

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

**ESTUDO DAS TRANSIÇÕES DE FASE UTILIZANDO
O MODELO DE VAN HEMMEN COM PRESENÇA DE
CLUSTER**

Denise da Silva Dalcol

Santa Maria, 26 de junho de 2014.

Objetivos:

- O objetivo deste trabalho é estudar teoricamente a competição entre VS e ferromagnetismo utilizando o modelo de vH numa formulação com cluster.
- Análise de resultados analíticos e numéricos é usada para descrever o comportamento das fases VS e FM na presença de clusters de spins.
- O efeito da presença de clusters em diagramas de fases, para diferentes tamanhos de cluster é estudado com intuito de entender o papel das correlações de curto alcance ferromagnético sobre a fase VS.

Metodologia:

- O hamiltoniano efetivo que descreve o modelo de vH com cluster de VS, pode ser obtido das referências [1], [2] e [3]:

- $$H_{eff} = -J(\xi + \eta)qS_T - J_0mS_T - J_{ij} \sum_{ij} S_i S_j \quad (1)$$

- A equação para a energia livre

- $$f = Jq^2 + \frac{J_0}{2}m^2 - \frac{1}{\beta} \langle \langle \ln \text{Tr} e^{-\beta H_{eff}} \rangle \rangle \quad (2)$$

Metodologia:

- Equações dos parâmetros de ordem

- $\frac{\partial f}{\partial q} = 0$

- $q = \left\langle \left\langle \frac{\text{Tr}\left(\frac{\xi+\eta}{2}\right) S_T e^{-\beta H_{eff}}}{\text{Tr} e^{-\beta H_{eff}}} \right\rangle \right\rangle \quad (3)$

- $\frac{\partial f}{\partial m} = 0$

- $m = \left\langle \left\langle \frac{\text{Tr} S_T e^{-\beta H_{eff}}}{\text{Tr} e^{-\beta H_{eff}}} \right\rangle \right\rangle \quad (4)$

Resultados Numéricos:

- Programa em linguagem FORTRAN.
- Sistema de equações não-lineares acopladas (q e m).
- Cálculo auto consistente.
- Os resultados são obtidos através de uma análise numérica do parâmetro de ordem VS e magnetização.

Resultados numéricos:

- Para encontrar a solução numérica das equações (2), (3) e (4) devemos fixar o número de sítios no cluster (n_s) e também, a estrutura geométrica utilizada como a representada ilustrativamente na figura (1).

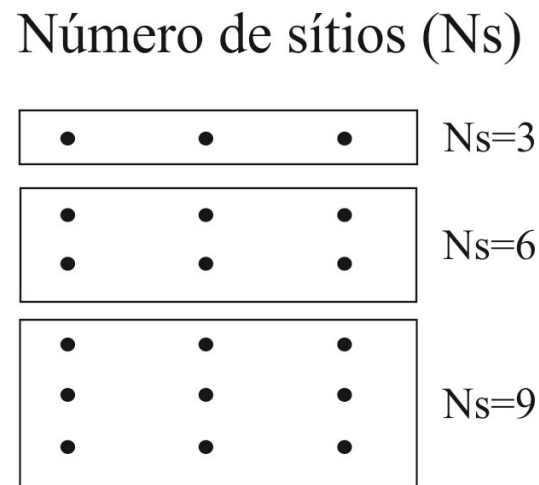


Figura 1: Representação ilustrativa da geometria do cluster e clusters com 3, 6 e 9 sítios.

Resultados numéricos:

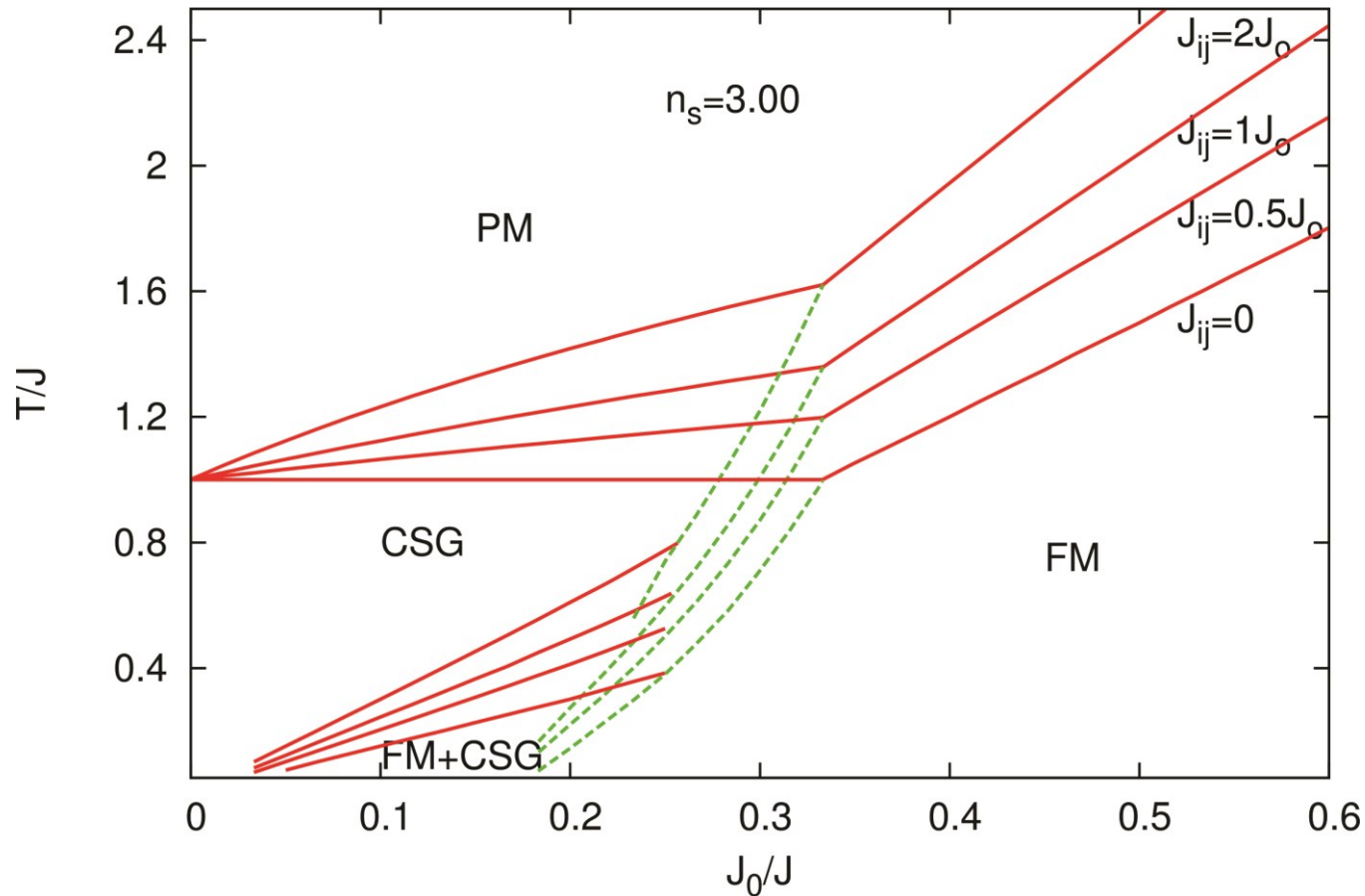


Figura 2: Diagramas de fases da temperatura (T/J) versus interação ferromagnética (J_0/J), para $n_s = 3$. Para vários valores de interação intracluster.

Resultados Numéricos:

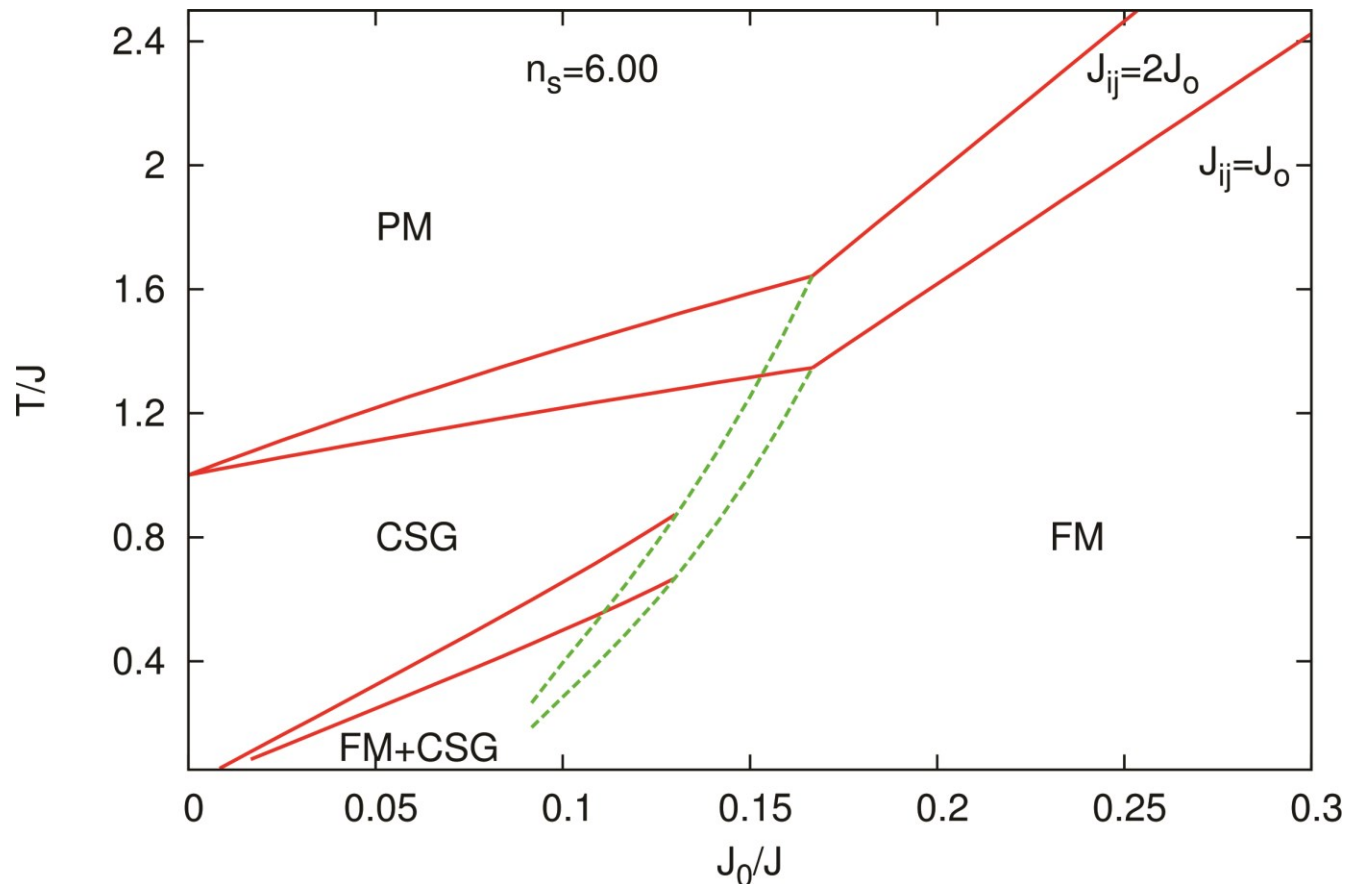


Figura 3: Diagramas de fases da temperatura (T/J) versus interação ferromagnética (J_0/J), para $n_s = 6$. Para $J_{ij} = J_0$ e $J_{ij} = 2J_0$.

Resultados Numéricos:

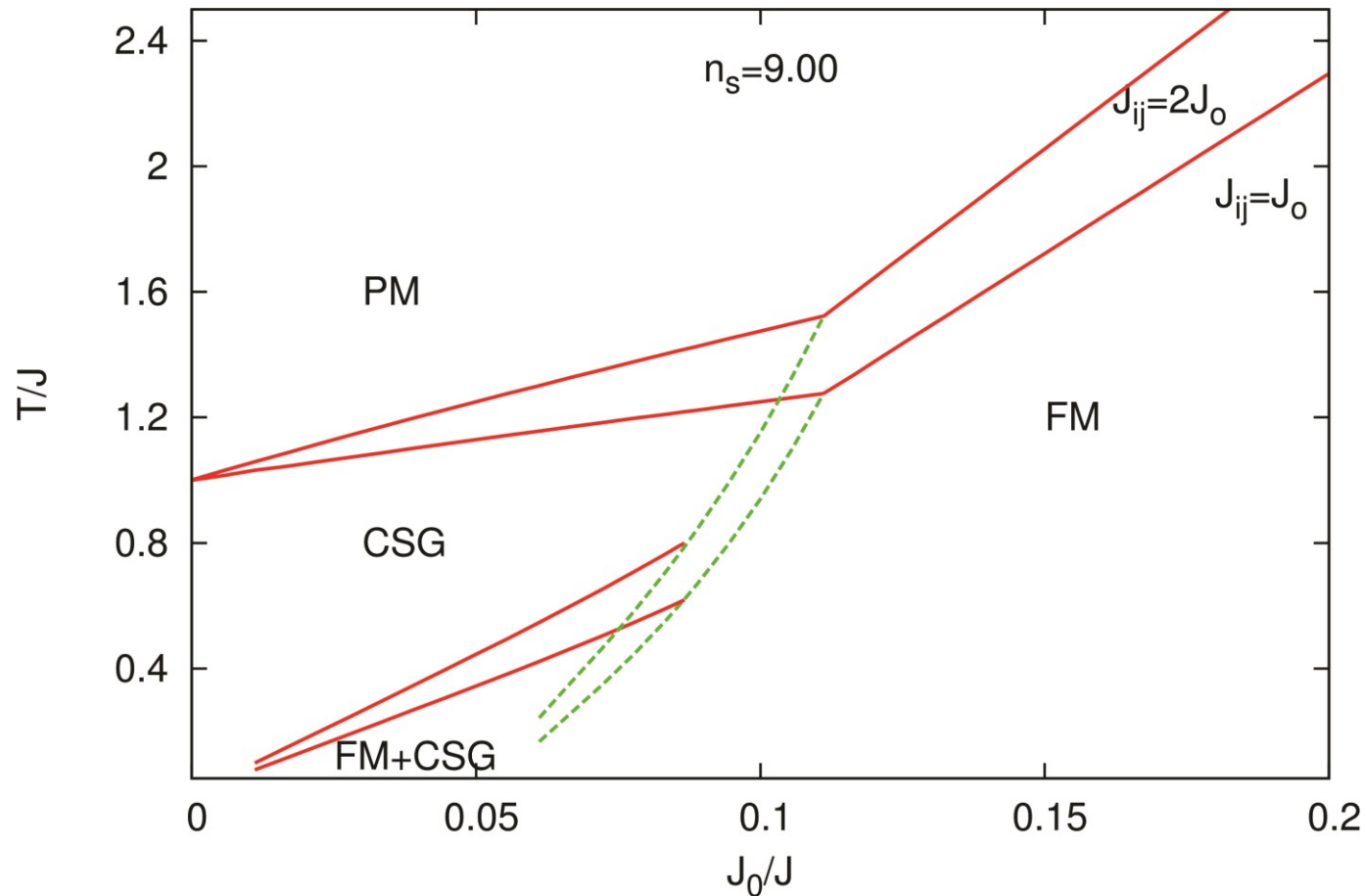


Figura 4: Diagramas de fases da temperatura (T/J) versus interação ferromagnética (J_0/J), para $n_s = 9$. Para $J_{ij} = J_0$ e $J_{ij} = 2J_0$.

Outros resultados:

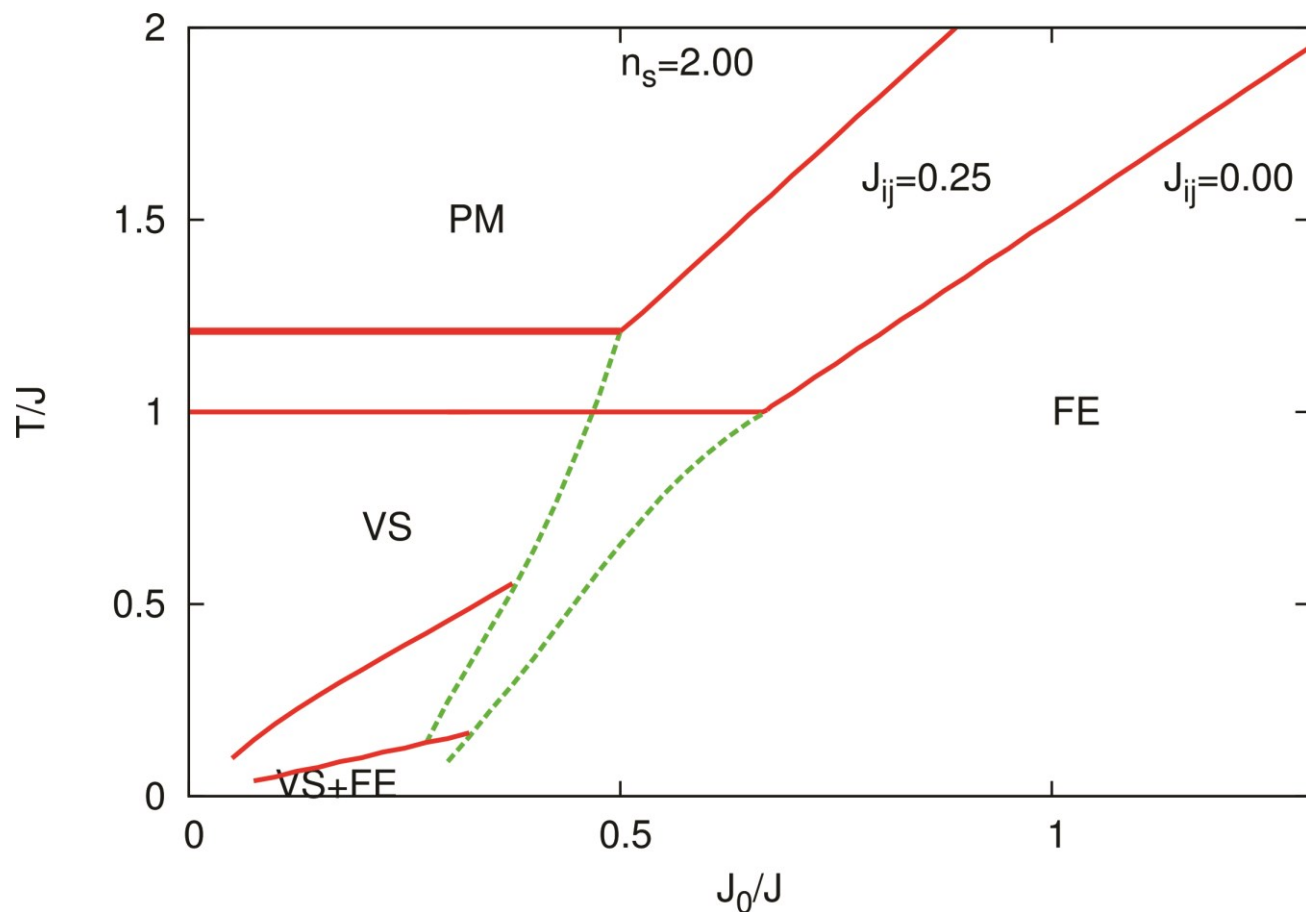


Figura 5: Diagramas de fases da temperatura (T/J) versus interação ferromagnética (J_0/J), para $n_s = 2$. Para $J_{ij} = 0.00$ e $J_{ij} = 0.25$.

Outros resultados:

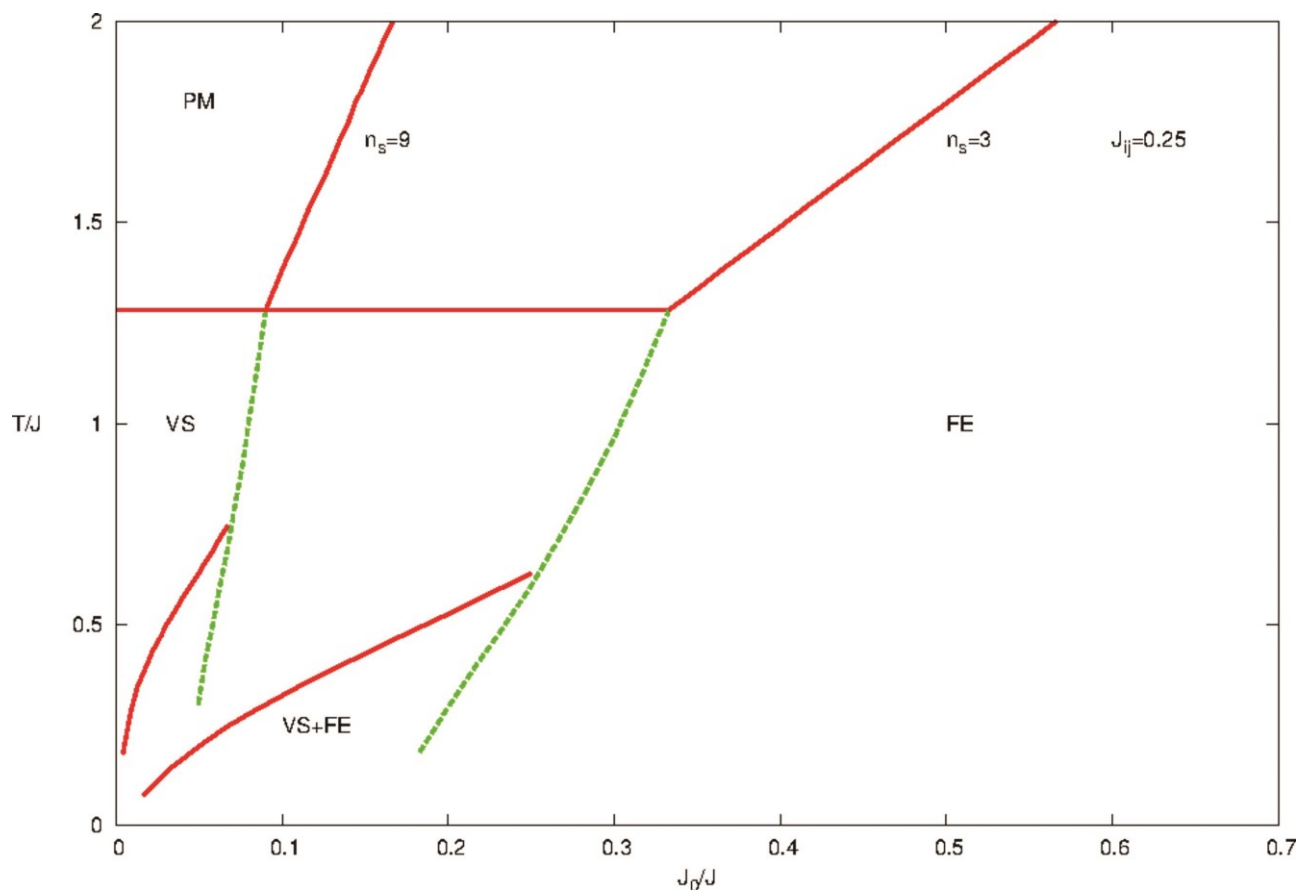


Figura 6: Diagramas de fases da temperatura (T/J) versus interação ferromagnética (J_0/J), para $n_s = 9$ e $n_s = 3$. Para $J_{ij} = 0.25$.

Conclusões:

- Quando há um aumento da interação intracluster, pode-se notar que as transições de fases ocorrem a altas temperaturas em comparação quando não consideramos essa interação ($J_{ij} = 0$)
- Quando J é maior que J_0 , temos as fases cluster de VS e mista a baixas temperaturas, e quando J_0 é maior que J há um predomínio da fase FM.
- Quando aumentamos o número de sítios do cluster, as transições entre as fases envolvidas surgem para valores mais baixos de J_0 .

Referências bibliográficas:

- [1] van Hemmen J L, Phys. Rev. Lett. v. 49, p. 409, 1982.
- [2] F M Zimmer, C F Silva, C V Morais and S G Magalhaes, Jstat, v. 2011, n.5, p. 0502b, 2011.
- [3] F. M. Zimmer, C. F. Silva, S. G. Magalhaes, Physica A, v. 389, p. 5594.5601, 2010.