

MODELO DE ISING FRUSTRADO J_1 - J_2 EM CAMPO MÉDIO

ARTHUR KRINDGES¹;
CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR²;
FÁBIO MALLMANN ZIMMER³

¹Universidade Federal de Pelotas – arthurkrindges@gmail.com

²Universidade Federal de Pelotas – carlosavjr@gmail.com

³Universidade Federal de Mato Grosso do Sul – fabiozimmer@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

O estudo do magnetismo e materiais magnéticos é de grande interesse para a sociedade, em especial para o desenvolvimento de novas tecnologias (PSAROUDAKI; PANAGOPOULOS, 2021). Portanto, analisar os fenômenos magnéticos associados a estes sistemas é de grande importância. Para tal, pode-se utilizar uma abordagem teórica. Neste contexto, um dos modelos teóricos mais utilizados para descrição de sistemas magnéticos é o modelo de Ising. Em particular, variações deste modelo têm sido empregados na descrição e modelagem de sistemas frustrados. Tais sistemas que são de grande interesse experimental e teórico por apresentarem propriedades únicas (CHAIKIN; LUBENSKY, 1995). Neste trabalho de revisão, o modelo de Ising frustrado J_1 - J_2 clássico é estudado. Para resolução deste problema, uma rede infinita é dividida em clusters (conjuntos de spins), onde um cluster é resolvido exatamente. Utiliza-se ainda decomposição de campo médio para tratamento dos vínculos conectando os clusters. Consequentemente, frustração geométrica pode ser verificada. A partir da abordagem proposta, pode-se observar formação de ordenamentos de longo alcance. Logo, as principais características teóricas do modelo bem como a teoria de campo médio como método analítico utilizado para obtenção das soluções são mostradas. Do ponto de vista de resultados, verifica-se a partir de um diagrama de fases a ocorrência de três ordenamentos magnéticos possíveis e a presença de transições de fase contínuas e descontínuas (JIN et al, 2013).

2. METODOLOGIA

O modelo de Ising frustrado J_1 - J_2 trata de um modelo de interações binárias entre sítios, onde o sítio pode ter valores de ± 1 . Essas interações são mediadas por duas variáveis de interação de curto alcance, J_1 e J_2 . A variável J_1 possui valores negativos, priorizando um ordenamento ferromagnético (FM) e a variável J_2 valores positivos, privilegiando um ordenamento antiferromagnético (AFM). Efeitos combinados de J_1 - J_2 podem levar ao aparecimento de uma fase super antiferromagnética (ST).

Com isso, este modelo tem como Hamiltoniano que o descreve dado por

$$H = J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + J_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (1)$$

onde σ_i representa o estado do sítio i , $\langle ij \rangle$ indica uma soma de primeiros vizinhos e $\langle\langle ij \rangle\rangle$ soma de segundos vizinhos. A Figura 1 exemplifica essas interações.

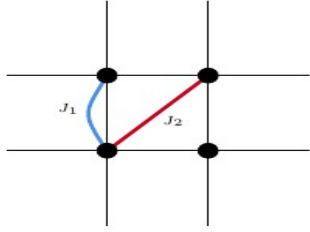


Figura 1: Esquema das interações.

Para tratar o modelo J_1 - J_2 são utilizados métodos aproximativos, entre eles a teoria de campo médio. No campo médio, são utilizados campos auxiliares que buscam reduzir o problema de muitos corpos em uma única estrutura efetiva. Basicamente, considera-se um problema de único cluster com número finito de sítios, sítios estes que interagem com sítios de clusters vizinhos via bordas.

Neste formalismo, a energia de um cluster é dada por

$$E_c^0 = \sum_{(ij)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i=1}^n h_i \sigma_i, \quad (2)$$

onde J_{ij} representa o tipo de interação e h_i é o campo auxiliar. Vale ressaltar que essa energia só contempla interações intra-cluster. Com isso, podemos utilizar do formalismo da Mecânica Estatística, o que significa a obtenção da função de partição (Z) e a energia livre de Helmholtz (F). Assim, a função de partição de rede infinita pode ser reduzida a uma função de partição de um único cluster (Z^0) com um termo de correção, da forma

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma} e^{-\beta E_{\sigma}} \\ &= Z^0 \sum_{\sigma} \frac{e^{-\beta E_{\sigma}^0}}{Z^0} e^{-\beta(E_{\sigma} - E_{\sigma}^0)} \\ &= Z^0 \langle e^{-\beta(E - E^0)} \rangle_0 \\ Z &\geq Z^0 e^{-\beta \langle E - E^0 \rangle_0}. \end{aligned} \quad (3)$$

Logo, é possível determinar a energia livre do sistema em termos de um único cluster. Usando $F = -\ln(Z)/\beta$, temos

$$\begin{aligned} F_c \leq F_c^* &= -\beta^{-1} \ln \left(Z_c^0 e^{-\beta \langle E_c - E_c^0 \rangle_0} \right) \\ &= -\frac{\ln Z_c^0}{\beta} + \langle E_c - E_c^0 \rangle_0 \\ &= -\frac{\ln(Z_c^0)}{\beta} + \frac{1}{2} \sum_{(i,j)'} J_{ij} \langle \sigma_i \rangle_0 \langle \sigma_j \rangle_0 + \sum_{i=1}^n h_i \langle \sigma_i \rangle_0, \end{aligned} \quad (4)$$

sendo que $(i, j)'$ indica que a interação é feita de um sítio i com um sítio j em um cluster diferente.

Mapeando a energia em função de h temos a Figura 2a), em que é possível notar a existência de um valor para h que minimiza a energia livre. Esse valor pode ser determinado pelo método de ponto de sela, dado por

$$\begin{aligned} \beta^{-1} \frac{\partial F_c^*}{\partial h_k} &= 0 \\ &= \sum_{i=1}^n \left[h_i + \sum_{(j)'} J_{ij} \langle \sigma_j \rangle_0 \right] (\langle \sigma_i \sigma_k \rangle_0 - \langle \sigma_i \rangle_0 \langle \sigma_k \rangle_0), \end{aligned} \quad (5)$$

assim a função autoconsistente de h é

$$h_i = - \sum_{(j)'} J_{ij} \langle \sigma_j \rangle_0. \quad (6)$$

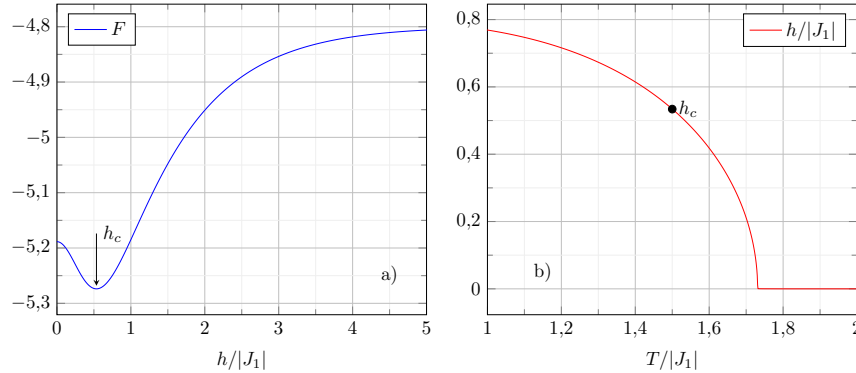


Figura 2: a) Comportamento de $F(h)$ com $T/|J_1| = 1,5$ e $J_2/|J_1| = 0,4$. b) Comportamento de $h(T)$ com $J_2/|J_1| = 0,4$.

Como podemos ver na Figura 2b) o comportamento de h descrito pela equação (6) vai de encontro com o valor de h_c que minimiza a energia livre em 2a), mostrando a consistência do método.

Como visto, é possível mapear o comportamento dos parâmetros de ordem bem como da energia livre e obter os ordenamentos que o modelo J_1 - J_2 apresenta. Com o auxílio de métodos numéricos, entre eles o método do ponto fixo e o método de contagem por *bits*, foi possível a construção do diagrama de fases do modelo para um cluster 2×2 .

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

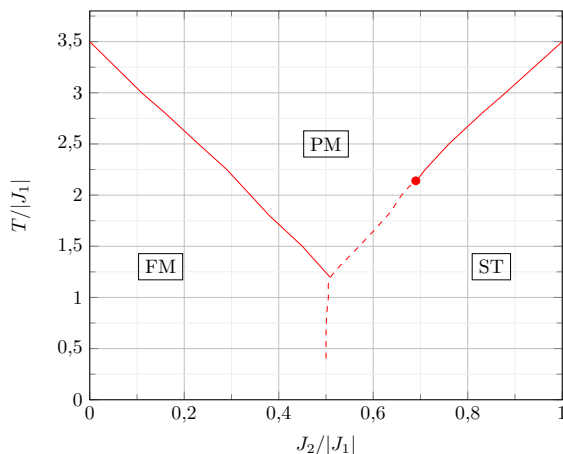


Figura 3: Diagrama de fases para um cluster 2×2 . As linhas cheias indicam transições contínuas e linhas tracejadas transições descontínuas.

Como podemos ver temos 3 ordenamentos magnéticos, as fases FM, PM e ST. Para um regime sem competição nas interações ($J_2 = 0$) temos um estado FM seguido de uma transição contínua para PM. O mesmo ocorre no regime desorde-

Como resultado dos métodos apresentados alguns comportamentos foram investigados. O modelo possui dois parâmetros que o descrevem, o parâmetro da magnetização m e o parâmetro de campo h , parâmetros estes que indicam qual é o tipo de ordenamento magnético. Para $m \neq 0$ temos a presença de um ordenamento FM. Com $m = 0$ e $h \neq 0$ um ordenamento super antiferromagnético (ST) é obtido. Para ambos m e h iguais a zero um ordenamento paramagnético (PM).

Na Figura 3 temos o diagrama de fases do modelo J_1 - J_2 em função de $T/|J_1|$ e $J_2/|J_1|$ para um cluster 2×2 .

nado com $J_2/|J_1| = 1$ onde apresenta uma fase ST com transição contínua para PM ambos em $T/|J_1| = 3,5$, que vai de encontro com JIN et al (2013).

Como pode ser visto, temos somente transições contínuas entre as fases FM/PM. Adicionalmente, são observadas ambas transições contínuas e descontínuas entre PM/ST e somente transições descontínuas entre FM/ST. Temos também a presença em um ponto tricrítico em $J_2/|J_1| \approx 0,69$ que marca a separação de transições contínuas e descontínuas entre ST/PM. Por fim ambas as linhas de transição convergem para $J_2/|J_1| = 0,5$ onde temos a presença de um transição FM/ST descontínua.

4. CONCLUSÕES

Neste trabalho de revisão, o ferramental metodológico, as aproximações analíticas e cálculos numéricos para resolução do modelo de Ising frustrado J_1 - J_2 foram analisados/discutidos. Como foi visto, o campo auxiliar h , junto com o método de ponto de sela, possibilitou determinar a solução do modelo. A partir das resoluções analíticas e numéricas, os três tipos de ordenamentos magnéticos esperados (FM, PM e ST) com transições contínuas e descontínuas, bem como a existência de ponto tricrítico, foram obtidos. Estes resultados estão de acordo com a literatura (JIN et al, 2013). Para trabalhos futuros, será verificada a influência do tamanho do cluster no diagrama de fases. Em adição, será realizado estudo do modelo de Ising frustrado J_1 - J_2 em um formalismo fermiônico (YONG-ZHI et al 2014). Neste contexto, acoplamentos de natureza quântica podem ser estudados, como campos transversos ou termo de formação de pares.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

CHAIKIN, P. M; LUBENSKY, T. C. **Principles of Condensed Matter Physics**. Cambridge University, 1995.

JIN, S. et al. Phase transitions in the frustrated Ising model on the square lattice. **Physical Review B**, v. 87, n 14, p.144406, 2013.

PSAROUDAKI, C; PANAGOPOULOS, C. Skyrmion Qubits: A New Class of Quantum Logic Elements Based on Nanoscale Magnetization. **Physical Review Letters**, v.127, n.6, p.067201, 2021.

YONG-ZHI, R. et al. Cluster mean-field theory study of J_1 - J_2 Heisenberg model on a square lattice. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v.26, n.11, p.115601, 2014.