

ESTUDO DO MODELO VIDRO DE SPIN FEMIÔNICO COM POTENCIAL QUÍMICO E FORMAÇÃO DE PARES.

ALEXSANDRA PEREIRA DOS SANTOS¹; CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR²

¹*Universidade Federal de Pelotas – xapereira09@gmail.com*

²*Universidade Federal de Pelotas – carlosavjr@gmail.com*

1. INTRODUÇÃO

Na década de 70 estudos experimentais levaram a descoberta de um novo ordenamento magnético o vidro de spin (VS), caracterizado por uma desordem congelada dos spins para baixas temperaturas (o spin adquire uma posição aleatória na qual se mantém com o passar do tempo, abaixo da temperatura crítica – T_c), e frustração (competição entre as interações de spins), (FISHER E HERTZ,1991). Dado a descoberta do ordenamento VS, vários modelos teóricos foram propostos para descrever este problema. Entre estes podemos destacar os modelos propostos por EDWARDS E ANDERSON,1975, SHERRINGTON E KIRKPATRICK,1975 (formalismo clássico) e por BRAY e MOORE,1980 (formalismo quântico). Particularmente, no formalismo quântico para o problema VS, os momentos magnéticos são escritos em termos de operadores de spin quânticos.

THEUMANN E GUSMÃO,1984 propuseram uma versão fermiônica do modelo vidro de spin Ising. Neste modelo, os spin são escritos em termos de operadores fermiônicos que atuam sobre um espaço de quatro estados por sítio, dois deles não magnéticos $|00\rangle$ e $|\uparrow\downarrow\rangle$, e dois estados magnéticos $|\uparrow 0\rangle$, $|0 \downarrow\rangle$. Particularmente, o modelo vidro de spin Ising fermiônico permite variações no potencial químico (μ) (FELDMANN E OPPERMANN,1984). No semi-preenchimento dos sítios, o número médio de ocupação por sítio é igual a um. Quando o potencial químico é ajustado, a ocupação nos sítios também se modifica, o que pode causar novos efeitos ao sistema. MAGALHÃES E THEUMANN,1999 estudaram o modelo vidro de spin Ising fermiônico adicionando um termo de interação de pareamento BCS (John Bardeen, Leon Cooper, Robert Schieffer), referente a fase supercondutora (SC). Este estudo teve como motivação a existência de supercondutores de alta temperatura crítica (como o $LaSrCuO$) que em diferentes dopagens pode apresentar as fases supercondutora, vidro de spin, ou antiferromagnética, (CHOU, BELK, KASTNERE e BIRGENEAU,1995, SCALAPINO,1995). A fase SC é caracterizada por mudanças na fase elétrica do material. A transição de fase é caracterizada por uma Temperatura crítica na qual acima o material se encontra na fase normal (que pode ser de isolante, semi-condutor,etc.) e abaixo na fase SC, passando a conduzir corrente elétrica com resistência quase nula. (OSTERMANN E PUREUR,2005).

Portanto o presente trabalho busca analisar os efeitos do potencial químico em um sistema onde há competição entre as fases vidro de spin, paramagnética e formação de pares de Cooper.

2. METODOLOGIA

O modelo utilizado é dado pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} \hat{S}_j^z \hat{S}_i^z - \frac{g}{N} \sum_{ij} \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{j\downarrow}$$

com $\hat{S}_i^z = \frac{1}{2} [\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}]$; $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$.

O primeiro termo do Hamiltoniano refere-se a desordem do sistema, o segundo a formação de pares de Cooper (pareamento BCS local).

O tratamento analítico do problema segue em detalhes nas referências MAGALHÃES E ZIMMER, 2005 e MAGALHÃES E MORAIS, 2008. A partir do tratamento termodinâmico, se obtém uma equação para a energia livre do sistema, bem como para os parâmetros de ordem envolvidos.

A energia livre é dada por:

$$\beta f = \frac{(\beta J)^2}{2} (p^2 - q^2) + \beta g \eta^2 - \ln(2) - \mu - \int Dz \ln(K(z)); \text{ onde: } \int Dz = \int \left(\frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \right) e^{-\frac{z^2}{2}}$$

Com parâmetros de ordem:

$$q = \int Dz \left(\frac{e^\gamma \operatorname{senh}(h(z))}{K(z)} \right)^2; p = \int Dz \frac{e^\gamma \cosh(h(z))}{K(z)}; \eta = \frac{1}{2} \int Dz \frac{\operatorname{senh}(\beta \sqrt{\Xi})}{K(z)} \cdot \frac{g \eta}{\sqrt{\Xi}}$$

com:

$$h(z) = \beta z \sqrt{(2q)}; K(z) = \cosh(\beta \sqrt{\Xi}) + e^\gamma \cosh(h(z)); \Xi = (g \eta)^2 + \mu^2; \gamma = (\beta J)^2 (p - q)$$

O parâmetro de ordem q corresponde a fase vidro de spin, o parâmetro p está relacionado a ocupação dos sítios, e o parâmetro η corresponde a formação de pares de Cooper (pareamento BCS); g é o elemento de favorecimento da formação de pares de Cooper. O potencial químico é dado por μ . E o β é $1/T$, onde T é a temperatura. Adotaremos $J = 1$ para os cálculos numéricos.

O tratamento numérico utilizamos para o cálculo do zero das funções foi o método de iteração linear, e para o cálculo das integrais o método dos trapézios, através do programa Fortran.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

As resoluções numéricas das equações dos parâmetros de ordem e energia livre são realizadas, e o comportamento dos mesmos é obtido. Como uma consequência, diagramas de fase são construídos. Isto permite identificar as transições de fase e avaliar o efeito que a temperatura T , ajuste de potencial químico μ , e o favorecimento da formação de pares de Cooper g sobre o sistema. Este pode se encontrar em três fases magnéticas distintas, paramagnética (PM), vidro de spin (VS), ou formação de pares de Cooper (PC).

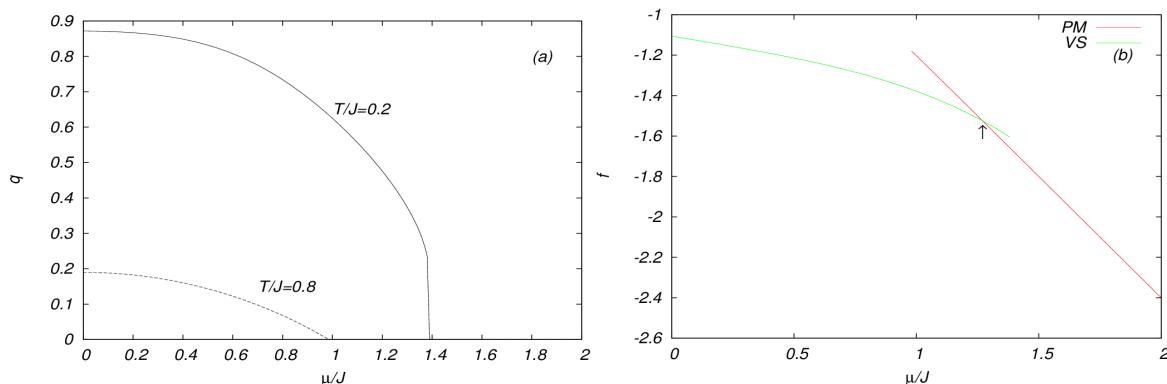


Fig.1: (a): comportamento do parâmetro de ordem q em função de μ/J , para $T/J=0.2$ e $T/J=0.8$. (b): comportamento da energia livre f , em função de μ .

Na Fig.1(a) temos o comportamento do parâmetro de ordem q como função de μ para dois valores de T . Quando $T/J=0.8$ o parâmetro de ordem q é contínuo. Sendo assim podemos marcar através deste mesmo a transição de fase. Mas para $T/J=0.2$ q é descontínuo, o que dificulta uma localização precisa da transição de fase. Por outro lado, a localização da transição de fase pode ser obtida a partir do comportamento da energia livre. Fig.1(b) mostra o comportamento da energia livre como função do potencial químico. A linha vermelha representa a energia livre da solução paramagnética (PM), e a linha verde a da solução vidro de spin (VS). Para determinar o valor de μ onde ocorre a transição de fase, compara-se as energias livres solução PM e VS. A transição ocorre no ponto de intersecção entre ambas e esta indicada pela seta no gráfico.

Através dos diagramas podemos observar como o potencial químico μ e o elemento g de formação de pares de Cooper atuam sobre o sistema. Particularmente, a Fig. 2 mostra transições contínuas representadas por linhas cheias. Em adição, mostra transições de primeira ordem, localizadas a partir do comportamento da energia livre, representadas por linhas tracejadas.

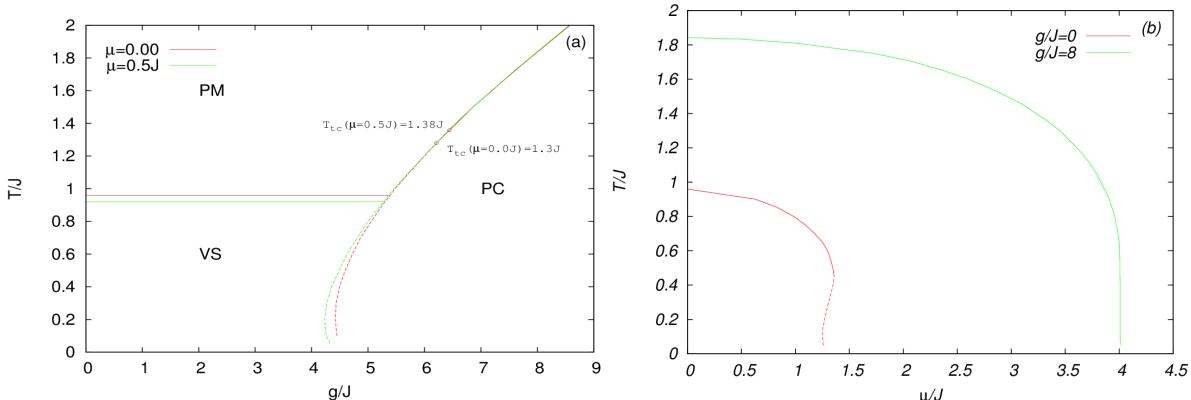


Fig2: (a) Diagrama de fases T/J em função de g/J para dois valores distintos de potencial químico $\mu=0.0, 0.5J$. (b) Diagrama de fases T/J em função do μ/J para dois valores diferentes de $g/J=0, 0.8J$. Na figura, linhas cheias e tracejadas correspondem a uma transição de segunda e primeira ordem, respectivamente.

Na Fig.2(a) é analisado o comportamento do sistema para $\mu=0.0$. Para baixos valores de g/J , ocorre a transição de fase VS/PM com aumento de T/J . Para T/J baixo, o aumento de g/J leva ao aparecimento de uma transição de primeira ordem que separa as fases VS/PC. Entre $0.96 < T/J < 1.3$, ocorre uma transição PM/PC de primeira ordem com aumento de g/J . Em $T=1.3J$ é localizado o ponto tricrítico que separa as transições de primeira e segunda ordem. Para $T/J > 1.3$, ocorre uma transição PM/PC de segunda ordem com aumento de g/J . Os resultados indicam que o aumento do μ/J diminui a temperatura de transição T_f entre as fases VS/PM quando g/J baixo. Particularmente, o aumento de μ/J para $0.5J$ não produz efeito considerável na região em que ocorre a fase PC. Em adição, o ponto tricrítico é localizado em $T=1.38J$.

Na Fig.2(b), foi analisado o comportamento do sistema para diferentes valores de g . A linha vermelha representa $g=0$, abaixo desta linha temos a fase VS e acima a fase PM. É observado nesta figura que o aumento do potencial introduz uma transição de primeira ordem entre as fases VS/PM (MAGALHÃES, MORAIS, ZIMMER, 2008). A linha verde representa $g=8$, abaixo desta linha temos a fase de formação de pares, e acima a fase paramagnética. A transição entre as fases PC/PM é sempre de segunda ordem.

4. CONCLUSÕES

Este trabalho teve como objetivo analisar resultados conhecidos na literatura acerca da competição entre as fases supercondutora e vidro de spin. Em adição, este trabalho busca fornecer novas informações sobre essa relação. Para tal, o modelo vidro de spin fermiônico com formação de pares foi utilizado. Com isso, a forma com grandezas físicas como potencial químico, temperatura e favorecimento da formação de pares atuam sobre no sistema puderam ser investigadas. Estudos mais aprofundados ainda serão feitos, como a análise do comportamento do sistema para valores mais altos de μ .

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BRAY, A.J.; MOORE, M.A. Replica theory of quantum spin glasses. **J. Phys. C: Solid St. Phys.** v.13,n.60, p.L655-L660, 1980.
- CHOU,F.C; BELK,N.R.; KASTNER, M.A.; BIRGENEAU. Spin-Glass Behavior $\text{La}_{1.96}\text{Sr}_{0.04}\text{CuO}_4$.**R.J. Phys. Rev. Lett.**, v.75, p.2204, 1995.
- EDWARDS,S.F.; ANDERSON,P.W. Theory of spin glasses. **J. Phys. F. Metal Phys.** v.5,n.5, p.965,1975.
- FELDMANN,H.; OPPERMANN,R.Random magnetic interactions and spin glass order competing with superconductivity: Interference os the quantum Parisi phase. **Eur. Phys. J. B10**, p.429-445,1999.
- FISHER,K.H. ; HERTZ, J.A. **Spin Glasses**, Cambridge,1991.
- SHERRINGTON, D.; KIRKPATRICK, S. Phys.Solvable Model of a Spin-Glass. **Phys. Rev. Let.** v.35, p.1792, 1975.
- MAGALHÃES, S.G; ZIMMER, F.M. Fermionic Ising glasses in magnetic transverse field with BCS pairing interaction. **The European Physical Journal B 43**, p.187-193, 2005.
- MAGALHÃES,S. G.; MORAIS,C. V. ZIMMER, F.M. Role of the transverse field in inverse freezing in the fermionic Ising spin-glass model. **Physical Review B 77**,p.134422,2008.
- OSTERMANN, F.; PUREUR, P. **Supercondutividade – Temas Atuais de Física** - SBF – Editora Livraria da Física, 2005.
- SCALAPINO, D.J. The Case For $d_{x^2-y^2}$ Pairing in the Cuprate Superconductores. **Physics Reports 250**, p. 329-365, 1995
- THEUMANN, A.; SCHMIDT, A. A.; MAGALHÃES,S. G.The Ising spin glass in a transverse field revisited. Results of two fermionic models. **Physica A**,v.311, p.498-506, 2002.
- THEUMANN, A.;GUSMÃO M.V. Quantum Ising spin-glass. **Phys. Letters A**, v.105,n.6, p. 311-314, 1984.