $-\infty$ a $+\infty$. J_1 e J são as interações de troca entre os spins do sistema.

Contudo, introduzimos uma aproximação para este sistema infinito, através da Teoria de Campo Médio com Clusters Correlacionados (TCMCC), proposta por Daisuke Yamamoto (2009), onde o somatório de todos os spins é substituído por um somatório de um número finito de spins vizinhos, ou cluster.

Essa aproximação é realizada especificamente sobre a interação entre primeiros vizinhos e é definida por:

$$\sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \approx \sum_{\langle ij \rangle \in C} \sigma_i \sigma_j + \sum_{i \in C} h_e^{\sigma_i} \sigma_i$$

onde $h_{eff}^{\sigma_i}$ é o campo efetivo agindo sobre o spin σ_i do cluster.

Assim, o hamiltoniano do sistema torna-se

$$\mathcal{H}_{\mathcal{V}\mathcal{H}} = -J \sum_{\langle ij \rangle \in \mathcal{C}} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i \in \mathcal{C}} h_e^{\sigma_i} \sigma_i - J_1 \cdot \sqrt{2} \cdot q \cdot x \sum_{i \in \mathcal{C}} \sigma_i$$

O parâmetro q é obtido auto-consistentemente, assim como os campos efetivos $h_{eff}^{\sigma_i}$. Porém, o número de campos efetivos depende da geometria da rede e do tamanho do cluster escolhido.

O parâmetro q pode ser obtido através do cálculo da seguinte integral:

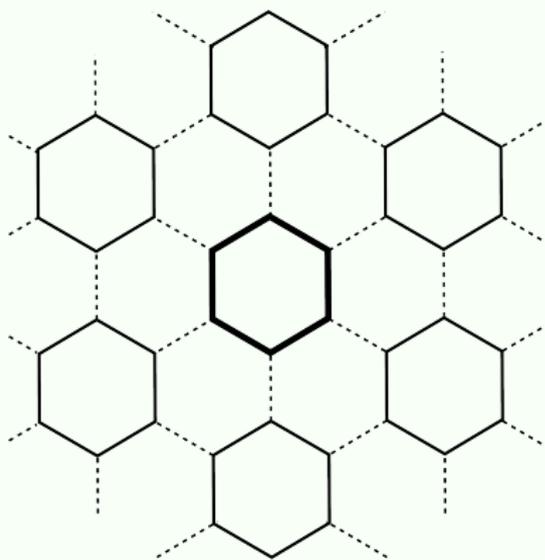
$$q = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{2}x}{2} \langle \sigma_i(x) \rangle dx$$

Onde $\langle \sigma_i(x) \rangle$ é o valor médio da magnetização por spin do cluster,

$$\langle \sigma_i(x) \rangle = \frac{\text{Tr}(\sigma_i e^{-\beta H(x)})}{\text{Tr}(e^{-\beta H(x)})}$$

Obtivemos q com integração numérica, utilizando o método de Simpson.

Geometrias de rede - hexagonal e quadrada

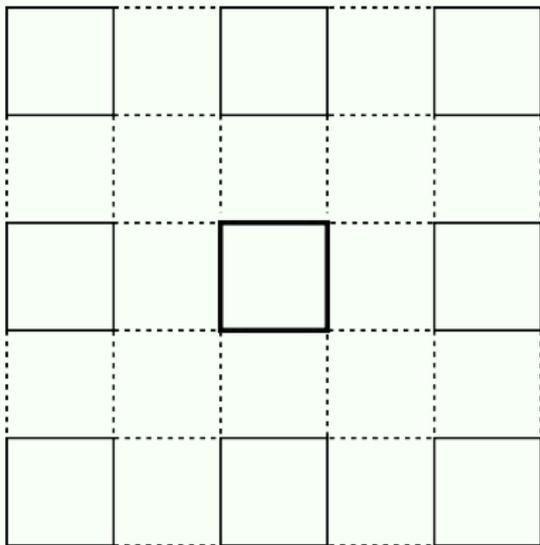


A estrutura de rede hexagonal tem um número de coordenação $z=3$.

Na abordagem da TCMCC, são definidos clusters com 6 spins conforme a representação ao lado.

Cada spin interage com dois primeiros vizinhos do seu próprio cluster e com um spin do cluster vizinho.

Geometrias de rede - hexagonal e quadrada

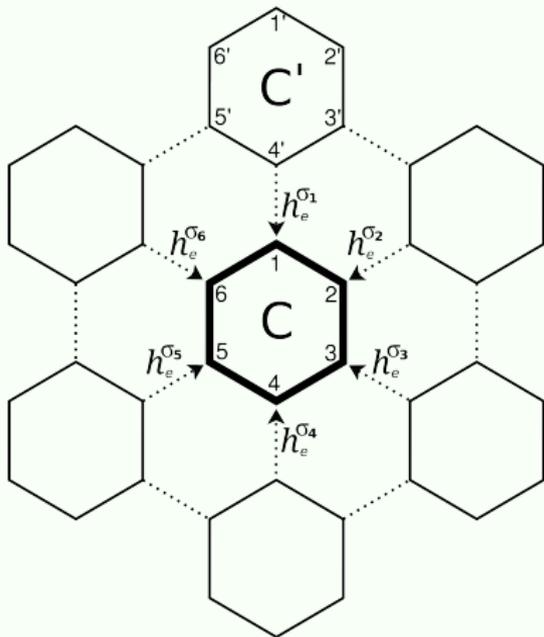


A estrutura de rede quadrada tem um número de coordenação $z=4$.

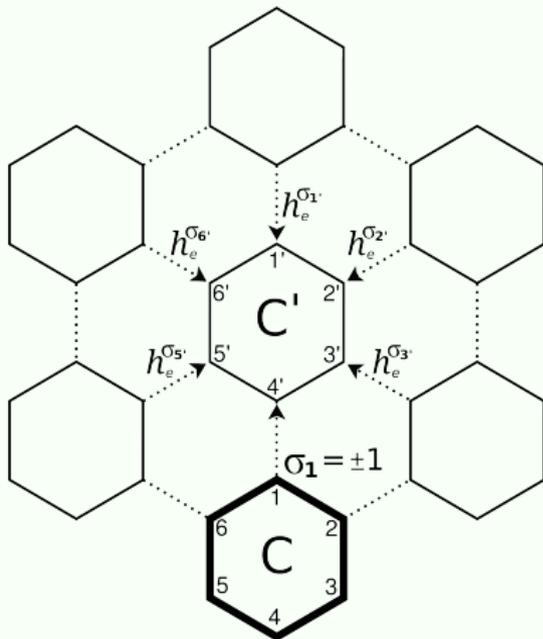
São definidos clusters com 4 spins, conforme a representação ao lado.

Cada spin interage com dois primeiros vizinhos do seu próprio cluster e com dois spins do cluster vizinho.

A Aproximação da TCMCC

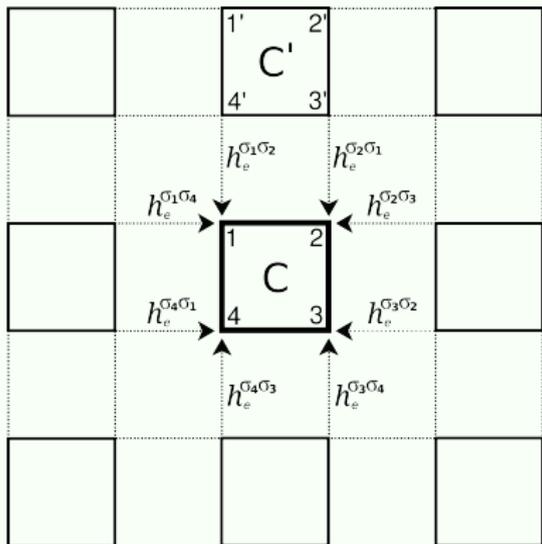


Para a rede hexagonal $h_e^{\sigma_i} = m^{\sigma_i}$.

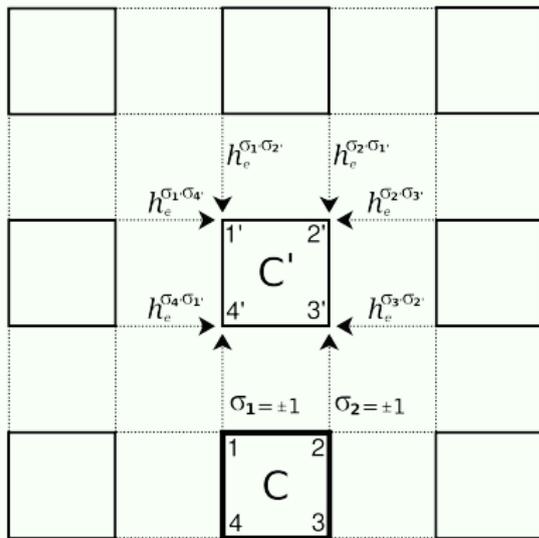


Portanto, é necessário obter m^+ e m^- .

A Aproximação da TCMCC



Para a rede quadrada a interação entre clusters é dada por dois spins.



Portanto, é necessário obter m^{++} , m^{+-} , m^{-+} e m^{--} .

Para a rede quadrada, por exemplo, um dos campos que atua sobre σ_1 é dado por

$$m^{\sigma_1\sigma_2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} \langle \sigma_{4'}(x) \rangle dx$$

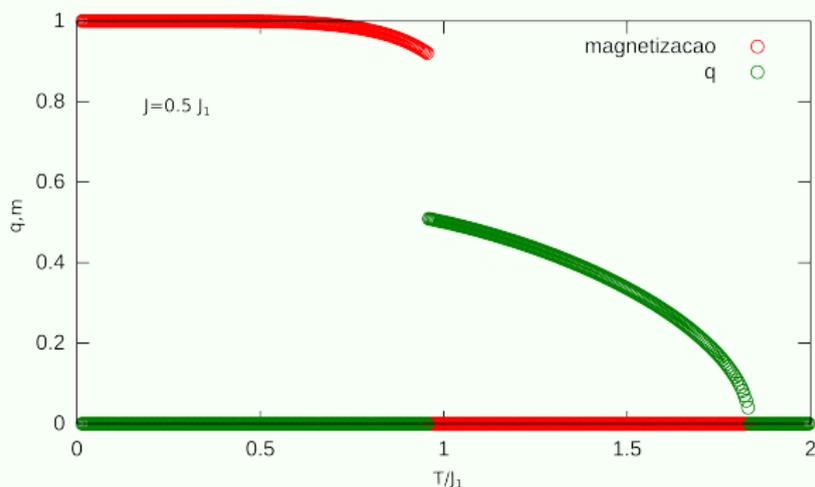
Devido a simetria do cluster, ao resolvermos os 4 campos possíveis (m^{++} , m^{+-} , m^{-+} e m^{--}) para o spin σ_1 , também teremos os campos auxiliares ($h_e^{\sigma_i}$) para todos os spins do cluster C.

Obtemos a integral acima (com o método de Simpson) e o parâmetro q auto-consistentemente através do método iterativo. Obtemos a magnetização resolvendo uma integral semelhante à descrita acima, porém, para a magnetização utilizamos $\langle \sigma_i(x) \rangle$ ao invés de $\langle \sigma_{4'}(x) \rangle$.

Comportamento da magnetização e do parâmetro q

Os resultados foram obtidos observando o comportamento da magnetização e do parâmetro q para diferentes razões entre as interações J e J_1 .

No diagrama foram marcados três pontos, a transição do parâmetro q , indicando a fase vidro de spin, a transição da magnetização ($\langle\sigma_i\rangle$) e o fim da fase vidro de spin, quando q volta a ter valor nulo. Em alguns casos, ocorrem transições de primeira ordem, como podemos ver abaixo.



Resultados obtidos

