

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA
LABORATÓRIO DE TEORIA DA MATÉRIA CONDENSADA

CONGELAMENTO INVERSO NO MODELO DE
CLUSTER DE VIDRO DE SPIN COM
INTERAÇÃO ANTIFERROMAGNÉTICA

C.F. Silva¹, F.M. Zimmer¹, S.G. Magalhaes² and C. Lacroix³

12 de julho de 2012

¹Dep. de Fisica, Universidade Federal de Santa Maria, 97105-900, Santa Maria, RS, Brazil.

²Instituto de Fisica, Universidade Federal Fluminense, 24210-346 Niterói, RJ, Brazil.

³Institut Néel, CNRS/UJF, 25 avenue des Martyrs, BP 166, F-38042 Grenoble, Cedex 09, France.

Sumário

Objetivos

Introdução

Modelo Cluster de VS de Ising com Interação Intracluster
Antiferromagnética

Resultados

Conclusões

Sumário

Objetivos

Introdução

Modelo Cluster de VS de Ising com Interação Intracluster
Antiferromagnética

Resultados

Conclusões

Objetivos

- ✓ Analisar o congelamento inverso no modelo de cluster de VS com spins de Ising para interação intracluster antiferromagnética (AF);
- ✓ Investigar os mecanismos responsáveis pelo aparecimento de congelamento inverso no modelo;

Sumário

Objetivos

Introdução

Modelo Cluster de VS de Ising com Interação Intracluster
Antiferromagnética

Resultados

Conclusões

Introdução

Transições Inversas

- ✓ Transformações reversíveis entre uma fase ordenada e uma fase desordenada;
- ✓ Há uma inversão da ordem natural do conteúdo entrópico das fases envolvidas;
- ✓ A fase desordenada tem entropia menor que a fase ordenada;

Introdução

Transições Inversas

- ✓ Derretimento Inverso: Líquido-Cristalina
- ✓ Congelamento Inverso: Líquido-Vidro

Introdução

Exemplos

- ✓ Isótopos de He⁴;
- ✓ Alguns tipos de supercondutores^{4,5};
- ✓ Nano partículas de ouro⁶;

⁴N. Schupper and N. M. Shnerb, Phys. Rev. E v. 72, p. 046107, 2005.

⁵N Avraham et. al., Nature, v. 411, p. 451, 2001.

⁶B. Donnio et. al., Soft Matter, v. 6, p. 965, 2010.

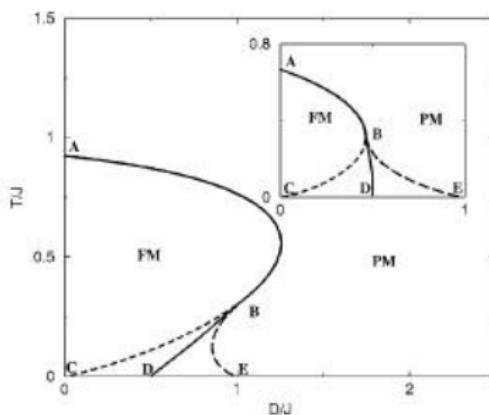
Modelos Teóricos

- ✓ Derretimento Inverso: Modelo Blume-Capel⁷:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + D \sum_{i=1}^N S_i^2, \quad (1)$$

com $S_i = 0, \pm 1$.

- ✓ É necessária a adição de um parâmetro de degenerescência: $r = l/k \geq 1$;

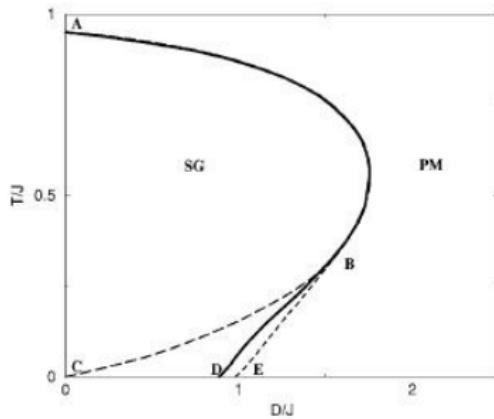


⁷M. Blume, Phys. Rev., v. 141, p. 517, 1966; H.W. Capel, Physica, v. 32, p. 966, 1966.

Introdução

- ✓ Congelamento Inverso: Modelo Ghatak-Sherrington⁸

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



- ✓ Apresenta congelamento inverso espontaneamente;

⁸S. K. Ghatak and D. Sherrington, J. Phys. C: Solid State, v.10, p.3149, 1977

Introdução

Congelamento inverso

- ✓ Modelo vidro de spin de Ising fermiônico⁹, ¹⁰

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{ij} J_{ij} \hat{S}_i \hat{S}_j - \mu \sum_i \hat{n}_i, \quad (3)$$

- ✓ onde os operadores de spins atuam sobre o espaço de Fock com quatro estados por sítio: dois estados não magnéticos $|00\rangle$ e $|\uparrow\downarrow\rangle$, e dois magnéticos $|\uparrow 0\rangle$, $|0\downarrow\rangle$;

⁹S.G. Magalhães, C.V. Morais, F.M. Zimmer, Phys. Rev. B, v. 77, p. 134422, 2008; S.G. Magalhães, C.V. Morais, F.M. Zimmer, Phys. Rev. B, v. 81, p. 014207, 2010; C.V. Morais, F.M. Zimmer, S. G Magalhães, Phys. Lett. A, v. 375, p. 689, 2011.

¹⁰F.M. Zimmer, C.F. Silva, C.V. Morais, S.G. Magalhães, J. Stat. Mech., v. 2011, p. 05026, 2011.

Introdução

Transições Inversas

- ✓ Elementos Fundamentais para Transição Inversa:
- ✓ Frustração e Estados Não-interagentes;

Introdução

Transições Inversas

- ✓ Elementos Fundamentais para Transição Inversa:
- ✓ Frustração e Estados Não-interagentes;

Sumário

Objetivos

Introdução

Modelo Cluster de VS de Ising com Interação Intracluster
Antiferromagnética

Resultados

Conclusões

Modelo Cluster de VS com interação Intracluster Antiferromagnética

- ✓ Considera dois tipos de interações: interação desordenada entre clusters distintos (interação intercluster) e uma interação AF entre spins do mesmo cluster (interação intracluster);

$$H = - \sum_{\nu\lambda}^{N_{cl}} J_{\nu\lambda} S_{\nu}^z S_{\lambda}^z - \sum_{\nu}^{N_{cl}} \left(\sum_{ij}^{n_s} J_{ij}^0 S_{i\nu}^z S_{j\nu}^z \right), \quad (4)$$

- ✓ N_{cl} representa o número de clusters no sistema, n_s o número de spins em cada cluster;
- ✓ $J_{\nu\lambda}$ são variáveis aleatórias dadas por uma distribuição Gaussiana e J_{ij}^0 é a interação intracluster antiferromagnética.

Modelo Cluster de VS com interação Intracluster Antiferromagnética

- ✓ A desordem é tratada através do método das réplicas: $\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} (\langle Z^n \rangle_{J_{\nu\lambda}} - 1) / n$,
- ✓ onde $\langle \dots \rangle_{J_{\nu\lambda}}$ representa a média sobre as variáveis aleatórias e Z^n é a função de partição replicada.
- ✓ Realizando a média sobre a desordem, encontramos a energia livre por cluster

$$\frac{\beta f}{N_{cl}} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left\{ \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{\alpha\gamma} Q_{\alpha\gamma}^2 - \ln \text{Tr} \exp \left[\beta \sum_{\nu} \left(\sum_{\alpha} \sum_{ij} J_{ij} S_{i\nu}^{z\alpha} S_{j\nu}^{z\alpha} + \sum_{\alpha\gamma} J Q_{\alpha\gamma} S_{\nu}^{z\alpha} S_{\nu}^{z\gamma} \right) \right] \right\} \quad (5)$$

Modelo Cluster de VS com interação Intracluster Antiferromagnética

- ✓ Aproximação de um passo de quebra de simetria de réplicas: $Q_{\alpha\alpha} = R$ e

$$Q_{\alpha\gamma} = Q_1, \text{ se } I(\alpha/a) = I(\gamma/a), \quad (6)$$

$$Q_{\alpha\gamma} = Q_0, \text{ se } I(\alpha/a) \neq I(\gamma/a), \quad (7)$$

onde $I(x)$ dá o menor inteiro que é maior ou igual a x .

$$Q_{\alpha\gamma} = \begin{pmatrix} R & Q_1 & Q_1 & & \\ Q_1 & R & Q_1 & & Q_0 \\ Q_1 & Q_1 & R & & \\ & & & R & Q_1 & Q_1 \\ & & & Q_0 & Q_1 & R \\ & & & & Q_1 & R \\ & & & & Q_1 & Q_1 \\ & & & & & R \end{pmatrix} \quad (8)$$

Modelo Cluster de VS com Interação Intracluster Antiferromagnética

✓ Portanto, a energia livre por cluster fica:

$$\frac{\beta f}{N_{cl}} = \frac{\beta^2 J^2}{4} [R^2 + a(Q_1^2 - Q_0^2) - Q_1^2] - \frac{1}{a} \int Dz \ln \int Dv [K(z, v)]^a, \quad (9)$$

onde $K(z, v) = \int D\xi \text{ Tr } e^{-\beta H_{ef}}$ e

$$H_{ef} = - \sum_{ij} J_{ij}^0 S_{i\nu}^z S_{j\nu}^z - h S_\nu^z \quad (10)$$

representa o modelo efetivo de um cluster, com

$$h = J\sqrt{(Q_1 - Q_0)}v + J\sqrt{(R - Q_1)}\xi + J\sqrt{Q_0}z, \quad (11)$$

e $\int Dx = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{x^2/2}}{\sqrt{2\pi}}$ ($x = z, v$ ou ξ).

Sumário

Objetivos

Introdução

Modelo Cluster de VS de Ising com Interação Intracluster
Antiferromagnética

Resultados

Conclusões

Resultados

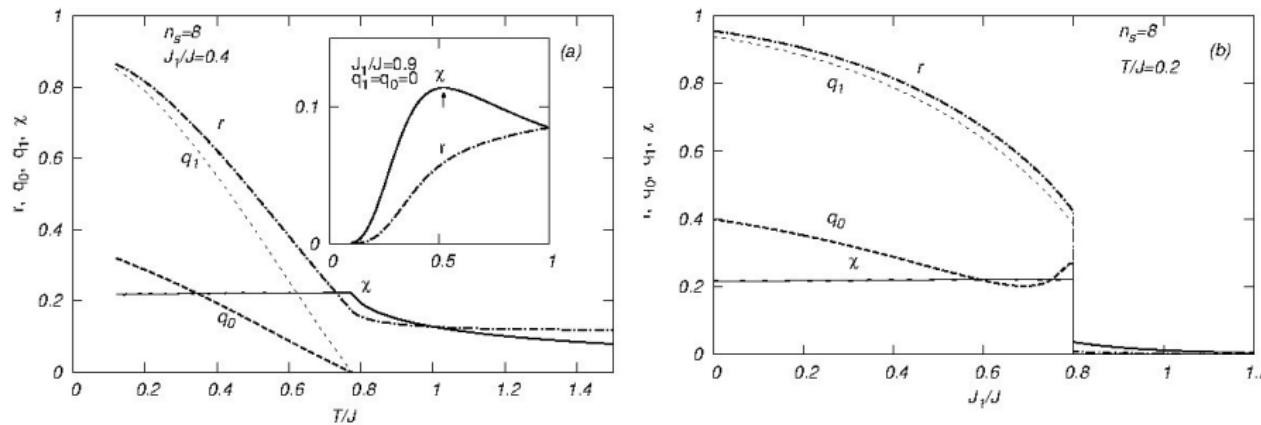


Figura: (a) Parâmetros de ordem e susceptibilidade linear em função da temperatura e (b) em função de J_1 para $n_s = 8$.

Resultados

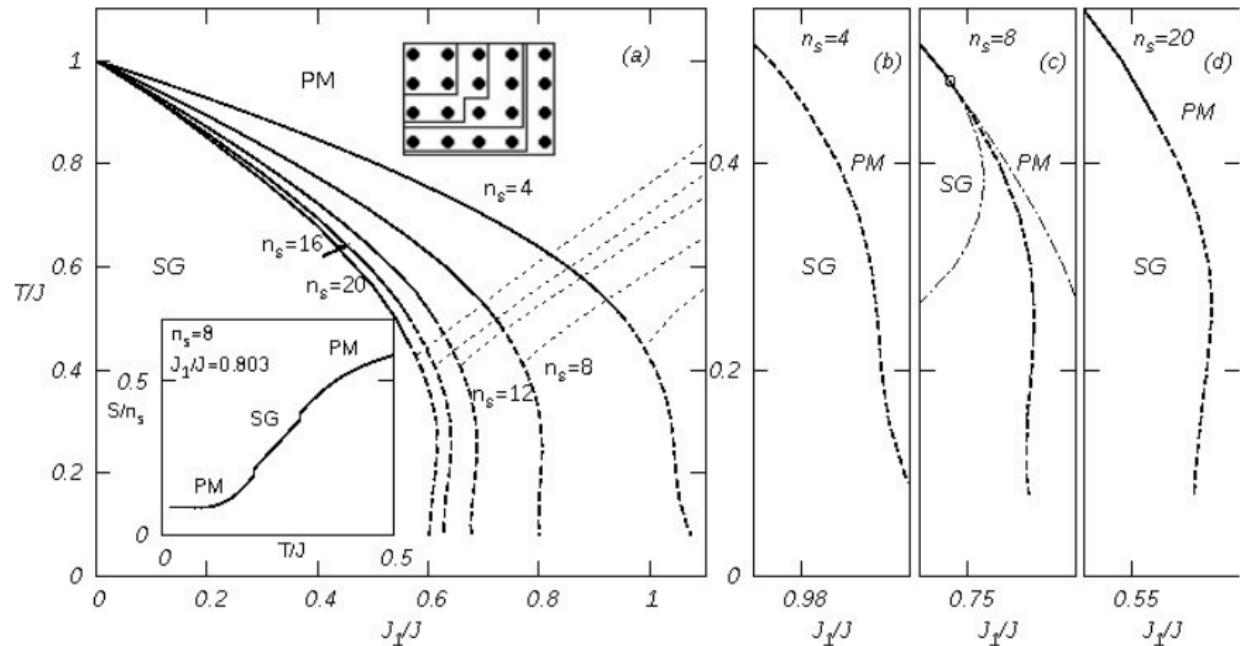


Figura: Diagrama de fases T/J versus J_1/J para vários tamanhos de clusters n_s , com valores de n_s pares.

Resultados

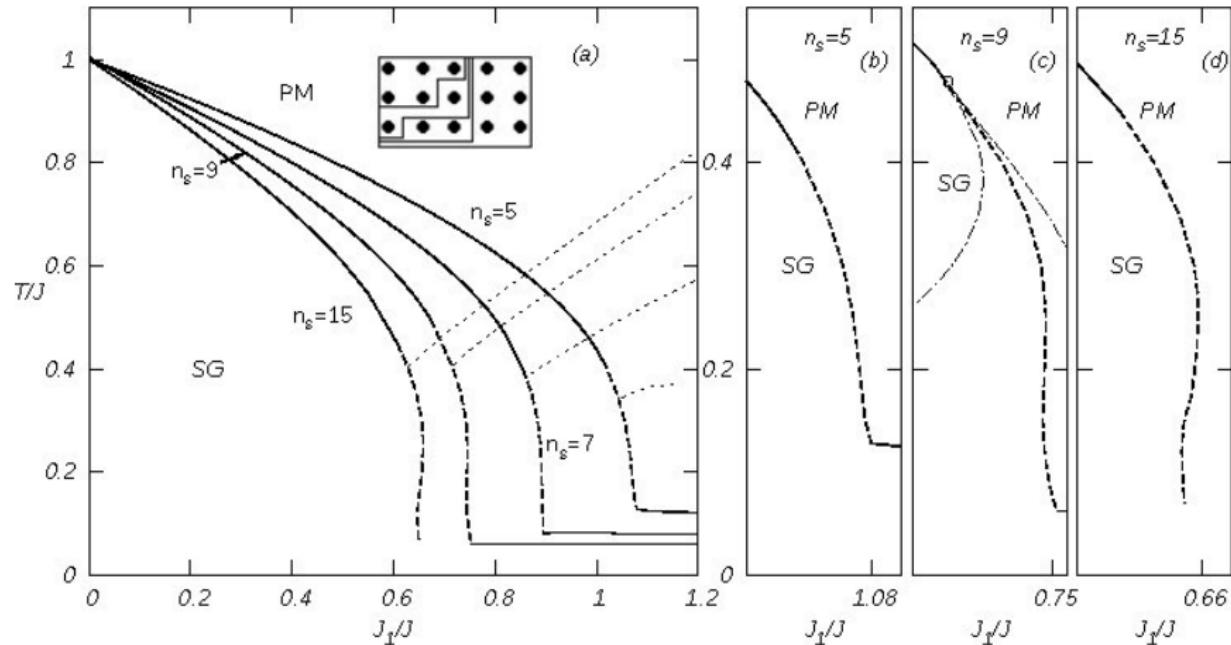


Figura: Diagrama de fases T/J versus J_1/J para vários tamanhos de clusters n_s , com valores de n_s ímpares.

Resultados

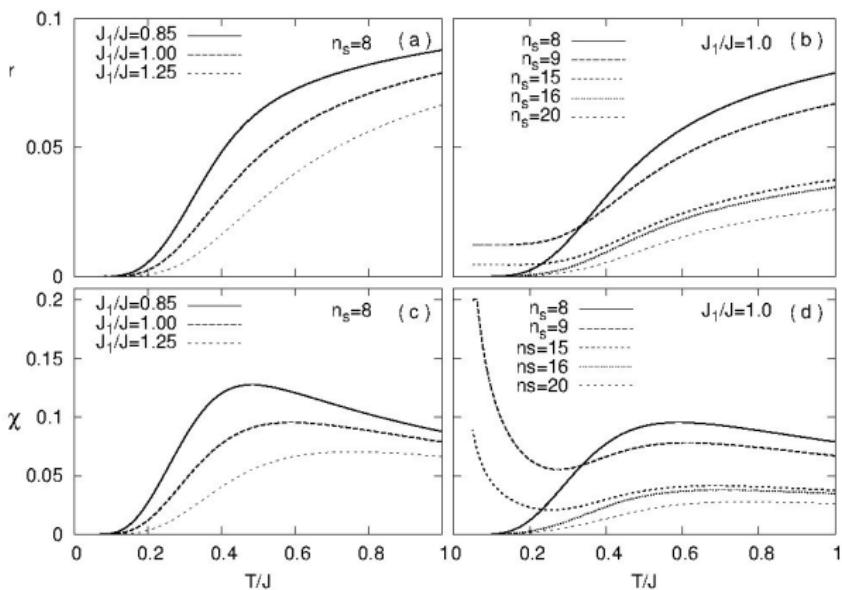


Figura: Parâmetro de ordem r e susceptibilidade linear χ em função de T/J .

Sumário

Objetivos

Introdução

Modelo Cluster de VS de Ising com Interação Intracluster
Antiferromagnética

Resultados

Conclusões

Conclusões

- ✓ Analisamos um modelo de cluster de VS de Ising com interação de curto-alcance antiferromagnética;
- ✓ Congelamento inverso em uma região J_1/J para n_s suficientemente grande;
- ✓ A fase PM a baixas temperaturas possui clusters com momentos magnéticos muito baixos;
- ✓ Ocorre quando as interações de curto-alcance antiferromagnéticas são grandes;
- ✓ Frustração e clusters com momentos magnéticos baixos são os elementos fundamentais para o aparecimento de congelamento inverso no modelo;