

MODELO MAGNETO FRUSTRADO COM CLUSTERIZAÇÃO BCS

ARTHUR KRINDGES¹;
 CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR²;
 FABIO MALLMANN ZIMMER³
 MATHEUS SCHMIDT⁴

¹Universidade Federal de Pelotas – arthur.krindges@ufpel.edu.br

²Instituto de Física e Matemática - Universidade Federal de Pelotas – cavmjunior@ufpel.edu.br

³Instituto de Física - Universidade Federal de Mato Grosso do Sul - fabio.zimmer@ufms.br

⁴Departamento de Física - Universidade Federal de Santa Maria - mateus.schmidt@uol.com.br

1. INTRODUÇÃO

Interações competitivas em sistemas magnéticos têm se mostrado um desafio para pesquisadores e revelado fenômenos físicos novos e intrigantes. Em sistemas magnéticos frustrados, onde as interações magnéticas não podem ser totalmente satisfeitas simultaneamente, ocorre o aparecimento de degenerescência que acarreta em um ambiente propício para comportamentos não convencionais, como as fases spin-glass e estados líquidos quânticos (PAL, 2024;SCHEIE, 2024). Além disso, quando momentos magnéticos frustrados são combinados com interações adicionais, como o emparelhamento de elétrons, surgem novas possibilidades para a modificação das propriedades magnéticas e o surgimento de fenômenos coletivos complexos (YUE, 2023).

Estudos mostram que tanto a supercondutividade (SC) quanto a frustração podem coexistir em sistemas físicos, levando a diagramas de fase complexos e ricos (CHEN, 2024). A compreensão da interação entre magnetismo e supercondutividade, especialmente na presença de frustração, continua a ser um desafio. Embora alguns aspectos da supercondutividade possam ser explicados pela teoria BCS (BARDEEN, 1957), a influência da frustração na estabilidade da supercondutividade (vice-versa) ainda é uma questão em aberto.

Assim, o presente trabalho tem como objetivo, estudar o modelo fermiônico frustrado com clusterização da interação BCS, a fim de elucidar como o mecanismo de pareamento afeta os estados magnéticos e muda a termodinâmica do sistema. Para isso, a teoria de campo médio com cluster foi utilizada, juntamente com métodos de diagonalização exata.

2. METODOLOGIA

Para investigar os efeitos combinados da frustração magnética e pareamento tipo BCS, o presente trabalho propôs a utilização do modelo fermiônico J_1 - J_2 com adição da interação BCS. Neste contexto, a frustração é oriunda da competição entre as interações de troca de primeiros (J_1) e segundos (J_2) vizinhos. A essa complexidade, soma-se a adição de uma interação BCS variável (g_{ij}), que introduz o pareamento e que depende do cluster utilizado. Com isso, o Hamiltoniano do modelo é dado por

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

os primeiros dois termos são referentes às interações de spin, onde os subíndices dos somatórios indicam o vizinho e o operador de spin é dado no espaço de Fock

por $\hat{S}^z = \hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}$. O último termo introduz o pareamento e salto de par, sendo dado pelo produto dos operadores de criação ($c_{i\sigma}^\dagger$) e destruição ($c_{i\sigma}$), mediados pela variável de g_{ij} . Para resolver o modelo e obter resultados acerca da termodinâmica do sistema, utilizamos a aproximação de campo médio com cluster

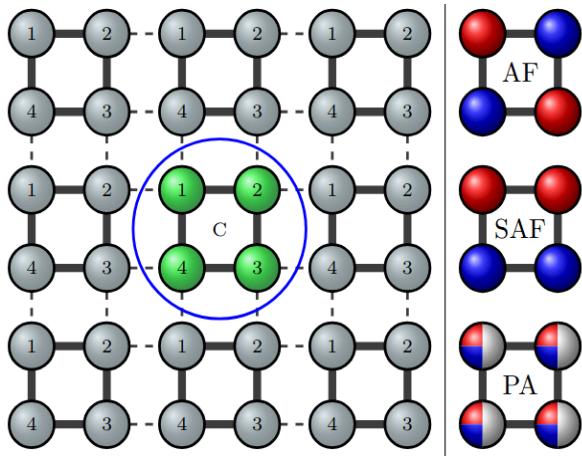


Figura 1: A esquerda a rede conectada com cluster central utilizado na CMF. A direita o arranjo dos momentos das ordens AF, SAF e PA. As cores indicam o momento do sítio: vermelha (\downarrow), azul (\uparrow) e cinza (-).

forma, o problema se reduz ao cálculo de um único potencial de um cluster 2 por 2, com interações de borda sendo aproximadas pelo método de campo médio. Portanto, o potencial termodinâmico efetivo, obtido via CMF é

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}_c = & -\frac{1}{\beta} \ln \exp(-\beta \hat{H}_c^{eff}) - J_1(m_1 + m_3)(m_2 + m_4) - 3J_2(m_1m_3 + m_2m_4) \\ & + g' \left[(\Delta_1 + \Delta_3) \left(\Delta_2^\dagger + \Delta_4^\dagger \right) + \left(\Delta_1^\dagger + \Delta_3^\dagger \right) (\Delta_2 + \Delta_4) \right], \end{aligned} \quad (2)$$

sendo o Hamiltoniano efetivo

$$\begin{aligned} \hat{H}_c^{eff} = & J_1 \sum_{\langle i,j \rangle_c} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle_c} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - g \sum_{\langle i,j \rangle_c} \left(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} + c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \right) \\ & - J_1 \sum_{\langle i,j \rangle'_c} \hat{S}_i^z m_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle'_c} \hat{S}_i^z m_j - g' \sum_{\langle i,j \rangle'_c} \left(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \Delta_j + \Delta_j^\dagger c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \right). \end{aligned} \quad (3)$$

O parâmetro da magnetização local é dado por $m_i = \langle S_i^z \rangle_0$ e de gap por $\Delta_i(\Delta_i^\dagger) = \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle_0 (\langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle_0)$. Além disso, a entropia por cluster é calculada via $s_c = \left(\langle \hat{H}_c^{eff} \rangle_0 - \bar{\Phi}_c \right) / T$. O aparecimento de g e g' indica a formação de pareamento no inter-cluster (g) e intra-clusters (g'), fornecendo um cenário de clusterização no pareamento BCS quando g' é diferente de g .

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

(CMF), que é uma extensão da aproximação de campo médio para múltiplos sítios. Desta forma, os efeitos de geometria e efeitos das interações de curto alcance podem ser analisados com maior fidelidade. Assim, o cluster utilizado neste trabalho consiste em uma rede 2 por 2, onde cada sítio pode apresentar 4 estados possíveis: 2 magnéticos ($|\uparrow\downarrow\rangle$ e $|\downarrow\uparrow\rangle$) e 2 não magnéticos ($|\uparrow\downarrow\rangle$ e $|\downarrow\downarrow\rangle$). Na parte esquerda da Figura 1, temos a estrutura da rede com o cluster ao centro. Os clusters adjacentes ao central são imagens do mesmo. Assim, podemos considerar um potencial termodinâmico efetivo para o sistema, que é dado pela soma dos potenciais dos clusters. Desta

forma, o problema se reduz ao cálculo de um único potencial de um cluster 2 por 2, com interações de borda sendo aproximadas pelo método de campo médio. Portanto, o potencial termodinâmico efetivo, obtido via CMF é

Com base na metodologia aplicada, foi possível gerar resultados e determinar as propriedades e comportamento termodinâmico do modelo. Primeiramente, com base nos parâmetros de ordem, obtivemos as possíveis fases do sistema. Na parte direita da Figura 1, estão apresentados os arranjos correspondentes às fases antiferromagnética (AF), super-antiferromagnética (SAF) e Pares (PA), com seus respectivos parâmetros de ordem dados por: $m_{AF} = (m_1 - m_2 + m_3 - m_4)/4$, $m_{SAF} = (m_1 + m_2 - m_3 - m_4)/4$ e $\Delta = (|\Delta_1| + |\Delta_2| + |\Delta_3| + |\Delta_4|)/4$. Desta forma, à esquerda na Figura 2 temos o comportamento destes parâmetros de ordem em função da temperatura para diferentes regimes de frustração (J_2/J_1) e acoplamentos BCS (g e g'). Além disso, a entropia por sítio é apresentada à direita. Podemos perceber a mudança de criticalidade do sistema para os diferentes regimes e fases do modelo, apresentando transições de primeira e segunda ordem, com alteração de estados magnéticos para não magnéticos (Figura 2(g)). A natureza destas transições de primeira ordem foi caracterizada a partir da análise dos potenciais termodinâmicos e das entropias das duas fases, como mostra os painéis (g)-(h) da Figura 2.

Como podemos ver, o aumento de g inibe as fases magnéticas (AF e SAF), acarretando em temperaturas de transição mais baixas. Já para a fase de PA, o aumento de g auxilia em uma maior estabilidade da mesma.

As características introduzidas pela clusterização podem ser vistas na Figura 3, com o diagrama de fases em função do acoplamento intra-cluster (g/J_1) e temperatura (T/J_1) para o regime sem ($J_2=0$) e com ($J_2/J_1=0.5$) frustração. Foi possível determinar que, a partir de g'/g maior ou igual a 0,15, ocorre o aparecimento da fase PA. Outro ponto é a mudança nas regiões que contemplam as fases magnéticas e PA com o aumento de g e g' . Com o aumento, a transição AF/PM é gradualmente substituída por AF/PA e surge a transição PA/PM. Além disso, a mudança na

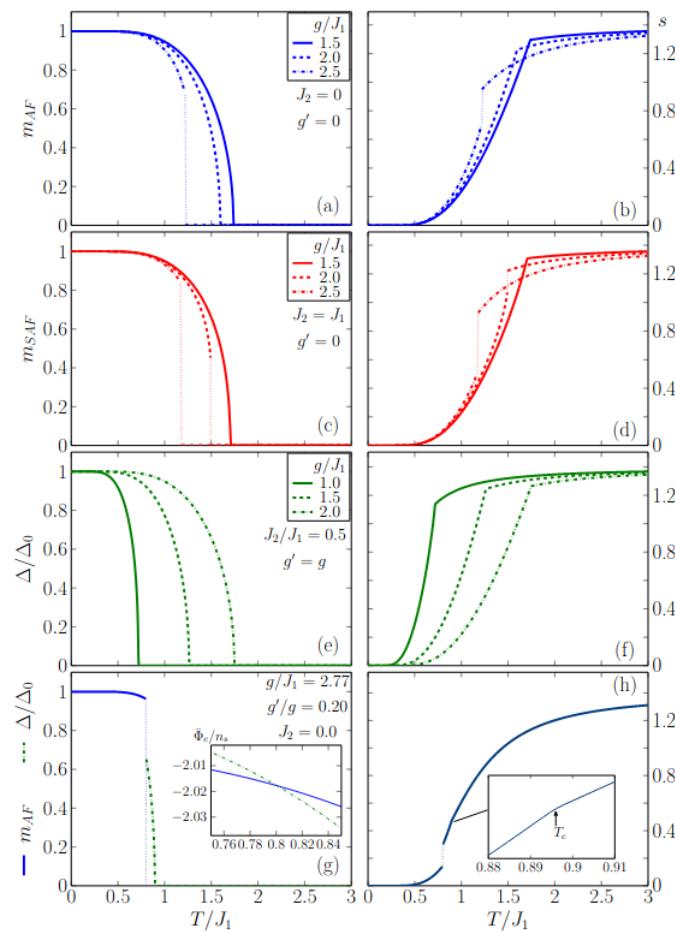


Figura 2: Painéis à esquerda mostram os parâmetros de ordem em função da temperatura para diferentes valores de frustração (J_2/J_1) e pareamento (g/g'). A direita as respectivas entropias dos painéis da esquerda.

Figura 2: Painéis à esquerda mostram os parâmetros de ordem em função da temperatura para diferentes valores de frustração (J_2/J_1) e pareamento (g/g'). A direita as respectivas entropias dos painéis da esquerda.

criticalidade também ocorre, deixando de apresentar um ponto tri crítico para valores de g'/g maiores que 0,3.

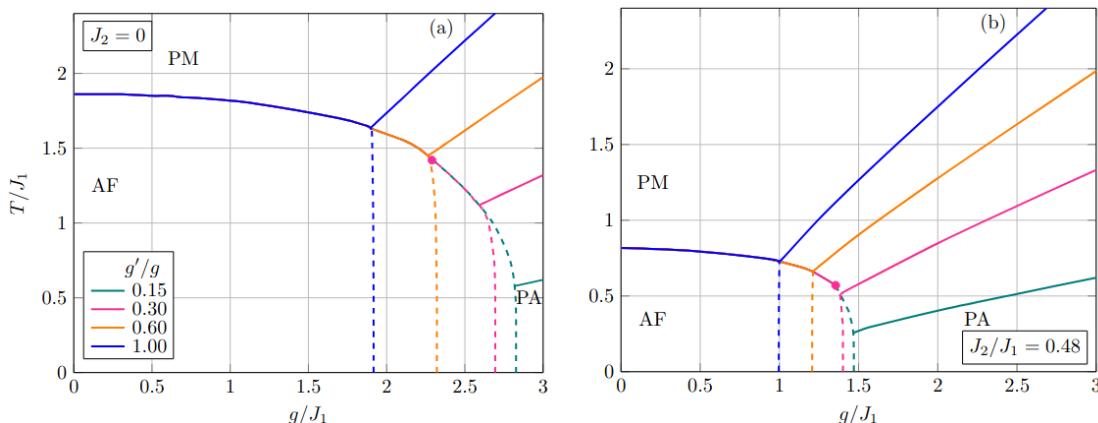


Figura 3: Diagramas de fase em função de g/J_1 e T/J_1 para diferentes valores de acoplamento de pares. (a) regime sem frustração, (b) regime com frustração.

4. CONCLUSÕES

Com a metodologia aplicada e os resultados obtidos, podemos concluir que o modelo apresentou características importantes para a análise dos fenômenos de frustração magnética e formação de pares. Além disso, a abordagem de clusterização mostrou resultados que indicam um favorecimento da fase PA em cenários mais homogêneos. Outro ponto a destacar é a diminuição da área contemplada pelas ordens magnéticas com o aumento da frustração, indicando uma maior suscetibilidade a outras interações e fenômenos. Para trabalhos futuros, uma interação de troca do tipo Heisenberg e BCS, juntamente com a adição de anisotropias, pode apresentar um cenário promissor para entender a frustração e a supercondutividade em conjunto.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

PAL, K. et al. Giant magnetoresistance resulting from superzone gap in spin-frustrated rare-earth-based aluminide: $\text{DyFe}_2\text{Al}_{10}$. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 36, Fev. 2024.

SCHEIE, A. O. et al. Nonlinear magnons and exchange Hamiltonians of the delafossite proximate quantum spin liquid candidates KYbSe_2 and NaYbSe_2 . **Physical Review B**, v. 109, Jan. 2024.

YUE, Y-F. et al. Hole density dependent magnetic structure and anisotropy in Fe-pnictide superconductor. **Chinese Physical B**, v. 32, Set. 2023.

CHEN, J. et al. Pair density wave, unconventional superconductivity, and non-Fermi liquid quantum critical phase in a frustrated Kondo lattice. **Physical Review B**, v. 109, Jan. 2024.

BARDEEN, J. et al. Theory of Superconductivity. **Physical Review**, v. 108, Dez. 1957.