MODELO VIDRO DE SPIN ISING HOPFIELD EM TEORIA DE CAMPO MÉDIO

ARTHUR KRINDGES[1]; CARLOS ALBERTO V. DE MORAIS JUNIOR[2]

[1]*Departamento de Física, Universidade Federal de Pelotas – arthurkrindges@gmail.com*
[2]*Departamento de Física, Universidade Federal de Pelotas – carlosavjr@gmail.com*

1. INTRODUÇÃO

Uma das áreas mais fundamentadas da física é matéria condensada, nela se discute as propriedade da matéria. Como subárea da matéria condensada, ênfase tem sido dada nos fenômenos associados as transições de fase da matéria (CALLISTER, 2002). Especificamente, sistemas como CuMg (FISCHER, HERTZ, 1991) que podem apresentar uma transição de fase Vidro de Spin (VS) para Paramagnética (PM).

A fase VS apresenta propriedade únicas e é caracterizada pela desordem e frustração. Por ponto de vista teórico, tal fase é comumente descrita por modelos de Ising, com adição de desordem (NISHIMORI, 2001). Para a caracterização VS o modelo Ising Hopfield tem sido empregado (HOPFIELD, 1982). A partir do tratamento teórico, este modelo permite ajustar a desordem e competição das interações. Consequente, os contornos de fase podem ser analisados em regimes de desordem trivial e de alta desordem.

Para assinalar a fase VS, o comportamento da suscetibilidade linear e não-linear podem ser analisados. Portanto, o presente trabalho propõe a obtenção desta quantidade do ponto de vista numérico. Para realizar esse objetivo, os parâmetros de ordem (AMIT, 1987), (NISHIMORI, 2001) são calculados numericamente. Para o cálculo numérico, os métodos de Newton e trapézio são empregados. Como consequência, uma análise das suscetibilidades linear e não linear pode ser feita com regime de alta desordem e frustração.

2. METODOLOGIA

O Modelo Hopfield é definido pelo Hamiltoniano da equação (1)

$$H=\frac{-1}{2}\sum_{i\neq j} J_{ij} S_i S_j . \tag{1}$$

Os momentos de spin(S) são representados por dois estado, spin positivo(+1) ou spin negativo(-1) e pela regra de Hebb, em que a interação é dada por

$$J_{ij}=\frac{1}{N}\sum_{\mu=1}^{p} \xi_i^{\mu}\xi_j^{\mu} . \tag{2}$$

Por meio de teoria de campo médio, as equações dos parâmetros de ordem do sistema (3) e (4) são obtidas (NISHIMORI, 2001).

$$m=\int Dz[\xi \tanh\beta(\sqrt{\alpha r}+m\xi+h)]=\int Dz \tanh\beta(\sqrt{\alpha r}\, z+m+h), \tag{3}$$

$$q=\int Dz[\tanh^2\beta(\sqrt{\alpha r}\, z+m\xi+h)]=\int Dz \tanh^2\beta(\sqrt{\alpha r}\, z+m+h), \tag{4}$$

$$r=\frac{q}{(1-\beta+\beta q)^2}. \tag{5}$$

A equação (6) que descreve a energia livre de Helmholtz:

$$\begin{aligned} f=\frac{1}{2}m^2+\frac{\alpha}{2\beta}\left(\log(1-\beta+\beta q)-\frac{\beta q}{1-\beta+\beta q}\right)+\frac{\alpha\beta}{2}r(1-q) \\ -T\int Dz[\log 2\cosh\beta(\sqrt{\alpha r}\,z+m+h)]. \end{aligned} \tag{6}$$

Para a resolução do sistema das duas equações acopladas (3) e (4), métodos numéricos foram utilizados (WILLIAM H. P et al, 1992). Particularmente, o método de Newton para resolução de sistemas não-lineares foi empregado, que consiste em aproximar o sistema não-linear(F(x)) em um sistema linear(L(x)) através da matriz jacobiana(J(x))

$$L(x)=F(a)+J(a)(x-a). \tag{7}$$

Para os cálculos das integrais gaussianas, foi utilizado o método do trapézio

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,dx=\lim_{dx\to 0}\sum_{x=-\infty}^{+\infty}\frac{[f(x+dx)+f(x)]dx}{2}. \tag{8}$$

Os métodos foram implementados em linguagem FORTRAN. Com o cálculo dos parâmetros de ordem foi possível determinar o comportamento da suscetibilidades dadas pelas equações (9) (FISCHER, HERTZ, 1991),

$$\chi_1=\lim_{h\to 0}\frac{\partial m}{\partial h}, \qquad \chi_3=\lim_{h\to 0}\frac{-1}{3!}\frac{\partial^3 m}{\partial h^3}, \tag{9}$$

onde h é o campo externo. Para a resolução das derivadas foram utilizadas as fórmulas de diferença centrada de quarta ordem, sendo elas:

$$f'(x_0)\approx\frac{-f_2+8f_1-8f_{-1}+f_{-2}}{12h}, \tag{10}$$

$$f^{(3)}(x_0)\approx\frac{-f_3+8f_2-13f_1+13f_{-1}-8f_{-2}+f_{-3}}{8h^3}. \tag{11}$$

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Como resultado dos métodos numéricos empregados na metodologia a figura 1 é obtida. O painel (a) mostra o comportamento dos parâmetros de ordem q e m como função da temperatura T/J para α=0.15. É observado que o parâmetro m=0 para qualquer T/J e o parâmetro q≠0 somente para valores abaixo de $T/J=T_f$ */J,* indicando uma transição de fase vidro de spin/paramagnética (VS/PM).

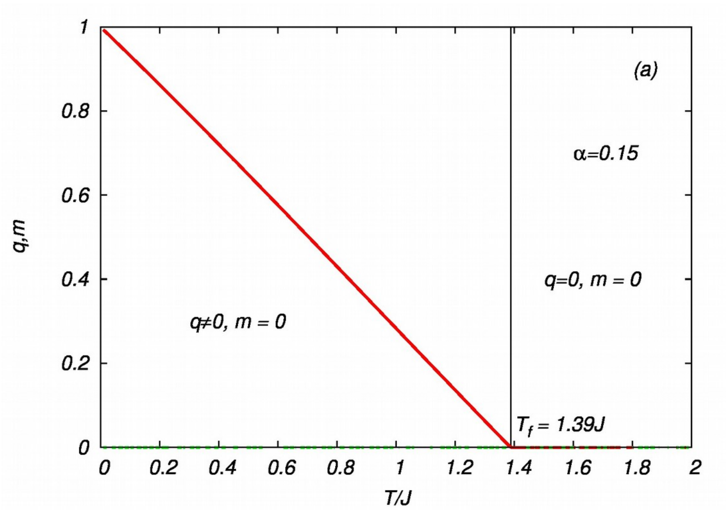

Figura 1(a): Comportamento dos parâmetros q e m em função de T/J para α=0.15

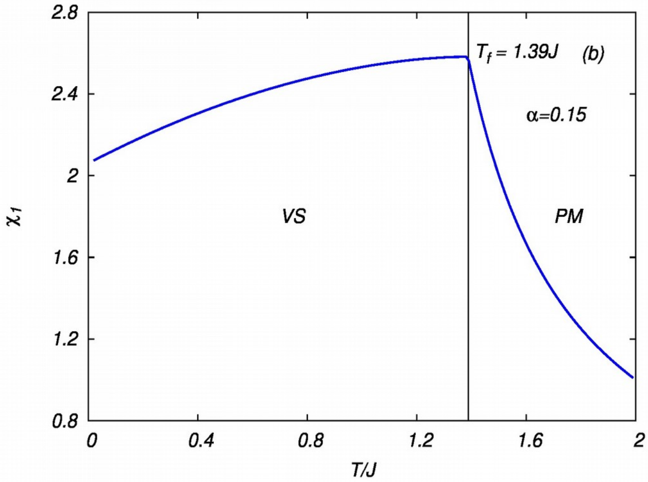

Figura 1(b): Suscetibilidade magnética em função de T/J para α=0.15

No painel (b) o comportamento da susceptibilidade linear χ_1 como função de T/J para α=0.15 é mostrado. É importante notar uma descontinuidade no comportamento da suscetibilidade em T/J=T_f/J.

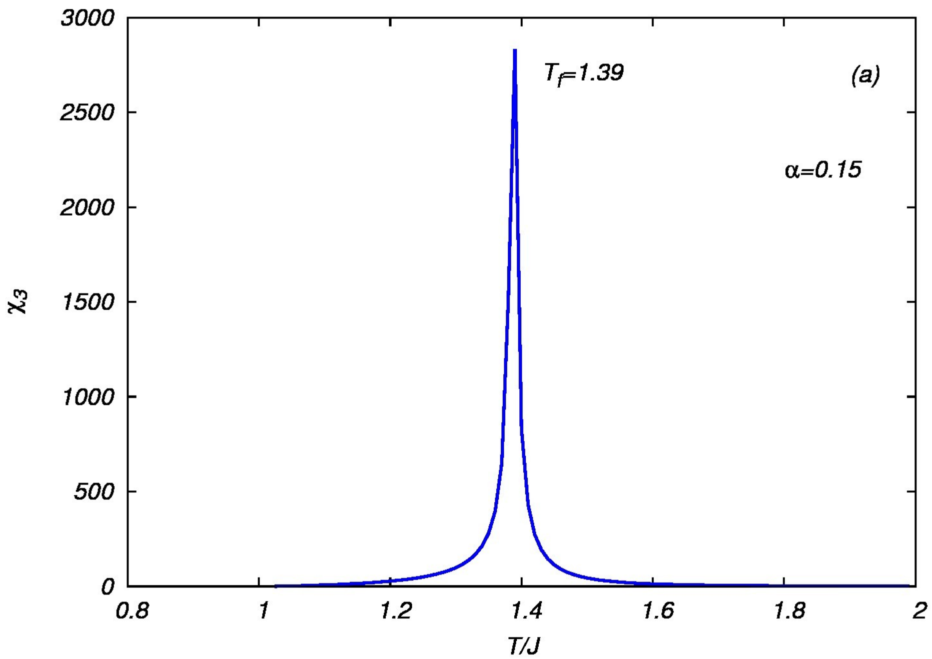

Figura 2: Suscetibilidade não-linear em função de T/J para α=0.15

Na Fig. 2, é destacado o comportamento susceptibilidade não-linear χ_3 como função de T/J para α=0.15. Neste resultado, é observada uma divergência caracterizando a transição de fase. Na Fig. 3, o diagrama de fases T/J como função de α é mostrado. Neste, as linhas contínua e segmentada separam as fases VS/PM e Ferromagnética(FE)/VS, respectivamente. É observado no gráfico os valores que m e q assumem dependendo das coordenadas T/J e α. Para $\alpha>\alpha_c$, não são mais encontradas soluções maiores do que zero para o parâmetro m. A linha vertical mostra o corte em α=0.15, destacando a transição VS/PM.

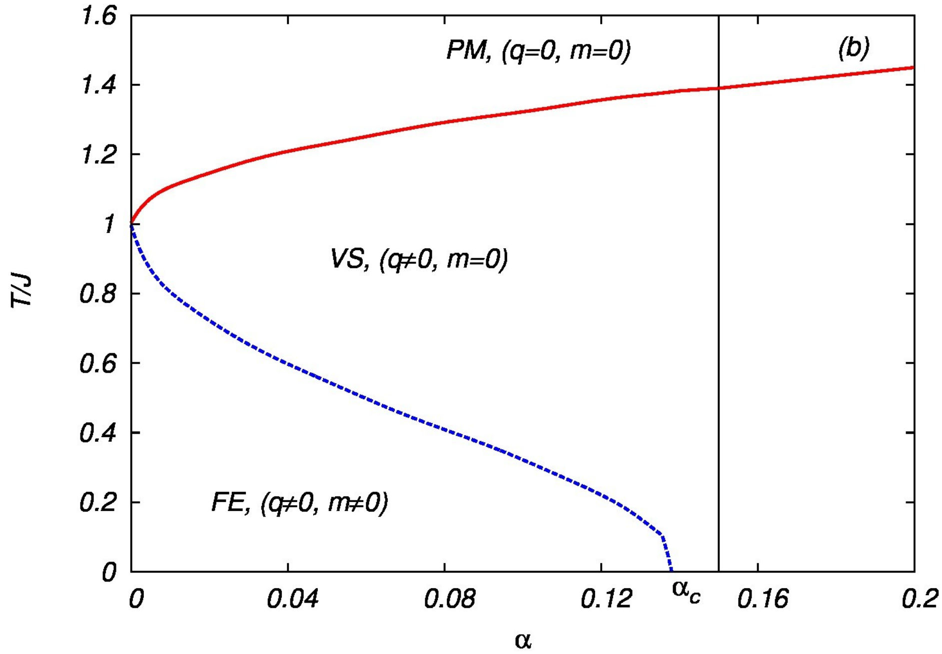

Figura 3: Diagrama de T/J em função de α, com linha segmentada separando FM/SG e linha contínua separando SG/PM. Para $\alpha>\alpha_c$, não são mais encontradas soluções para o parâmetro m.

4. CONCLUSÕES

A partir dos resultados, é observado que χ_1 e χ_3 apresentam uma descontinuidade e uma divergência respectivamente, o que é característico de transições vidros de spin. Particularmente, os resultados foram obtidos em α grande, que corresponde a um regime de alta desordem e frustração.

Como próximo trabalho, a descrição do comportamento da suscetibilidade em baixo α e uma análise detalhada do comportamento da energia livre de Helmholtz.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

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

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

AMIT, D. J.; GUTFREUND, H.; SOMPOLINSKY, H. Statistical mechanics of neural networks near saturation. **Annals of Physics,** v.173(1), p.30-67, 1987.

HOPFIELD, J.J. Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities. **Proc. Nat. Acad. Sci. USA**, v.79(8), p.2554-2558, 1982.

NISHIMORI, H. **Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing An Introduction.** International Series of Monographs on Physics No.111, Oxford University Press, 2001.

WILLIAM H. P, SAUL A. T., WILLIAM T. V., BRIAN P. F., **Numerical Recipes in-Fortran 77**. **The Art of Scientific Computing**. Second Edition, 1992.