

MODELO FERMIÔNICO FRUSTRADO J_1 - J_2 COM PAREAMENTO BCS LOCAL

ARTHUR KRINDGES¹;
 CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR²;
 FÁBIO MALLMANN ZIMMER³; MATEUS SCHMIDT⁴

¹Universidade Federal de Pelotas – arthurkrindges@gmail.com

²Universidade Federal de Pelotas – carlosavjr@gmail.com

³Universidade Federal de Mato Grosso do Sul – fabio.zimmer@ufms.br

⁴Universidade Federal de Santa Maria – mateus.schmidt@uol.com.br

1. INTRODUÇÃO

O estudo de fenômenos elétricos e magnéticos, bem como seus materiais associados tem sido de grande relevância na área da Matéria Condensada (PSA-ROUDAKI; PANAGOPOULOS, 2021). Fenômenos físicos especialmente interessantes neste contexto são a frustração e os sistemas supercondutores. Particularmente interessante é o resultado obtido pela combinação destes dois fenômenos, tanto do ponto de vista teórico como experimental. Como é visto de forma experimental que a frustração leva ao surgimento da competição entre fases magnéticas e supercondutoras (KUMAR et al, 2011).

Com isso o presente trabalho propõem de forma inicial e teórica um modelo que englobe a frustração e o acoplamento do tipo BCS local para estudar os fenômenos em conjunto. O modelo escolhido é o modelo fermiônico frustrado J_1 - J_2 com pareamento BCS local, ele permite tanto o aparecimento da frustração, pela competição entre as interações J_1 e J_2 , bem como a formação de pares pelo acoplamento BCS, que necessita do formalismo fermiônico. Para solução analítica do modelo foi utilizado a teoria de campo médio em clusters, com um cluster 2×2 e para a solução numérica o método de diagonalização exata.

2. METODOLOGIA

O modelo fermiônico frustrado J_1 - J_2 com pareamento BCS local é um modelo quântico de interações binárias entre sítios de uma rede. Este modelo apresenta três tipos de interação de curto alcance, uma de pareamento de spins de Ising de primeiros vizinhos mediada pela variável J_1 , outro de segundos vizinhos mediada pela variável J_2 . Ambas as variáveis são positivas e introduzem um acoplamento antiferromagnético entre os vizinhos. E por fim uma interação de pareamento de primeiros vizinhos tipo BCS mediado pela variável g que ocorre somente dentro de clusters. O hamiltoniano para o modelo fica da forma

$$\hat{H} = J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z + J_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - g \sum_{\langle ij \rangle^0} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\uparrow}, \quad (1)$$

onde \hat{S}_i^z representa o spin do tipo Ising do sítio i dado por $\hat{S}_i^z = \hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}$, onde $\hat{n}_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ é o operador numero de ocupação tendo valores de 0 ou 1 e $c_{i\sigma}^\dagger, c_{i\sigma}$ sendo os operadores de criação e destruição de Fermi onde $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow indicando a projeção do spin. Por fim, $\langle ij \rangle$ indica uma soma de primeiros vizinhos, $\langle\langle ij \rangle\rangle$ soma de segundos vizinhos e o subíndice 0 indica que a soma só ocorre utilizando termos intra-cluster.

Para resolver o modelo J_1 - J_2 de forma analítica foi utilizado o método aproximativo de campo médio em cluster (CMC) para reduzir o problema de infinitos sítios em um único cluster efetivo (JIN et al, 2013), como ilustra a imagem da esquerda na Figura 1.

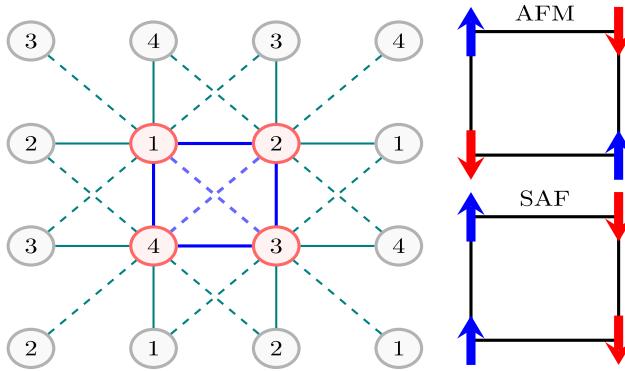


Figura 1: Representação da rede quadrada composta por 4 sítios (centro) rodeada pelos sítios do CMC, linhas cheias indicam interação de primeiros vizinhos e linhas tracejadas de segundos vizinhos. Ao lado direito o esquema das ordens magnéticas AFM e SAF.

Neste formalismo o hamiltoniano do cluster isolado é dado por

$$\hat{\mathcal{H}}_c^0 = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle_c^0} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle_c^0} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - g \sum_{\langle i,j \rangle_c^0} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} - \sum_{i=1}^n h_i \hat{S}_i^z, \quad (2)$$

onde temos o incremento dos subíndice c e 0 nos somatórios indicando a soma intra-cluster e um termo de campo auxiliar h_i que age sobre os spins dos sítios do cluster.

Usando uma expansão até primeira ordem da energia livre de Helmholtz, onde ela é dada em função da energia livre de um cluster isolado mais um termo de correção de campo médio. Assim, ela é dada por

$$F_c = F_c^0 + \langle \hat{H}_c - \hat{\mathcal{H}}_c^0 \rangle_0, \quad (3)$$

o segundo termo da equação acima calcula a diferença entre a energia do cluster sujeito a todas as interações menos a energia do cluster isolado com campo auxiliar. Esse termo é dado por

$$\langle \hat{H}_c - \hat{\mathcal{H}}_c^0 \rangle_0 = \frac{1}{2} \sum_{(i,j)'} J_{ij} \langle \hat{S}_i^z \rangle_0 \langle \hat{S}_j^z \rangle_0 + \sum_{i=1}^n h_i \langle \hat{S}_i^z \rangle_0, \quad (4)$$

o primeiro termo consiste nas interações inter-clusters, onde J_{ij} pode ser J_1 ou J_2 e o segundo termo é a interação com o campo auxiliar.

Aplicando o método de ponto de sela, que consiste em minimizar a energia livre total em função do campo auxiliar h_i , que como resultado temos

$$F_c(T, J_{ij}, g) = F_c^0(T, J_{ij}, g) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n h_i \langle \hat{S}_i^z \rangle_0. \quad (5)$$

Assim, obtemos o valor do campo auxiliar que satisfaz a minimização da energia livre total

$$h_i = - \sum_{(j)'} J_{ij} \left\langle \hat{S}_j^z \right\rangle_0, \quad (6)$$

onde h_i é dado em função da soma da média do momento de spin dos sítios j vizinhos ao sítio i pela variável de interação correspondente a J_1 ou J_2 .

Para obtenção dos resultados, como diagrama de fases, foi utilizado o método de diagonalização exata para o cálculo dos parâmetros de ordem, bem como o método do ponto fixo para zero de função. Ambos foram implementados em um programa escrito em linguagem *FORTRAN* com utilização da biblioteca *LAPACK* para a diagonalização das matrizes.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Como resultado da metodologia apresentada foi obtido alguns diagramas de fase para o modelo com um cluster 2×2 . Este tamanho de cluster foi escolhido por conta do método de diagonalização exata requerer um grande armazenamento computacional. Mapeando o parâmetro da magnetização ($m_i = \langle \hat{S}_i^z \rangle$) e identificando a ordem magnética, como mostra a imagem da direita na figura 1, foi possível montar os diagramas de fase e marcar as transições de fase de primeira ordem (linhas tracejadas) e de segundo ordem (cheias).

Pela figura 2a) temos o diagrama de fase em função de T/J_1 e J_2/J_1 para o regime sem acoplamento BCS ($g = 0$) e a comparação com o diagrama do modelo clássico. Como podemos ver ambos os modelos possuem as 3 fases magnéticas PM, AFM e SAF, com transições de primeira e segunda ordem. A grande diferença está na diminuição de T_c quando vamos para o formalismo fermiônico e a alteração do ponto tricrítico (T_{tcc}), que foi de $J_2/J_1 \approx 0,66$ para $J_2/J_1 \approx 0,56$. Muito provável que esta mudança na criticalidade se deu em função dos estados não magnéticos presente no formalismo fermiônico.

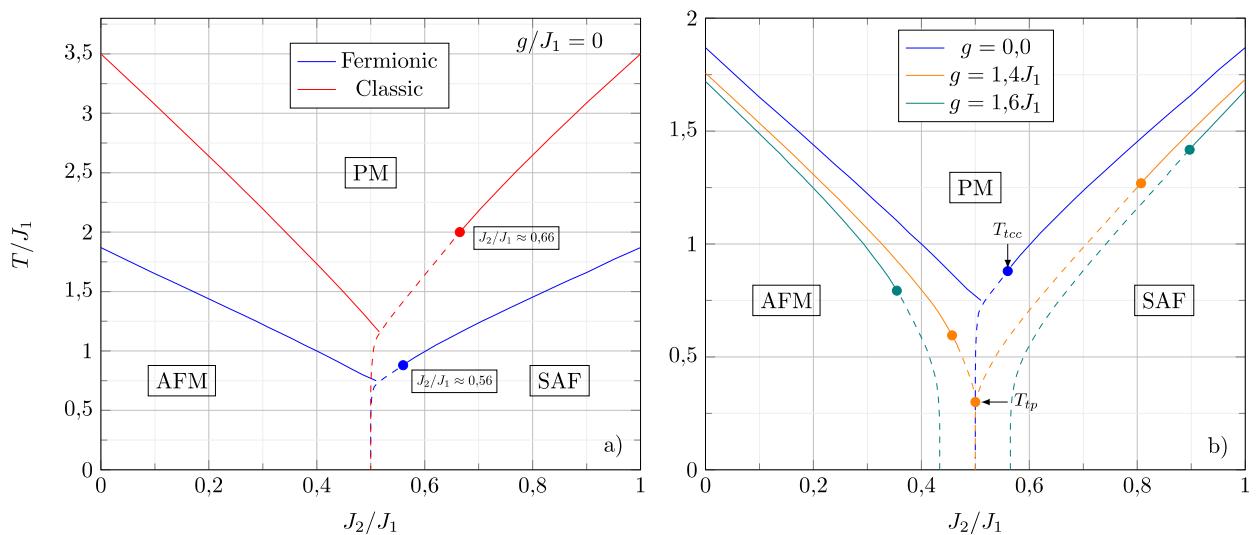


Figura 2: Diagramas de fase T/J_1 vs J_2/J_1 , linhas cheias indicam transição de segunda ordem e linhas tracejadas indicam transição de primeira ordem. Pontos marcam os pontos tricríticos e tríplos. a) Em vermelho modelo clássico e em azul modelo fermiônico com $g = 0$. b) Modelo fermiônico com diferentes valores de g .

Na figura 2b) temos o diagrama de fases do modelo fermiônico com acoplamento BCS local ($g > 0$). Com o aumento de g vemos a permanência das fases magnéticas, em comparação com o modelo sem acoplamento a T_c diminui, bem

como a alteração dos pontos tricrítico (T_{tcc}), o aparecimento de novos T_{tcc} e de um ponto tríplo (T_{tp}). Isso mostra que, o aumento de acoplamento BCS influenciou na criticalidade do modelo, proporcionando o aparecimento um gap ($g/J_1 = 1,6$) entre AFM e SAF, que se inicia na região de maior frustração ($J_2/J_1 = 0,5$). Esta região de estado fundamental PM é dado pela ausência de acoplamentos de spin, tanto de primeiros como de segundos vizinhos.

4. CONCLUSÕES

Podemos concluir com este trabalho que a utilização da teoria de campo médio em cluster foi apropriada para resolver o modelo fermiônico. O modelo fermiônico frustrado J_1 - J_2 com pareamento BCS local, utilizado para investigar a junção dos fenômenos da frustração e supercondutividade, proporcionou resultados interessantes para o estudo de tais fenômenos combinados. Assim, o modelo apresentou os três ordenamentos magnéticos esperados (PM, AFM e SAF), com transições de primeira e segunda ordem entre eles.

O modelo no formalismo fermiônico mostrou algumas diferenças esperadas, em comparação com o modelo clássico. Foi possível identificar a mudança na temperatura de transição entre as fases magnéticas e a alteração do ponto tricrítico. Essas mudanças mostram que o aumento do espaço de fase do sítio, indo de 2 para 4 estados, influenciou na criticalidade bem como na estabilidade da fase magnética (alteração do ponto tricrítico).

Com o incremento do mecanismo de pareamento tipo BCS foram obtidos resultados interessantes do ponto de vista termodinâmico. Com o acoplamento ($g > 0$) foi possível identificar mudanças na criticalidade do modelo bem como o surgimento de transições que não eram encontradas anteriormente. Um dos pontos observados é a alteração nos pontos tricríticos envolvendo SAF/PM e o aparecimento de novos pontos envolvendo AFM/PM, bem como o surgimento do ponto tríplo identificando a coexistência das fases AFM/PM/SAF. Além disso, com um g suficientemente grande ($g/J_1 = 1,6$) o estado fundamental exibe uma ordem PM centrada na região de máxima frustração ($J_2/J_1 = 0,5$), isso mostra que um regime mais frustrado é mais sensível ao mecanismo de pareamento.

Para trabalhos futuros o modelo apresentado será estendido, onde um pareamento BCS será adotado, adaptando a teoria de campo médio em clusters para permitir parâmetros variacionais associados ao termo de pareamento, o que possibilita demarcar uma fase não magnética com pareamento.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

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.

KUMAR, A.; TANDON, R. P.; AWANA, V. P. S. Study of spin glass and cluster ferromagnetism in $\text{RuSr}_2\text{Eu}_{1.4}\text{Ce}_{0.6}\text{Cu}_2\text{O}_{10-\delta}$ magneto superconductor, **Journal of Applied Physics**, v. 110, n. 4, p. 043926, 2011.

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.