MODELO VIDRO DE SPIN SHERRINGTON-KIRKPATRICK E CAMPOS ALEATÓRIOS: ESTUDO DA SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA NÃO LINEAR E DO CALOR ESPECÍFICO

VINICIUS FONSECA HERNANDES[1]; CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JÚNIOR[3]

[1]*Universidade Federal de Pelotas – viniciusfhernandes@gmail.com*
[3]*Universidade Federal de Pelotas – carlosavjr@gmail.com*

1. INTRODUÇÃO

Neste trabalho é analisado o modelo Vidro de Spin (VS) Sherrington-Kirkpatrick (SK) na presença de campos aleatórios (CAs). O Vidro de Spin é uma fase magnética onde a direção dos momentos magnéticos é aleatoriamente congelada no tempo em um estado de baixas temperaturas. Para obter VS é necessário que haja competição entre as diferentes interações entre os momentos magnéticos (frustração) e que as mesmas sejam pelo menos parcialmente aleatórias (desordem) (NISHIMORI, 2001). No modelo SK, a aleatoriedade ocorre por meio da interação de troca J_{ij} entre pares de spin (i,j), com J_{ij} sendo aleatoriamente e independentemente distribuído a cada vínculo (i,j). Como consequência, o modelo SK pode apresentar a fase VS. Já a presença de CAs em modelos de spin (como o SK) pode ser pensada como uma forma adicional de desordem, mas não fonte adicional de frustração (SOARES, NOBRE, DE ALMEIDA, 1994). Os VS e os CAs são importantes exemplos de sistemas desordenados, e a relação entre estas duas fontes se encontra sob constante investigação. Particularmente, a análise das quantidades físicas como a susceptibilidade magnética não linear χ_3 e o calor específico C_m tem sido importante na caracterização de sistemas que podem apresentar essa relação, como por exemplo, o $LiHo_xY_{1-x}F_4$ (MORAIS et al., 2016). Portanto, o presente trabalho visa analisar o comportamento da χ_3 e o C_m no modelo SK na presença de CAs.

2. METODOLOGIA

O modelo SK com campo aleatório é descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H=-\sum_{(i,j)} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i ,$$

onde os spins podem assumir os valores S = +1, -1, o somatório (i,j) é sobre dois pares de sítios interagentes. Particularmente, o acoplamento de spin-spin J_{ij} e o campo magnético h_i são variáveis aleatórias que seguem distribuições Gaussianas independentes:

$$P(J_{ij})=[N/(2\pi J^2)]^{1/2}\exp[-N/(2J^2)J_{ij}^2] \quad \text{e} \quad P(h_i)=[1/(2\pi\Delta^2)]^{1/2}\exp[-(1/(2\Delta^2))h_i^2] \quad ,$$

onde N é o número de partículas e J e Δ são larguras das respectivas distribuições.

A partir do tratamento termodinâmico do modelo VS SK, é possível obter a energia livre do sistema (*f*), dada por

$$-\beta[f]=\frac{\beta^2 J^2}{4}(1-q)^2-\beta J_0 m^2+\int Dz\log^2(\cosh(\beta H(z))) \quad ,$$

onde $Dz=dz\frac{e^{\frac{-z^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}}$ e $H(z)=J\sqrt{q+\left(\frac{\Delta}{J}\right)^2}z+J_0 m$.

Os parâmetros de ordem (POs) *m* e *q*, os quais caracterizam respectivamente a magnetização e o ordenamento magnético VS, são obtidos por meio da extremização da energia *f* em relação a *m* e q, ou

$$\frac{\partial f}{\partial m}=0 \quad ; \quad \frac{\partial f}{\partial q}=0 \quad ,$$

e são descritos pelas equações:

$$m=\int Dz\tanh(\beta H(z)) \quad \text{e} \quad q=\int Dz\tanh^2(\beta H(z)) \quad .$$

As equações dos POs podem ser pensadas como um sistema de equações não-lineares acopladas, as quais podem ser resolvidas por métodos numéricos como o método do trapézio para o cálculo das integrais presentes nas equações e os métodos de iteração linear, onde

$$x=x_0-f(x_0) \quad ,$$

ou Newton-Raphson, onde

$$x=x_0-\frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \quad ,$$

para o cálculo de zero de funções. Especificamente. no método de Newton-Raphson, para um sistema de equações não-lineares, é necessário utilizar a matriz Jacobiana formada pelas derivadas parciais das componentes de f(x). A partir do cálculo da entropia (*s*), dada por

$$s=\beta^2\left(\frac{\partial f}{\partial\beta}\right) \quad ,$$

a energia interna (*u*= *f* + *Ts*) é obtida

$$u=\frac{-J_0 m^2}{2}+\frac{J^2(1-q^2)}{2T}+hm \quad .$$

Com o valor dos POs em função da temperatura e da energia interna é possível calcular χ_3 e C_m. Especificamente:

$$\chi_3=\frac{\partial^3 m}{\partial h^3} \quad \text{e} \quad C_m=\frac{\partial u}{\partial T} \quad .$$

Todos os cálculos foram realizados através de algoritmos utilizando a linguagem de programação Fortran 95. Particularmente, os cálculos numéricos foram realizados com J = 1, J_0 = 0 e campo h nulo.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na Figura 1 é possível ver o comportamento do parâmetro de ordem *q* para diferentes valores de Δ/J. Os resultados encontrados coincidem com aqueles presentes na literatura (MAGALHÃES, MORAIS, NOBRE, 2011).

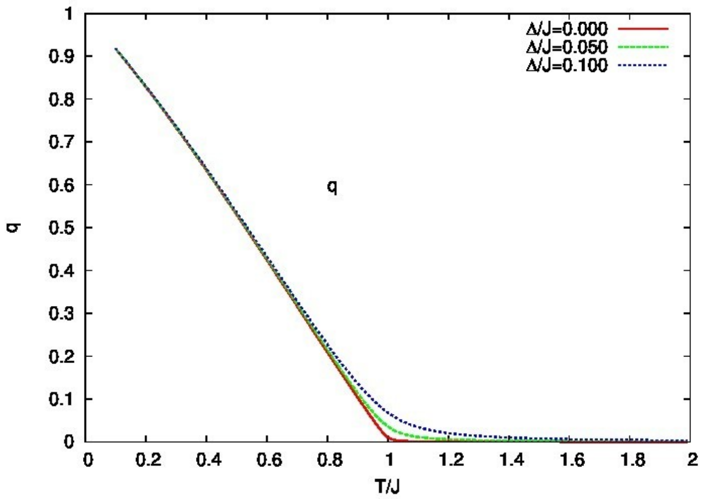

Figura 1. Parâmetro de ordem q como função de temperatura para diversos valores de Δ/J.

Já na Figura 2(a) e 2(b) é possível observar o comportamento, respectivamente, do calor específico e da susceptibilidade magnética não-linear para diferentes valores de Δ/J.

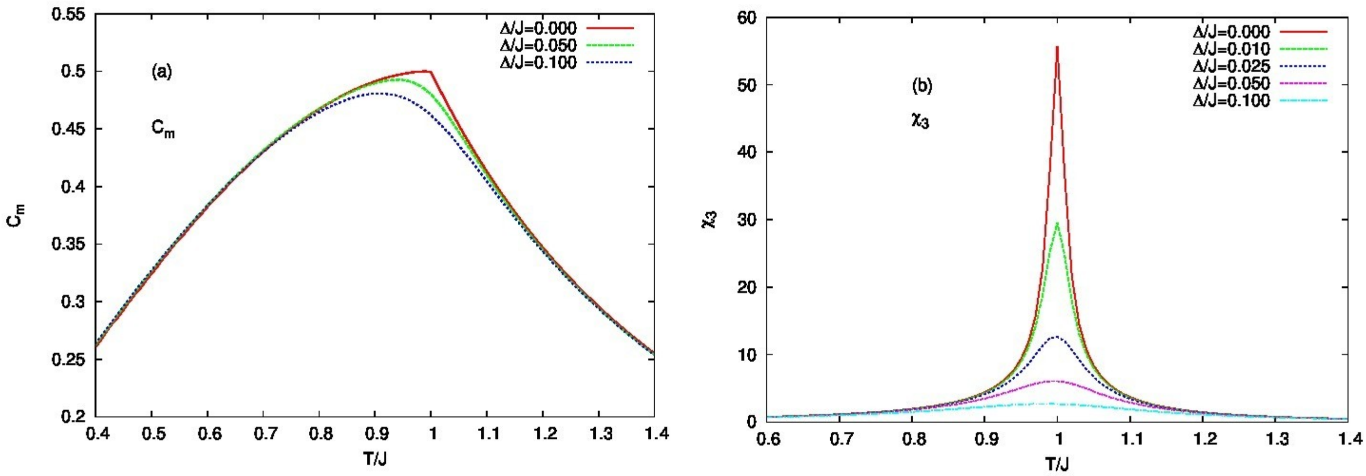

Figura 2. (a) Calor específico magnético e (b) susceptibilidade magnética não linear obtidos por meio das derivadas numéricas de *m* e *u*, ambos como função da temperatura para diversos valores de Δ.

Analisando os resultados obtidos na Figura 2(a) é possível observar que ao se aumentar Δ/J, a descontinuidade vista no C_m e localizada em T_f dá lugar a um máximo. Particularmente, ocorre uma diminuição do máximo quando os valores de Δ/J aumentam, conforme observado no gráfico. Comportamento semelhante ocorre para a divergência presente no gráfico de χ_3. A divergência desaparece e dá local a pontos de máximo, que se tornam cada vez menores com aumento de Δ/J.

4. CONCLUSÕES

A partir dos resultados encontrados, é possível observar que o PO Vidro de Spin (q) é induzido pelo campo aleatório, uma vez que para $\Delta > 0$, $q > 0$. Como consequência, não é possível determinar a temperatura na qual ocorre uma transição de fase, uma vez que o PO q nunca vai a zero (condição que define T_f). Com objetivo de melhorar o entendimento acerca da localização do T_f para $\Delta > 0$, o C_m e χ_3 são analisados. Para $\Delta = 0$, a transição de fase ocorre no pico presente em C_m e na divergência presente em χ_3. Conforme aumenta-se o valor de Δ, tanto o pico de C_m quanto a divergência de χ_3 tornam-se pontos de máximo. No entanto, ainda não é claro se esses pontos de máximo correspondem à temperatura de transição de fase T_f.

Nesse sentido, como proposta de trabalho futuro, pretende-se utilizar o conceito condição de estabilidade da solução SK (linha de Almeida e Thouless) para determinar T_f para valores de $\Delta > 0$.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

NISHIMORI, H. **Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing An Introduction**. Claredon Press, Oxford, 2001.

SOARES, R. F.; NOBRE, F. D.; DE ALMEIDA, J. R. L. Effects of a Gaussian random field in the Sherrington-Kirkpatrick spin glass. **Physical Review B**, v. 50, 6151, 1994.

FISCHER, K. H.; HERTZ, J. A. **Spin glasses**. Cambridge Universiy Press, 1991.

MORAIS, C. V.; ZIMMER, F. M.; LAZO, M. J.; MAGALHÃES, S. G.; NOBRE, F. D. Spin-glass phase transition and behavior of nonlinear susceptibility in the Sherrington-Kirkpatrick model with random fields. **Physical Review B**, v. 93, p. 224206, 2016.

MAGALHÃES, S. G.; MORAIS, C. A.; NOBRE, F. D. One-step replica-symmetry-breaking solution of the Sherrington–Kirkpatrick model under a Gaussian random field. **Journal of Statistical Mechanics**, 2011.

Agradecimentos: Programa de Educação Tutorial (PET) - MEC.