

MODELO VIDRO DE SPIN ISING HOPFIELD E O REGIME DE BAIXA FRUSTRAÇÃO

ARTHUR KRINDGES¹; CARLOS ALBERTO V. DE MORAIS JUNIOR²

¹Departamento de Física, Universidade Federal de Pelotas – arthurkrindges@gmail.com

²Departamento de Física, Universidade Federal de Pelotas – carlosavjr@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

Na área de física da matéria condensada, os fenômenos associados a transições de fase e propriedades magnéticas são amplamente estudados. Tais análises geraram grandes avanços tecnológicos (CALLISTER, 2002). Dentro dessa área, há preocupação em se estudar sistemas como CuMg que apresentam um tipo muito peculiar de ordenamento, a chamada fase Vidro de Spin (VS)(FISCHER, HERTZ, 1991). Análises teóricas desse ordenamento são feitas normalmente por modelos de Ising com a introdução de desordem (NISHIMORI, 2001).

A fase Vidro de Spin apresenta propriedades únicas (FISCHER, HERTZ, 1991). Uma possível abordagem teórica para descrição dessa fase ocorre por meio do emprego do modelo de Ising Hopfield. Com isso, o presente trabalho tem por objetivo a análise numérica do modelo Ising Hopfield e a obtenção do comportamento de grandezas físicas a energia livre de Helmholtz.

2. METODOLOGIA

O modelo de Ising Hopfield é descrito por um Hamiltoniano (H) que consiste em um termo de interação de pares de sítios(S), tendo eles estados positivos(+1) ou negativo(-1). No modelo de Ising Hopfield, o termo de interação assume valores segundo a regra de Hebb para interações sinápticas (NISHIMORI, 2001). A equação que o Hamiltoniano do modelo de Ising Hopfield é:

$$H = \frac{-1}{2N} \sum_{\mu} \left(\sum_i^N \xi_i^{\mu} S_i \right)^2 + h \sum_i S_i. \quad (1)$$

Com o uso de teoria de campo médio e simetria de réplicas, é obtida a energia livre de Helmholtz (AMIT, 1987) dada por:

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

com m e q sendo os parâmetros de ordem, h o campo externo, $\beta = 1/T$ e α é o parâmetro de controle da frustração do sistema.

Fazendo uso do método da minimização da energia é possível chegar a expressões para os parâmetros de ordem m, q e r

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

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

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

Para resolver os parâmetros de ordem é necessário o uso de métodos numéricos, entre eles o método de Newton para zero de função, método de integrais e métodos de derivada.

O método de Newton consiste em linearizar uma função não-linear através da matriz jacobiana.

$$L(x) = F(a) + J(a)(x - a), \quad (6)$$

onde L é zero e F são as funções dos parâmetros de ordem m e q , tal que

$$\begin{aligned} F_m &= m - \int Dz \tanh \beta(\sqrt{\alpha r} z + m + h), \\ F_q &= q - \int Dz \tanh^2 \beta(\sqrt{\alpha r} z + m + h). \end{aligned} \quad (7)$$

Na equação (7), o J é a matriz jacobiana de F . Fazendo uso de uma solução tentativa, os valores de m e q para diferentes temperaturas e α são obtidos.

Para o cálculo das integrais o método de quadratura de Gauss-Legendre com 64 coeficientes

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^{64} w_i f(\bar{x}_i) (b - a) / 2 \quad (8)$$

foi empregado. Nas derivadas, foi utilizado o método de diferenças finitas centrada de quarta ordem para primeira derivada e método de segunda ordem para derivadas terceiras.

Fazendo o uso da linguagem *FORTRAN* foi possível aplicar os métodos e obter o comportamento dos parâmetros de ordem para diferentes α e T/J . Com isso, foi possível a análise da energia livre de Helmholtz para diferentes graus de frustração e da descrição da susceptibilidade magnética linear dada por:

$$\chi_1 = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial m}{\partial h}. \quad (9)$$

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Com base nos métodos numéricos empregados foi possível a obtenção de comportamentos dos parâmetros de ordem m e q , *energia livre e susceptibilidade magnética* para baixa e alta frustração. Na figura 1 temos o comportamento dos parâmetros de ordem m e q em função de T/J em baixa frustração ($\alpha=0.08$). Podemos notar que os parâmetros m e q sofre uma descontinuidade em $T/J=0.4$, onde o m acaba por se tornar zero e q assume um decaimento linear, zerando em $T/J \approx 1.3$.

Pela figura 2 temos o comportamento de m e q em função de T/J para alta frustração ($\alpha=0.15$). Vemos que para qualquer valor de T/J m é zero e q assume um declínio linear zerando em $T/J=1.39$.

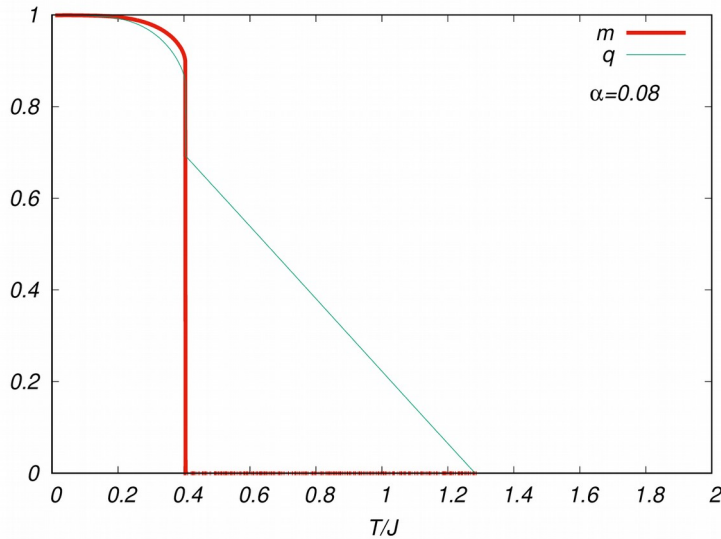


Figura 1: Comportamento dos parâmetros m e q em função de T/J para $\alpha=0.08$

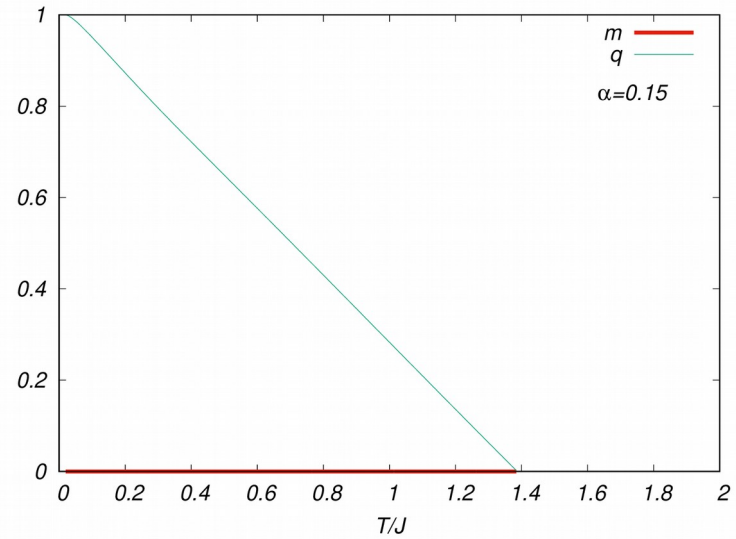


Figura 2: Comportamento dos parâmetros m e q em função de T/J para $\alpha=0.15$

Para um melhor entendimento do significado dos parâmetros de ordem m , q e seu comportamento, foi feita a análise da energia livre de Helmholtz para baixa e alta frustração.

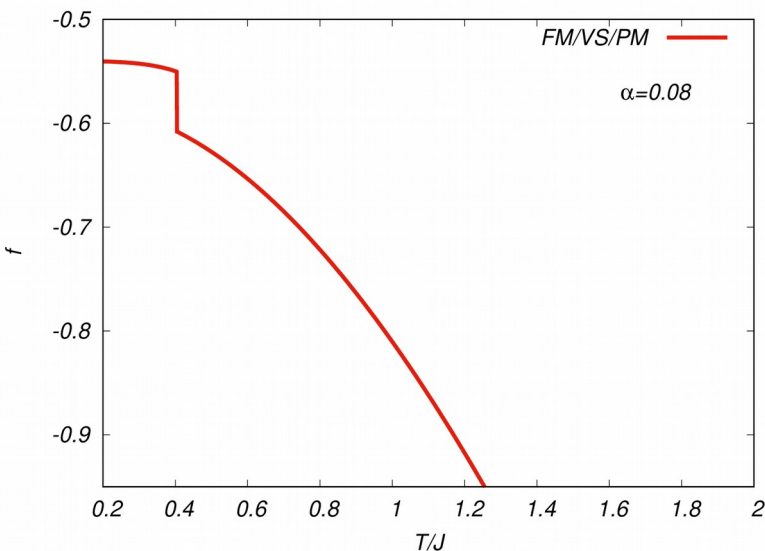


Figura 3: Energia livre de Helmholtz em função de T/J para $\alpha=0.08$

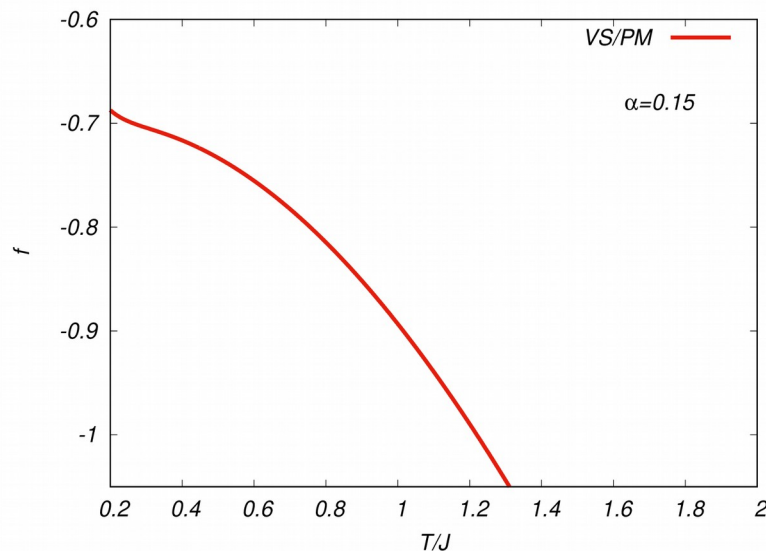


Figura 4: Energia livre de Helmholtz em função de T/J para $\alpha=0.15$

Com isso a figura 3 mostra a energia livre em função de T/J para baixa frustração, podemos notar uma descontinuidade em $T/J=0.4$.

Na figura 4 temos a energia livre para alta frustração, vemos que não existe descontinuidades. Como podemos ver nas figuras 5(a) e 5(b) temos a susceptibilidade linear para baixa e alta frustração respectivamente, onde apresentam descontinuidade nos valores de T/J onde algum parâmetro se torna zero.

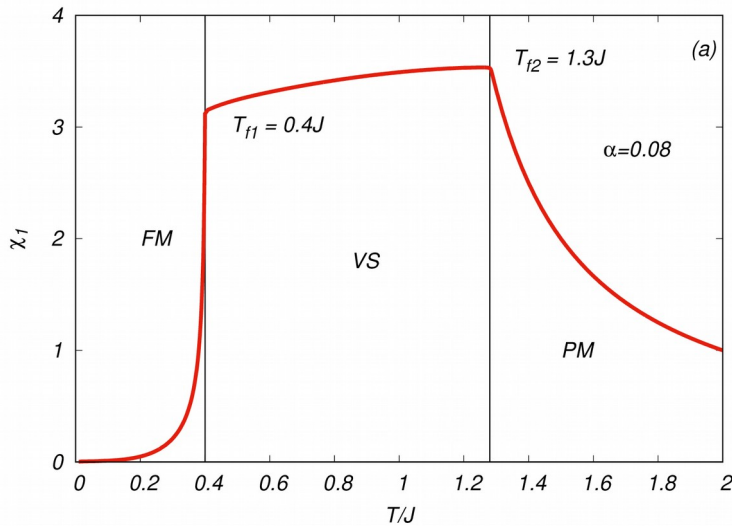


Figura 5(a): Susceptibilidade magnética linear para $\alpha=0.08$

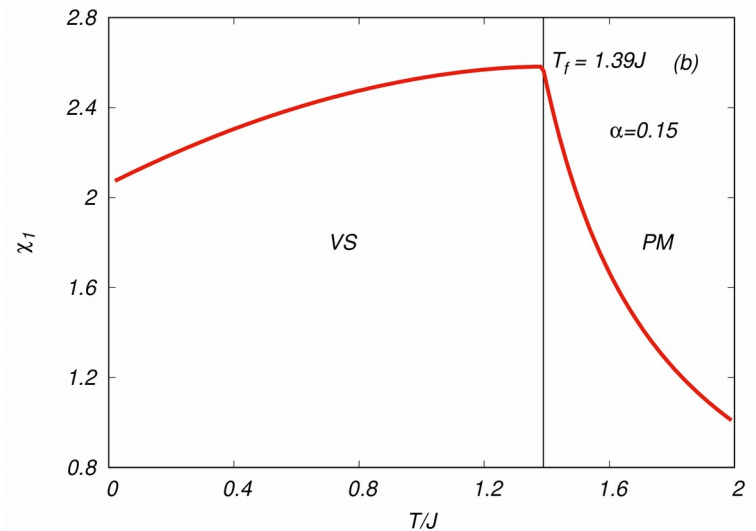


Figura 5(b): Susceptibilidade magnética linear para $\alpha=0.15$

4. CONCLUSÕES

Com a utilização das ferramentas numéricas empregadas podemos concluir que o modelo de Ising Hopfield apresenta dois tipos de transição de fase. Para baixo $\alpha=0.08$, pode-se observar uma transição de primeira ordem onde o parâmetro m , bem como a energia livre, apresentam uma descontinuidade aproximadamente em $T/J=0.4$. Nesse valor de temperatura, é sugerida uma transição de fase FM/VS. Ainda para $\alpha=0.08$, é visto que ocorre uma transição de VS/PM para $T/J=1.30$, conforme indicado pelo pico na susceptibilidade magnética da Figura 5(a). Já para $\alpha=0.15$, é observada somente uma transição de segunda ordem, não sendo detectada uma descontinuidade na energia livre. Em adição, quando o parâmetro de ordem q se torna zero, ocorre a transição de fase VS/PM em $T/J = 1.39$, a qual é confirmada pelo pico na susceptibilidade linear.

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.