

MODELO VIDRO DE SPIN DE ISING FERMIÔNICO E EFEITOS DO POTENCIAL QUÍMICO NA FASE DE FORMAÇÃO DE PARESALEXSANDRA PEREIRA DOS SANTOS¹; CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR²¹Universidade Federal de Pelotas – xapereira09@gmail.com²Universidade Federal de Pelotas – carlosavjr@gmail.com**1. INTRODUÇÃO**

O vidro de spin – VS é um ordenamento magnético caracterizado por frustrações (competição entre interações de spins) e uma desordem congelada dos spins para temperaturas abaixo da temperatura crítica – T_c , onde os spins adquirem uma posição aleatória e a mantem com o passar do tempo. (FISHER E HERTZ, 1991). Com o passar dos anos desde a sua descoberta, inúmeros modelos teóricos foram propostos para descrever e estudar o problema Vidro de Spin. O modelo utilizado para a descrição e estudo do problema VS neste trabalho é uma versão fermiônica do modelo vidro de spin Ising, onde os spins são descritos em termos de operadores fermiônicos, os quais podem se encontrar em quatro estados distintos por sítio, dois não magnéticos $|00\rangle$ e $|\uparrow\downarrow\rangle$ e dois estados magnéticos $|\uparrow 0\rangle$, $|0 \downarrow\rangle$. Este modelo foi proposto por THEUMANN E GUSMÃO, 1984.

A utilização deste modelo nos permite analisar variações do potencial químico – μ (FELDMANN E OPPERMANN, 1984), e como estas variações modificam a ocupação dos sítios, com isso surgem novos efeitos sobre o sistema a serem avaliados. MAGALHÃES E THEUMANN, 1999 adicionaram ao modelo vidro de spin de Ising fermiônico um termo de interação de pareamento BCS (John Bardeen, Leon Cooper, Robert Schieffer), referente a fase supercondutora – SC. Relacionado a esta interação temos um parâmetro – g , o qual é um elemento de favorecimento da formação de pares. 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, KASTNER e BIRGENEAU, 1995, SCALAPINO, 1995).

O presente trabalho busca analisar os efeitos do potencial químico e do parâmetro de favorecimento – g em um sistema onde há competição entre as fases vidro de spin, paramagnética e de formação de pares.

2. METODOLOGIA

O modelo utilizado é dado pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \frac{g}{N} \sum_{ij} \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{j\downarrow} \quad \text{com} \quad \hat{S}_i^z = \frac{1}{2} [n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}], n_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}.$$

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 o potencial termodinâmico do sistema, que é dada por:

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

Extremizando a equação acima em relação aos parâmetros de ordem de interesse obtemos analiticamente as seguintes equações para os parâmetros de ordem:

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

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; g é o elemento de favorecimento da formação de pares. 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

Com as resoluções numéricas dos parâmetros de ordem e potencial termodinâmico, obtemos os seus comportamentos. Através dos quais podemos construir diagramas de fases. Estes diagramas nos permite analisar as transições de fase, avaliando o efeito da temperatura, potencial químico, e do favorecimento da formação de pares individualmente sobre o sistema. O modelo utilizado prevê três fases distintas nas quais o sistema pode se encontrar a fase *vidro de spin* – VS, *formação de pares* – FP, e *paramagnética* – PM.

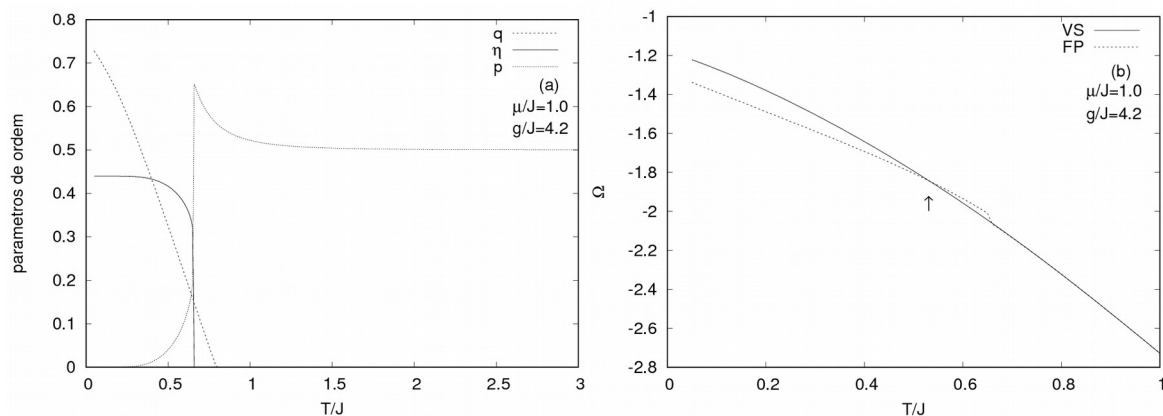


Fig.1: (a): comportamento dos parâmetros de ordem q , p e η em função da Temperatura, para $\mu/J = 1.0$ e $g/J = 4.2$. (b): o comportamento do potencial termodinâmico – Ω , em função da temperatura para $\mu/J = 1.0$ e $g/J = 4.2$.

Na Fig.1 (a), temos o comportamento dos parâmetros de ordem q , p e η como função da temperatura – T/J . Para $\mu/J=1.0$ e $g/J = 4.2$ o parâmetro de ordem q é contínuo. Como consequência, as transição de fase VS/PM são marcadas através deste parâmetro, que se dão no valor da temperatura para a qual q vai à zero. Em adição, devido a descontinuidade do parâmetro de ordem η , as transições FP/VS são obtidas através da análise do comportamento do potencial termodinâmico. Na Fig.1 (b), temos o comportamento do potencial termodinâmico – Ω em função de T/J para $\mu/J = 1.0$ e $g/J = 4.2$. Podemos observar que para um mesmo valor de potencial químico teremos duas soluções distintas. A linha cheia representa o Ω da solução vidro de spin (VS) e a linha tracejada representa o da solução com formação de pares (FP). Determinamos o valor de T/J no qual ocorre a transição de fase comparando os potenciais termodinâmicos das soluções

FP e VS. A transição ocorre no ponto de intersecção entre ambas, indicado no gráfico pela seta. Com a análise dos parâmetros de ordem e do potencial termodinâmico, diagramas de fases de fase T/J x μ/J para diferentes valores de g/J podem ser construídos. Por meio destes, pode-se observar a atuação do potencial químico – μ/J e do elemento de favorecimento de formação de pares – g/J sobre o sistema.

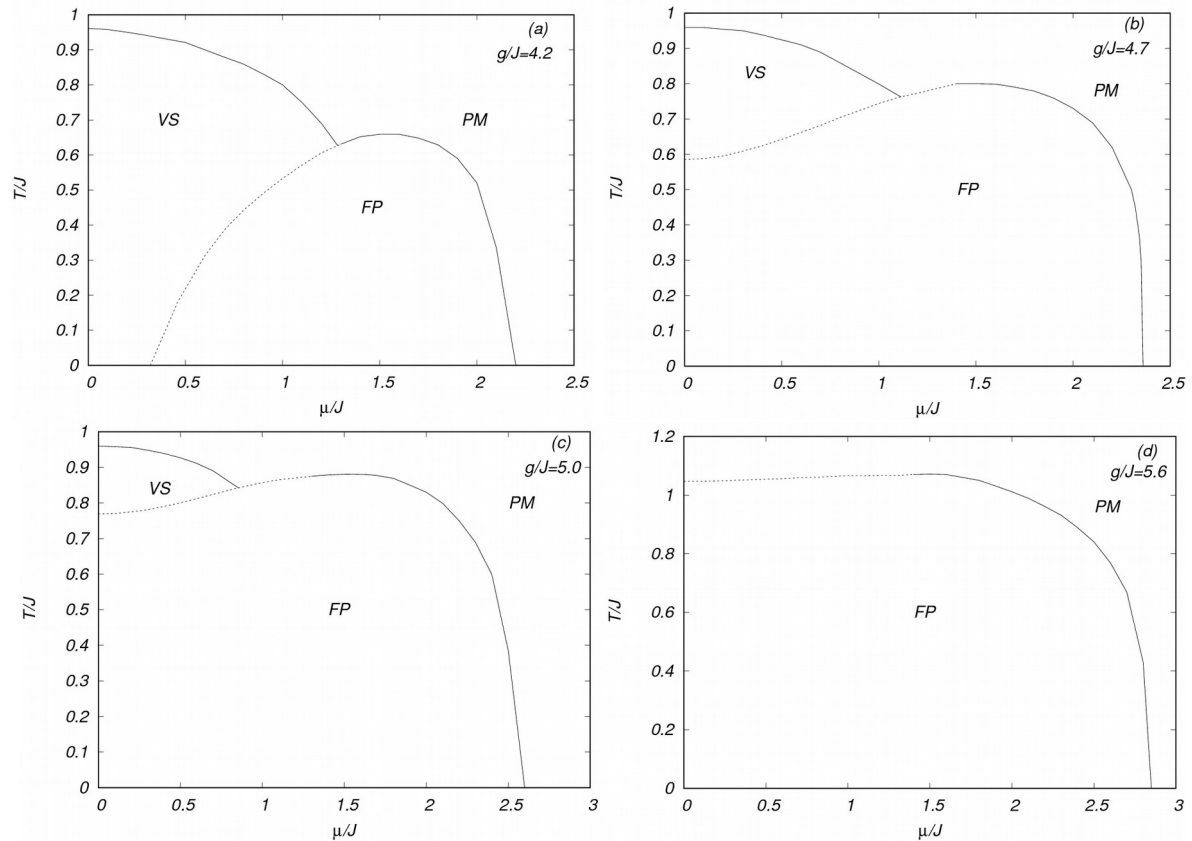


Fig.2: Diagramas de fase T/J em função de μ/J , em (a) para $g/J = 5.6$, (b) para $g/J=5.0$, (c) para $g=4.7$ e (d) para $g/J=4.2$. Nas figuras, linhas cheias e tracejadas correspondem a transições de segunda e primeira ordem, respectivamente.

Na Fig.2 (a) temos o diagrama de fase T/J x μ/J para $g/J=4.2$ no qual temos a fase VS para baixos valores de μ/J , com a fase VS sendo substituída pela fase PM quando T/J é aumentado o bastante. Para valores intermediários de potencial químico, surge a fase de FP em temperaturas mais baixas. Por outro lado, quando μ/J tem seu valor intensificado, a fase de FP é totalmente suprimida. Na Fig.2 (b) o diagrama é construído para $g/J=4.7$. Neste, podemos observar que a região da fase VS tem uma diminuição considerável, sendo encontrada agora somente para valores baixos de μ/J e intermediários de T/J . A fase de FP aumenta, ocorrendo para valores baixos e intermediários de T/J e μ/J . Já a fase PM continua a surgir para valores baixos de μ/J com T/J alto, e aparece para μ/J elevados mesmo com baixo T/J . Na Fig. 2 (c) temos o diagrama para $g/J=5.0$. Aqui a fase VS tem sua região diminuída ainda mais, ocorrendo para valores elevados de T/J e baixos de μ/J . Na Fig. 2 (d) temos o diagrama para $g/J=5.6$ onde podemos observar que a fase VS é totalmente suprimida, e a fase FP sendo agora encontrada para valores baixos e intermediários de T/J e μ/J . Particularmente, a fase PM é encontrada para valores altos de T/J e/ou quando a intensidade de μ/J é alta o bastante.

Podemos observar que as transições de fase entre as fases VS e FP são sempre de primeira ordem, as transições entre as fases VS e PM são de segunda ordem, e as transições entre as fases FP e PM podem ser primeira ou segunda

ordem dependendo da região de μ/J . E que quanto maior o valor do g/J menor é a região da fase VS até esta ser totalmente suprimida para o valor de $g/J=5.6$.

4. CONCLUSÕES

Este trabalho teve como objetivo analisar e compreender a competição entre as fases vidro de spin, paramagnética e supercondutora. Para isto a utilização do Modelo vidro de spin de Ising fermiônico com potencial químico e formação de pares foi utilizado. Observamos que para valores elevados de T/J e μ/J o sistema não apresenta as fases de FP e VS, apresentando apenas a fase PM. Isto se dá ao fato de que para elevado T/J as flutuações térmicas dominam levando o sistema para uma fase não magnética. Por outro lado, para alto μ/J ocorre a dupla ocupação dos sítios, o que também ocasiona em uma fase não magnética. O parâmetro g/J também está relacionado com a fase de formação de pares, onde há favorecimento da dupla ocupação da ocupação em um dado sítio, sem que necessariamente se altere o número médio de ocupações por sítio. Já o potencial químico pode alterar o número médio de ocupação dos sítios. Como consequência, pode levar o sistema a fases não magnéticas, diminuindo e suprimindo totalmente a região da fase magnética VS e/ou FP.

Como possibilidade de trabalhos futuros, pode-se propor uma análise em que o valor da ocupação dos sítios é fixado tal que o valor de potencial químico correspondente a esta ocupação é calculado. Com isso, é verificada a dependência da ocupação com o potencial químico e com o parâmetro g/J .

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.

FELDMANN, H.; OPPERMANN, R. Random magnetic interactions and spin glass order competing with superconductivity: Interference of the quantum Parisi phase. **Eur. Phys. J. B10**, p.429-445, 1999.

FISHER, K.H. ; HERTZ, J.A. **Spin Glasses**, Cambridge, 1991.

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.

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.; GUSMÃO M.V. Quantum Ising spin-glass. **Phys. Letters A**, v.105,n.6, p. 311-314, 1984.