

Revisão teórica e computacional do modelo frustrado $J_1 - J_2$

ANDERSON RICARDO DA SILVA FERREIRA¹;

ARTHUR KRINDGES²;

CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR³

¹ Universidade Federal de Pelotas – Anderson.ricardo525@yahoo.com.br

² Universidade Federal de Pelotas – arthur.krindges@ufpel.edu.br

³ Instituto de Física e Matemática - Universidade Federal de Pelotas – Carlosavjr@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

O magnetismo é uma área de estudos da matéria condensada, a qual é focada em investigação de propriedades magnéticas da matéria, a qual a partir dessa foi possível a descoberta de várias tecnologias atuais. Do ponto de vista acadêmico, atenção tem sido dada à procura de novas fases magnéticas da matéria, com Líquidos de spin (LS) e Vidros de spin (VS) sendo exemplos de descoberta (BINDER; YOUNG, 1986). O que essas ordens possuem em comum é que em ambas o fenômeno da frustração tem um papel importante (RAMIREZ, 1994). A frustração ocorre quando um material não possui um único estado de menor energia acessível pelo sistema. A frustração pode ser incorporada em um sistema através de duas formas, via desordem (FISCHER; HERTZ, 1991) ou pela geometria da rede (BALENTS, 2010).

Nesse cenário, o objetivo será estudar a física da frustração a partir de um modelo frustrado, o modelo frustrado $J_1 - J_2$ (JIN et al., 2013). Na aproximação, uma rede finita que é dividida em *clusters* iguais. As interações dentro do cluster são resolvidas exatamente, enquanto que as interações entre cluster é feita através de campos auxiliares inseridos via campo médio. Consequentemente, se reduz o problema de muitos corpos em uma única estrutura efetiva. Com isso, a frustração pode ser observada a partir da interpretação das quantidades termodinâmicas, como da energia livre de Helmholtz, por exemplo.

2. METODOLOGIA

Neste trabalho, propõe-se o estudo do modelo Ising frustrado $J_1 - J_2$ clássico via teoria de campo médio com clusters, onde os sítios possuem valores -1 e 1, com os termos J_1 e J_2 representando interações entre primeiros e segundos vizinhos, respectivamente. Dependendo da combinação entre os termos J_1 e J_2 , haverá competição entre os termos de interação entre primeiros e segundos vizinhos. O modelo empregado é descrito pelo seguinte Hamiltoniano

$$H = \sum_{ij}^{intra} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \frac{1}{2} \sum_{ij}^{inter} J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (1)$$

onde o primeiro somatório diz respeito às contribuições dos primeiros vizinhos, o segundo somatório diz respeito a contribuição dos segundos vizinhos, o termo $\frac{1}{2}$ no segundo somatório é utilizado para evitar a dupla contagem de interações, o termo J_{ij} é o termo de interação entre sítios e σ diz respeito ao valor do spin do sítio na posição i ou j . O Hamiltoniano para o modelo sem ligação entre clusters é descrito por

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

com h_i o campo auxiliar onde o método de campo médio se faz presente. De acordo com (JIN et al., 2013) que diz que para que H_c seja minimizado

$$h_i = - \sum_{ij}^{inter} J_{ij} \langle \sigma_j \rangle, \quad (3)$$

onde $\langle \sigma_i \rangle$ é o valor médio σ_i . Sendo assim, o Hamiltoniano sem ligações será

$$H_c = \sum_{ij}^{intra} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \sum_{ij}^{inter} J_{ij} \sigma_i \langle \sigma_j \rangle. \quad (4)$$

A função de partição é calculada em acordo com

$$Z \geq Z_0 \exp\{-\beta \langle H - H_c \rangle\}, \quad (5)$$

onde $Z_0 = \sum_{\sigma} \exp\{-\beta H_{\sigma}\}$ e $\beta = \frac{1}{K_b T}$ onde K_b é a constante de Boltzmann e T é a temperatura. Basicamente, o modelo é resolvido pela desigualdade de Bogoliubov, como demonstrou (CALLEN, 1985). Com isso, a energia livre de Helmholtz será

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z_0 + \langle H - H_c \rangle = -\frac{1}{\beta} \ln (\text{Tr}(\exp\{-\beta H_{eff}\})), \quad (6)$$

de mesmo modo podemos definir a magnetização, escrita como

$$m_i = \langle \sigma_i \rangle = \frac{\text{Tr} \sigma_i \exp\{-\beta H_{eff}\}}{\text{Tr} \exp\{-\beta H_{eff}\}}, \quad (7)$$

onde $H_{eff} = H_{intra} + H_{inter}$ são as contribuições energéticas *inter-cluster* e *intra-cluster* e podem ser escritas como sendo

$$H_{intra} = -J_1(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_1) + J_2(\sigma_1 \sigma_3 + \sigma_2 \sigma_4), \quad (8)$$

e

$$\begin{aligned} H_{inter} = & -J_1 \left(\left[\sum_{i=1}^3 (\sigma_i m_{i+1} - \frac{1}{2} m_i m_{i+1} + \sigma_{i+1} m_i - \frac{1}{2} m_{i+1} m_i) \right] + (\sigma_1 m_4 - \frac{1}{2} m_1 m_4) + (\sigma_4 m_1 - \frac{1}{2} m_4 m_1) \right) + J_2 \left(3[(\sigma_1 m_3 - \frac{1}{2} m_1 m_3) + (\sigma_2 m_4 - \frac{1}{2} m_2 m_4) + (\sigma_3 m_1 - \frac{1}{2} m_3 m_1) + (\sigma_4 m_2 - \frac{1}{2} m_4 m_2)] \right). \quad (9) \end{aligned}$$

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados foram obtidos a partir de cálculos computacionais tomando uma rede quadrada com $N = 4$ sítios onde cada sítio (σ) poderia assumir o valor de $\sigma = \pm 1$, o valor de J_1 foi mantido fixo em $+1$ de forma a privilegiar alinhamentos antiferromagnéticos com o valor de J_2 sendo negativo.

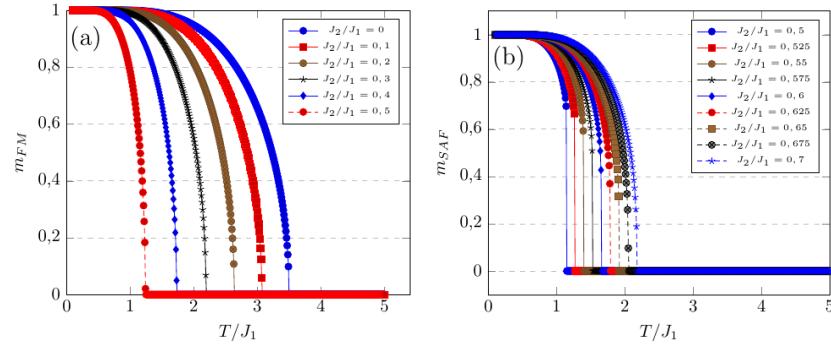


Figura 3.1: Valores do parâmetro de ordem (a) m_{FM} (b) m_{SAF} por T/J_1 . Em (a) temos o intervalo de $0 \leq J_2/J_1 \leq 0,5$ com pontos das retas contínuas, em (b) temos o intervalo de $0,5 \leq J_2/J_1 \leq 0,7$ onde o parâmetro é descontínuo no intervalo.

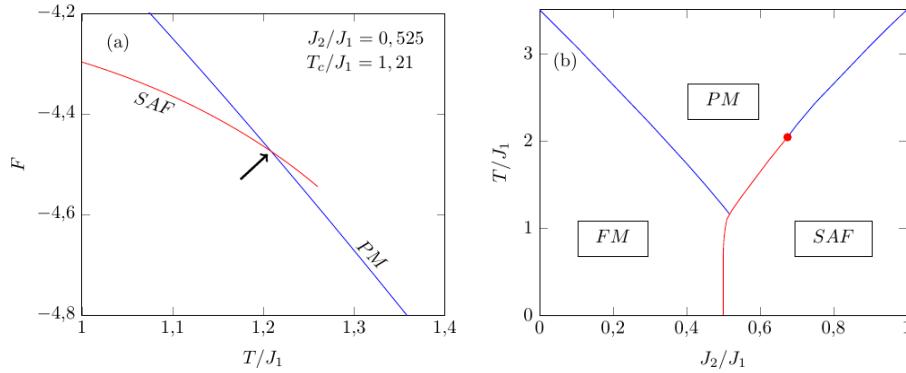


Figura 3.2: Valores de energia livre F em função de (a) T/J_1 onde a intersecção das retas marca o local de menor energia mútua de ambas fases. Em (a) a reta vermelha representa a fase SAF e a reta azul representa a fase PM. Em (b), o diagrama de fases T/J_1 versus J_2/J_1 .

Na figura 3.1(a) notamos que com o aumento da temperatura temos o decaimento da magnetização até o ponto onde ela se torna zero, nesse ponto ocorre a transição entre as fases ferromagnético(FM)/paramagnético(PM). Os pontos do gráfico são contínuos o que caracteriza uma transição de fase de segunda ordem. Ainda observando a figura 3.1(a) percebemos que com o aumento do fator J_2/J_1 , há uma diminuição na temperatura de transição devido uma maior competição entre interações e da frustração do sistema. Na figura 3.1(b), o gráfico indica descontinuidade, caracterizando uma transição de fase de primeira ordem por apresentar calor latente. Tal cenário demanda análise da energia livre do sistema para marcação da transição de fase. Na figura 3.2(a) é demarcada a transição de fase de primeira ordem, no ponto de menor energia comum entre as duas fases. Na figura 3.2(a) temos a energia livre F em função de T/J_1 com o fator $J_2/J_1 = 0,550$ em que o ponto de transição SAF/PM ocorre na temperatura $T_c/J_1 = 1,357$ marcada pela seta. A partir da análise dos parâmetros de ordem e energia livre, demarca-se o diagrama de transição entre as fases FM/PM/SAF apresentado na figura 3.2 (b). Neste, as linhas azuis representam as

transições de fase de segunda ordem, em que a linha vermelha demarca a transição de fase de primeira ordem. Em $J_{2c}/J_1 = 0,67$, é marcado o ponto tricrítico, que separa as transições de primeira e de segunda ordem. Para $J_2/J_1 = 0,5$ tem-se o regime com a maior competição de interações, sendo um cenário altamente frustrado. Basicamente, para esse valor de J_2/J_1 as fases magnéticas têm sua menor intensidade. Em adição, esta é a região em que a coexistência de fases é verificada.

4. CONCLUSÕES

O presente trabalho discutiu o modelo de Ising J_1 - J_2 frustrado, em que a competição de interações foi ajustada por meio da razão J_2/J_1 . Esse modelo foi tratado através da teoria de campo médio com *clusters*, a qual foi utilizada com o intuito de considerar a geometria da rede. Esse modelo por sua vez foi tratado utilizando o método variacional de Bogoliubov para a solução com aproximação de campo médio. Consequentemente, a frustração geométrica é adicionada à uma rede quadrada 2x2. A estrutura proposta foi escolhida por possuir solução conhecida, a qual foi discutida na referência JIN et al., 2013, e por ser base para aplicações posteriores.

Métodos numéricos foram empregados para a resolução do problema onde os valores de temperatura e J_2/J_1 puderam ser variados. Como consequência, as magnetizações associadas às ordens magnéticas e linhas de transição foram obtidas. Neste cenário, foi observado como a temperatura bem como a competição entre interações atuam nas ordens magnéticas. Em torno de $J_2/J_1 = 0,5$, as ordens magnéticas têm sua menor temperatura de transição, sendo o ponto de maior frustração. Ademais, como visto nos resultados figura 3.2(a), nesse local verifica-se a coexistência de fases, com a energia livre apresentando ramos para as diferentes fases. Para futuros trabalhos, é considerado o aumento do número de sítios que compõem a rede, bem como a mudança na geometria da rede. A partir dessas mudanças, mudanças significativas nas quantidades termodinâmicas podem ser esperadas.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- CALLEN, H. B. *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics*. 2. ed. New York: John Wiley & Sons, Inc, 1985. 433-439 p.
- BALENTS, L. Spin liquids in frustrated magnets. *Nature*, v. 464, n. 7286, p. 199–208, 2010.
- BINDER, K. ; YOUNG, A.P. Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions. *Reviews of Modern Physics*, American Physical Society, v. 58, n. 4, p. 801–976, 1986.
- FISCHER, K.H.; HERTZ, J.A. *Spin Glasses*. England: Cambridge University Press, 1991. (Cambridge Studies in Magnetism).
- JIN, S.; SEN, A.; GUO, W.; SANDVIK, A.W. Phase transitions in the frustrated Ising model on the square lattice. *Physical Review B*, American Physical Society, v. 87, p. 144406, 2013.
- RAMIREZ, A.P. Strongly geometrically frustrated magnets. *Annual Review of Materials Science*, Annual Reviews, v. 24, n. 1, p. 453–480, 1994.