

Universidade Federal de Santa Maria
Programa de Pós-Graduação em Física

Congelamento Inverso no modelo de van Hemmen
Fermiônico

Isabela Correa Berger

20 de março de 2012

Sumário

- 1 Vidro de Spin
- 2 Transições Inversas
- 3 O modelo de van Hemmen fermiônico
- 4 Formalismo Lagrangeano
- 5 Resultados

Caracterização da fase VS

- ✓ Congelamento aleatório dos momentos magnéticos abaixo da temperatura de transição T_f ;
- ✓ Competição entre as interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas;
- ✓ Interações aleatórias

Caracterização da fase VS

- ✓ Desordem: pela posição aleatória dos íons magnéticos na rede;
- ✓ Frustração: incapacidade do sistema satisfazer simultaneamente todas as interações

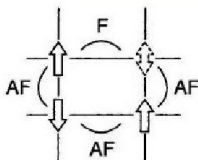


Figura: Representação esquemática de uma rede quadrada frustrada

Transições inversas

- ✓ Transições de fase reversíveis
- ✓ T fase ordenada $>$ T fase desordenada;
- ✓ Inversão na entropia entre as fases

Congelamento Inverso

- ✓ Transição entre uma fase Paramagnética em baixas temperaturas e uma fase Vidro de Spin em altas temperaturas

O modelo de van Hemmen fermiônico

O Hamiltoniano

$$H = -2\frac{J_0}{N} \sum_{i \neq j} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - 2 \sum_{i \neq j} J_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - 2\Gamma \sum_i \hat{S}_i^x \quad (1)$$

- ✓ $J_0 \rightarrow$ interação ferromagnética;
- ✓ $\Gamma \rightarrow$ campo magnético transverso;
- ✓ \hat{S}_i^z e $\hat{S}_i^x \rightarrow$ Operadores de Spin;
- ✓ $J_{ij} \rightarrow$ desordem e frustração;

$$J_{ij} = \frac{J}{N} [\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i] \quad (2)$$

Operadores de Spin

- ✓ Definidos em termos dos Operadores Fermiônicos de criação ($c_{i\sigma}^\dagger$) e destruição ($c_{i\sigma}$)

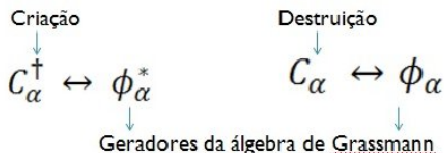
$$\hat{S}_i^z = \frac{1}{2} [\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}] \quad \text{e} \quad \hat{n}_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \quad (3)$$

$$\hat{S}_i^z = \frac{1}{2} [c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}] \quad \text{e} \quad \hat{S}_i^x = \frac{1}{2} [c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}] \quad (4)$$

- ✓ Analisar interações entre flutuação de carga e spin na presença de um mecanismo de flipagem dos spins, dado por Γ .

Formalismo Lagrangeano

- ✓ Propriedades de anticomutação dos Operadores de Destruição
- ✓ Variáveis de Grassmann



Formalismo Lagrangeano

- ✓ Espaço de Fock com 4 estados por sítio

Magnéticos

$|\uparrow 0\rangle; |0 \downarrow\rangle$

Não magnéticos

$|0 0\rangle; |\uparrow \downarrow\rangle$

- ✓ Modelos clássicos \rightarrow apenas estados magnéticos

Função de Partição

$$Z = \int D(\phi^* \phi) \exp \left[\int_0^\beta d\tau \sum_{i,\sigma} \phi_{i\sigma}^*(\tau) \left[-\frac{\partial}{\partial \tau} + \mu \right] \phi_{i\sigma}(\tau) - H(\phi^*(\tau), \phi(\tau)) \right] \quad (5)$$

$\mu \rightarrow$ potencial químico e $\beta = 1/T$

No limite termodinâmico

$$Z = \int D(\phi^* \phi) \exp \left[\int_0^\beta d\tau (A_\Gamma(\tau) + A_I(\tau, \xi, \eta)) \right] \quad (6)$$

Ação que depende de Γ

$$A_\Gamma(\tau) = \sum_{i,\sigma} \phi_{i\sigma}^*(\tau) \left[-\frac{\partial}{\partial \tau} + \mu \right] \phi_{i\sigma}(\tau) + \Gamma \sum_i S_i^x(\tau). \quad (7)$$

Ação ferromagnética

$$A_{FE} = \frac{J_0}{N} \int_0^\beta d\tau \sum_{(i,j)} S_i(\tau) S_j(\tau) \quad (8)$$

Ação aleatória

$$A_{VS} = \int_0^\beta d\tau \sum_{(i,j)} \frac{J_{ij}}{2} S_i(\tau) S_j(\tau) \quad (9)$$

$$\begin{aligned}
 A_I(\tau, \xi, \eta) &= \frac{J_0}{2N} \left[\sum_i S_i^z(\tau) \right]^2 - \frac{J}{2N} \left[\sum_i \xi_i S_i^z(\tau) \right]^2 \\
 &\quad - \frac{J}{2N} \left[\sum_i \eta_i S_i^z(\tau) \right]^2 + \frac{J}{2N} \left[\sum_i (\xi_i + \eta_i) S_i^z(\tau) \right]^2 \quad (10)
 \end{aligned}$$

$$S_i^z(\tau) = \underline{\phi}_i^\dagger(\tau) \underline{\sigma}^z \underline{\phi}_{i\sigma}(\tau)$$

$$\underline{\phi}_i = \begin{bmatrix} \phi_{i\uparrow}(\tau) \\ \phi_{i\downarrow}(\tau) \end{bmatrix}$$

$$\underline{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\underline{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Transformações Hubbard-Stratonovich

$$\exp(\lambda a^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{-x^2}{2} + a\sqrt{2\lambda}x\right) dx$$

Função de Partição

$$Z = \int Dm(\tau) \int Dq_3(\tau) \int Dq_1(\tau) \int Dq_2(\tau) \exp \left[-\frac{N}{2} \int_0^\beta d\tau [J_0 m^2(\tau) + Jq_3^2(\tau) - Jq_1^2 - Jq_2^2(\tau)] - \ln(\Lambda) \right] \quad (11)$$

$$\Lambda = \int D(\phi^* \phi) \exp \left[\int_0^\beta \left\{ A_\Gamma(\tau) + \sum_i h_i(\xi, \eta) S_i^z(\tau) \right\} \right] \quad (12)$$

$$h_i(\xi, \eta) = J_0 m(\tau) + J(q_3(\tau) - q_1(\tau)) \xi_i + J(q_3(\tau) - q_2(\tau)) \eta_i$$

- ✓ Transformada de Fourier;
- ✓ Integral em (τ) substituída por somatório sobre frequências de Matsubara;

$$\Lambda = \int D(\phi^* \phi) \exp \sum_{n=0}^{\infty} \phi_i^*(\omega) [i\omega + \beta\mu + \beta h_i \sigma_z + \beta \Gamma \sigma_x] \phi_i(\omega) \quad (13)$$

$$G^{-1}(\tau|h_i) = [i\omega + \beta\mu + \beta h_i \sigma_z + \beta \Gamma \sigma_x]$$

- ✓ Integral sobre campos de Grassmann \rightarrow determinante da matriz G^{-1}

No limite termodinâmico, as integrais funcionais sobre $q_n(\tau)$ e $m(\tau)$ podem ser resolvidas pelo método do ponto de sela.

$$q_1(\tau) = \frac{1}{N} \sum_i \langle \xi_i S_i^z(\tau) \rangle \quad (14)$$

$$q_2(\tau) = \frac{1}{N} \sum_i \langle \eta_i S_i^z(\tau) \rangle \quad (15)$$

$$m(\tau) = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^z(\tau) \rangle \quad (16)$$

Energia Livre

$$f = -\frac{1}{\beta N} \ln Z_N \quad (17)$$

$$f = -\frac{1}{\beta} \left\{ -\frac{1}{2}(q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 + m^2) - \ln 2[\cosh(\beta\mu) + \cosh(\beta\sqrt{\Delta})] \right\} \quad (18)$$

- ✓ Mínimo da Energia Livre ($\frac{\partial}{\partial m}\beta f = 0$)

Magnetização por Spin

$$m = \sqrt{J_0}M \quad (19)$$

$$M = \left\langle \left\langle \frac{\sinh \beta\sqrt{\Delta}}{\cosh \beta\mu + \cosh \beta\sqrt{\Delta}} \right\rangle \right\rangle \quad (20)$$

✓ Mínimo da Energia Livre $\left(\frac{\partial}{\partial q}\beta f = 0\right)$

Parâmetro de Ordem Vidro de Spin

$$q_1 = i\sqrt{J}Q_1 \quad \text{e} \quad q_2 = i\sqrt{J}Q_2 \quad (21)$$

$$Q_1 = \left\langle \left\langle \frac{\xi \sinh \beta\sqrt{\Delta}}{\cosh \beta\mu + \cosh \beta\sqrt{\Delta}} \right\rangle \right\rangle \quad (22)$$

$$Q_2 = \left\langle \left\langle \frac{\eta \sinh \beta\sqrt{\Delta}}{\cosh \beta\mu + \cosh \beta\sqrt{\Delta}} \right\rangle \right\rangle \quad (23)$$

$$q_3 = \sqrt{J}(Q_1 + Q_2)$$

Quantidades termodinâmicas

Substituindo valores na equação da energia livre

$$f = -\frac{1}{\beta} \left\{ -\frac{1}{2} \left[(i\sqrt{J}Q_1)^2 + (i\sqrt{J}Q_2)^2 + (\sqrt{J}(Q_1 + Q_2))^2 + (\sqrt{J_0}M)^2 \right] - \ln 2 [\cosh(\beta\mu) + \cosh(\beta\sqrt{\Delta})] \right\} \quad (24)$$

Assumindo que $Q_1 = Q_2 = Q$

$$\beta f = \frac{1}{2} [2JQ^2 + J_0M^2] - \left\langle \left\langle \ln 2 [\cosh(\beta\mu) + \cosh(\beta\sqrt{\Delta})] \right\rangle \right\rangle$$

Potencial Grande Canônico

$$\Omega = -\frac{1}{N\beta} \langle\langle \ln Z \rangle\rangle$$

$$\beta\Omega = \frac{\beta J_0}{2} m^2 + \beta J q^2 - \beta\mu - \langle\langle \ln 2K(\xi, \eta) \rangle\rangle \quad (25)$$

$$K(\xi, \eta) = \cosh(\beta\mu) + \cosh \beta \sqrt{[J_0 m + J(\xi + \eta)q]^2 + \Gamma^2}$$

- ✓ $\langle\langle \dots \rangle\rangle$ representa a média sobre as variáveis aleatórias ξ e η

Distribuição de Probabilidade Bimodal

$$P(x_i) = \frac{1}{2} [\delta(x_i - 1) + \delta(x_i + 1)] \quad (26)$$

Distribuição de Probabilidade Gaussiana

$$P(x_i) = \frac{1}{2\pi} \exp\left[\frac{-x_i^2}{2}\right] \quad (27)$$

Outras quantidades termodinâmicas podem ser derivadas a partir de Ω , como a entropia (S) e o número de ocupação média (ν), respectivamente

$$S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T} \quad \text{e} \quad \nu = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}$$

Entropia

$$S = \ln 2 + \left\langle \left\langle \ln \left[\cosh \beta \mu + \cosh \beta \sqrt{\Delta} \right] \right\rangle \right\rangle \quad (28)$$
$$- \beta \left\langle \left\langle \frac{\mu \sinh(\beta \mu) + \sqrt{\Delta} \sinh(\beta \sqrt{\Delta})}{\cosh(\beta \mu) + \cosh(\beta \sqrt{\Delta})} \right\rangle \right\rangle$$

Ocupação média

$$\nu = 1 + \left\langle \left\langle \frac{\beta \sinh \beta \mu}{\cosh \beta \mu + \cosh \beta \sqrt{\Delta}} \right\rangle \right\rangle \quad (29)$$

Resultados

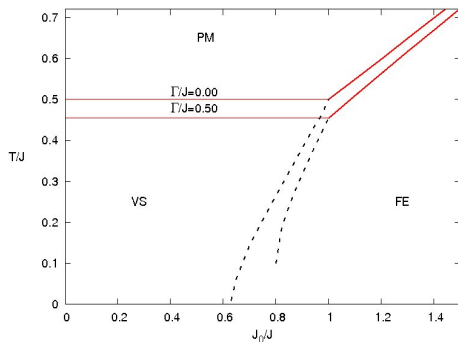


Figura: Diagrama de fase T/J versus J_0/J para $\mu/J = 0$ com dois valores de Γ/J : 0 e 0.5

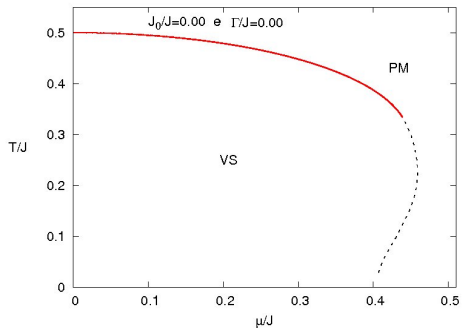


Figura: Diagrama de fase T/J versus μ/J para $\Gamma/J = 0$ e $J_0/J = 0$

Resultados

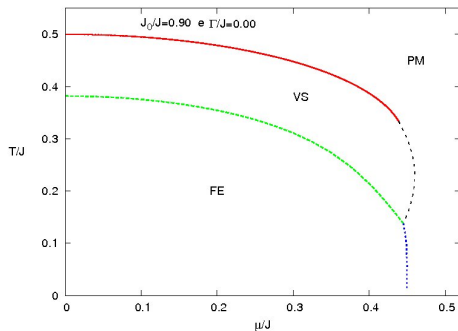


Figura: Diagrama de fase T/J versus μ/J para $\Gamma/J = 0$ e $J_0/J = 0.9$

Bibliografia

- ✓ Fischer; K. H., Hertz; J. A., *Spin Glasses*, Cambridge, 1991.
- ✓ Magalhães; S. G., Zimmer; F. M., Morais; C. V., *Fermionic van Hemmen spin glass model with a transverse field*, Physics Letters A, v.374, p.3354-3560, 2010.
- ✓ Negele; J. W., Orland; H., *Quantum Many-Particle Systems*, Addison-Wesley Publishing Company, USA, 1988.
- ✓ Schupper; N., Shnerb; N. M., *Inverse melting and inverse freezing: A spin model*, Physical Review E, v.72, p.046107, 2005.
- ✓ Zimmer; F. M., Berger; I.C., Magalhães; S. G., *Inverse freezing in the van Hemmen Fermionic Ising spin glass with a transverse magnetic field*, Physics Letters A, v.376, p.566-572, 2012.