

ESTUDO DO NÚMERO DE OCUPAÇÃO NO MODELO VIDRO DE SPIN FERMIÔNICO

ALEXSANDRA PEREIRA DOS SANTOS¹; FÁBIO MALLMANN ZIMMER²;
CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR³

¹Universidade Federal de Pelotas – xapereira09@gmail.com

²Universidade de Santa Maria – fabiozimmer@gmail.com

³ Universidade Federal de Pelotas – carlosavjr@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

O estudo de sistemas magnéticos tem grande relevância tanto na física quanto em aplicações tecnológicas (CALLISTER, 2002). Um interesse particular surge quando estes sistemas apresentam diluição e desordem nas interações. Isso pode levar a um estado conhecido como vidro de spin VS, onde os momentos magnéticos congelam-se em direções totalmente aleatórias. O estudo desta fase magnética ainda possui vários desafios, principalmente na sua descrição devido às dificuldades relacionadas a presença de desordem. Como exemplo, podemos citar o composto $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$, que apresenta o estado VS em concentrações/dopagens intermediárias de Ho, entretanto não sabe-se ainda se essa fase persiste para concentrações mais baixas. Portanto, o estudo de modelos capazes de considerar interações desordenadas em diferentes níveis de concentrações venha a ser extremamente importante. Sendo assim o presente trabalho estuda o modelo fermiônico de vidro de spin de Ising com número médio de ocupação n por sítio fixo, onde o potencial químico é calculado afim de garantir esta condição. Este modelo já tem sido extensivamente empregado na caracterização do $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$, como por exemplo na descrição da susceptibilidade não linear desses sistemas (MAGALHÃES, MORAIS, ZIMMER, LAZO E NOBRE, 2017). Neste, 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 $|\uparrow0\rangle$, $|0\downarrow\rangle$ (THEUMANN E GUSMÃO, 1984.). Particularmente, dadas as características citadas do modelo, efeitos de concentração na fase VS podem ser verificados. Para isso, um paralelo entre o número médio de ocupação n e a concentração/dopagem deve ser considerado. Como consequência, os parâmetros de ordem e o potencial químico para valores fixos de ocupação são calculados e os efeitos da concentração sobre a fase VS são analisados.

2. METODOLOGIA

O modelo utilizado é dado pelo seguinte Hamiltoniano:

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

com

O primeiro termo do Hamiltoniano refere-se a desordem do sistema. O tratamento analítico do problema segue em detalhes nas referências FELDMANN E OPPERMANN, 2000 e MAGALHÃES E MORAIS, 2008. A partir do tratamento termodinâmico, se obtém uma equação para o potencial termodinâmico do sistema, que é dada por:

$$\beta \Omega(\bar{q}, q) = \frac{(\beta J)^2}{2} (\bar{q}^2 - q^2) - \beta \mu - \int Dz \ln(2K(z))$$

$$K(z) = p + \int Dw \cosh(h(z, w)); h(z, w) = \beta J \sqrt{2q + \frac{\Delta^2}{J^2}} z + \beta J \sqrt{2(\bar{q} - q)} w$$

onde:

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

$$q = \int Dz \left[\frac{Dw se h(z, w)}{K(z)} \right]^2; \bar{q} = \int Dz \left[\frac{1}{K(z)} \int Dw \{ \cosh h(z, w) \} \right],$$

$$\int Dz = \int \left(\frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \right) e^{-\frac{z^2}{2}} e \int Dw = \int \left(\frac{dw}{\sqrt{2\pi}} \right) e^{-\frac{w^2}{2}}$$

onde:

O parâmetro de ordem q corresponde a fase vidro de spin, o parâmetro \bar{q} está relacionado a ocupação média dos sítios de acordo com $\bar{q} = 1 - \coth(\beta\mu)(n-1)$ (FELDMANN E OPPERMANN, 2000). O potencial químico é dado por μ , β é $1/T$, onde T é a temperatura. Adotaremos $J = 1$ para os cálculos numéricos. Os métodos numéricos para o cálculo do zero das funções foi Newton-Raphson, e para o cálculo das integrais Romberg. Os métodos foram implementados através de programa Fortran.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A solução numérica do conjunto de equações para os parâmetros de ordem e ocupação média permite realizar uma análise detalhada do comportamento do sistema. Por exemplo, com as resoluções numéricas dos parâmetros de ordem, seus comportamentos são obtidos, através dos quais podemos avaliar sua dependência com a temperatura para diferentes valores de ocupações médias. A partir disso, o diagrama de fases da temperatura versus a ocupação média pode ser construído. Este diagrama nos permite analisar a transição de fase, avaliando os efeitos do número médio de ocupação fixo e da variação de temperatura.

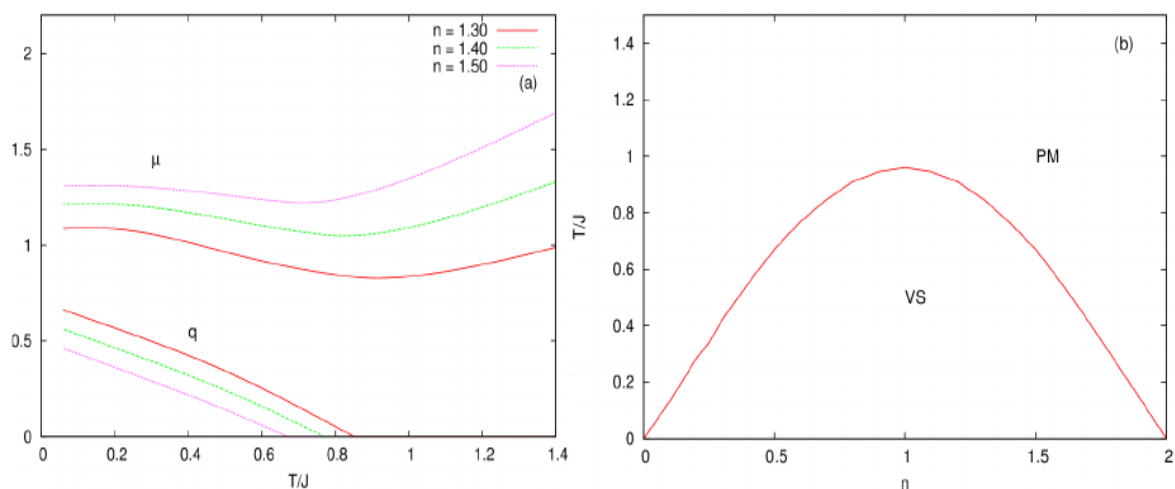


Figura 1: a) comportamento dos parâmetros de ordem (q e μ) $\times T/J$ para valores fixo de n . b) diagrama de fase $T/J \times$ número de ocupação, onde os resultados em $T/J=0$ são extrapolações.

Na Fig. 1(a) temos o comportamento do parâmetro de ordem q e do potencial químico μ como função da temperatura T/J . A transição de fase vidro de

spin/paramagnética (VS/PM) é marcada através do parâmetro q , que se dá no valor da temperatura de congelamento T_f (temperatura de transição) para a qual q deixa de ser zero. Neste caso, a fase paramagnética é encontrada em temperaturas elevadas ($q=0$) e o estado VS aparece em temperaturas baixas ($q>0$). Em adição, podemos observar que o potencial químico μ varia de acordo com a temperatura a fim de garantir o n fixo. Aqui fica evidente que o potencial químico deve ser ajustado a cada temperatura para manter a ocupação média constante.

Na Fig.1(b) o diagrama de fases é obtido. Para valores entre $0 \leq n < 1$, a temperatura de congelamento T_f aumenta até atingir o seu valor máximo para $n = 1$ (o chamado semi-preenchimento). Para valores entre $1 < n \leq 2$ a temperatura T_f decresce com o aumento de n . É possível explicar o comportamento de T_f da seguinte forma: na região de n baixo, a configuração prevalente é aquela de sítios não ocupados ($|00\rangle$). Com o aumento gradual de n , o sistema pode ser levado ao semi-preenchimento ($n=1$), onde o T_f é máximo. Caso o n seja grande o bastante, a configuração prevalente é a de dupla ocupação ($|\uparrow\downarrow\rangle$). Seguindo o princípio de Exclusão de Pauling dois férmions não podem ter a mesma configuração por sítio. Sítios não ocupados possuem momento magnético nulo, levando o sistema à uma fase PM. A soma do momento magnético de sítios duplamente ocupados também é nula, o que leva o sistema novamente a uma fase PM. Esta interpretação pode explicar a existência da fase PM nas regiões em torno de $n = 0$ e $n = 2$ para T/J baixo. O aumento de T/J introduz flutuações térmicas que podem levar o sistema da fase VS para fase PM. Particularmente, efeitos de flutuações térmicas podem ser menos ou mais relevantes de acordo com a intensidade de ocupação dos sítios. Como consequência, a natureza da fase PM é alterada para certos regimes de n e T/J .

4. CONCLUSÕES

Uma consequência da utilização deste modelo é observar como os parâmetros de ordem e o potencial químico se comportam afim de manter um número médio de ocupação fixo. Em adição, através das análises dos parâmetros de ordem, um diagrama de fases temperatura T vs n é obtido. Observa-se no diagrama T vs n uma transição da fase paramagnética (PM) para a vidro de spin (VS) com um máximo para certo valor de ocupação. Este resultado se encontra em parcial concordância com resultados obtidos para sistemas de $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ temperatura vs concentração x vistos na literatura, (QUILLIAM, MENG E KYCIA,2012).

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

CALLISTER, W. D. **Ciência e Engenharia de Materiais: Uma Introdução**. John Wiley & Sons, Inc., 2002.

FELDMANN,H.;OPPERMANN,R. Replica symmetry breaking solution for the fermionic Ising spin-glass and the Ghatak–Sherrington model. **J. Phys. A: Math. Gen.** **33**,p 1325, 2000.

MAGALHÃES,S. G.; MORAIS,C. V. ZIMMER, F.M., LAZO M. J., and NOBRE F. D. Nonlinear susceptibility of a quantum spin glass under uniform transverse and random longitudinal magnetic fields. **Physical Review B** **95**, p.064201,2017.



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.

QUILLIAM, J. A.; MENG, S.; KYCIA, J. B. Experimental phase diagram and dynamics of a dilute dipolar-coupled Ising system. **Physical Review B**, v.85, p.184415, 2012

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