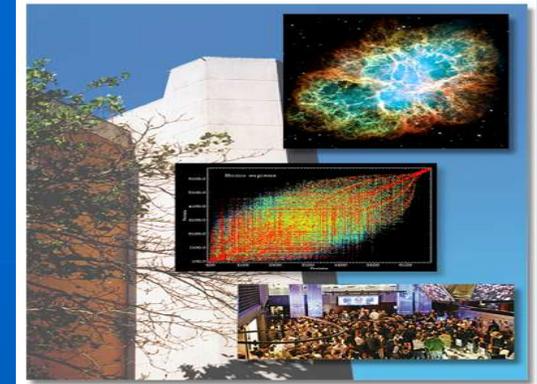




UFAM



Interação de Longo-Alcance em Modelos de spins Quânticos

José Ricardo de Sousa

2ª Reunião do Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia em Sistemas Complexos

RJ/março 2010

Sumário

- Modelo de Ising com anisotropia biaxial
- Modelo de van Hemmen quântico
- Modelo de Heisenberg de spin 1/2
- Modelo de Heisenberg de spin 1 com anisotropia de íon único

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)} \frac{J}{r_{ij}^p} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j,$$

a) $p < d$ região não-extensiva

b) $P > d$ região extensiva

Modelo Ising com Anisotropia Biaxial

Limite $p=0$

$$D_x = D_y$$

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{N} \sum_{(i,j)} S_i^z S_j^z - \sum_i [D_x (S_i^x)^2 + D_y (S_i^y)^2]$$

$$\mathcal{H}_{UNIAxIAL} = -\sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z + D_z \sum_i (\sigma_i^z)^2$$

$$\sum_{(i,j)} S_i^z S_j^z = \frac{1}{2} \left[\left(\sum_i S_i^z \right)^2 - \sum_i (S_i^z)^2 \right]$$

$$\mathcal{H} = -\frac{J_o}{2N} \left(\sum_i S_i^z \right)^2 - \sum_i \mathcal{H}_{oi}$$

Fórmula de Trotter-Suzuki

$$e^{A+B} \simeq e^A \cdot e^B$$

$$\mathcal{Z} = Tr \left\{ e^{\frac{K}{2N} \left(\sum_i S_i^z \right)^2} \prod_{i=1}^N e^{\beta \mathcal{H}_{oi}} \right\}$$

Usando a identidade gaussiana

$$e^{a\sigma^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2} + \sqrt{2a}\sigma x}$$

Obtemos a energia livre por partícula dada por

$$f \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{\ln Z}{N} \right\}$$

ou

$$f(m) = -\frac{Km^2}{2} + \ln \left\{ \sum_{r=1}^3 e^{\lambda_r(m)} \right\}$$

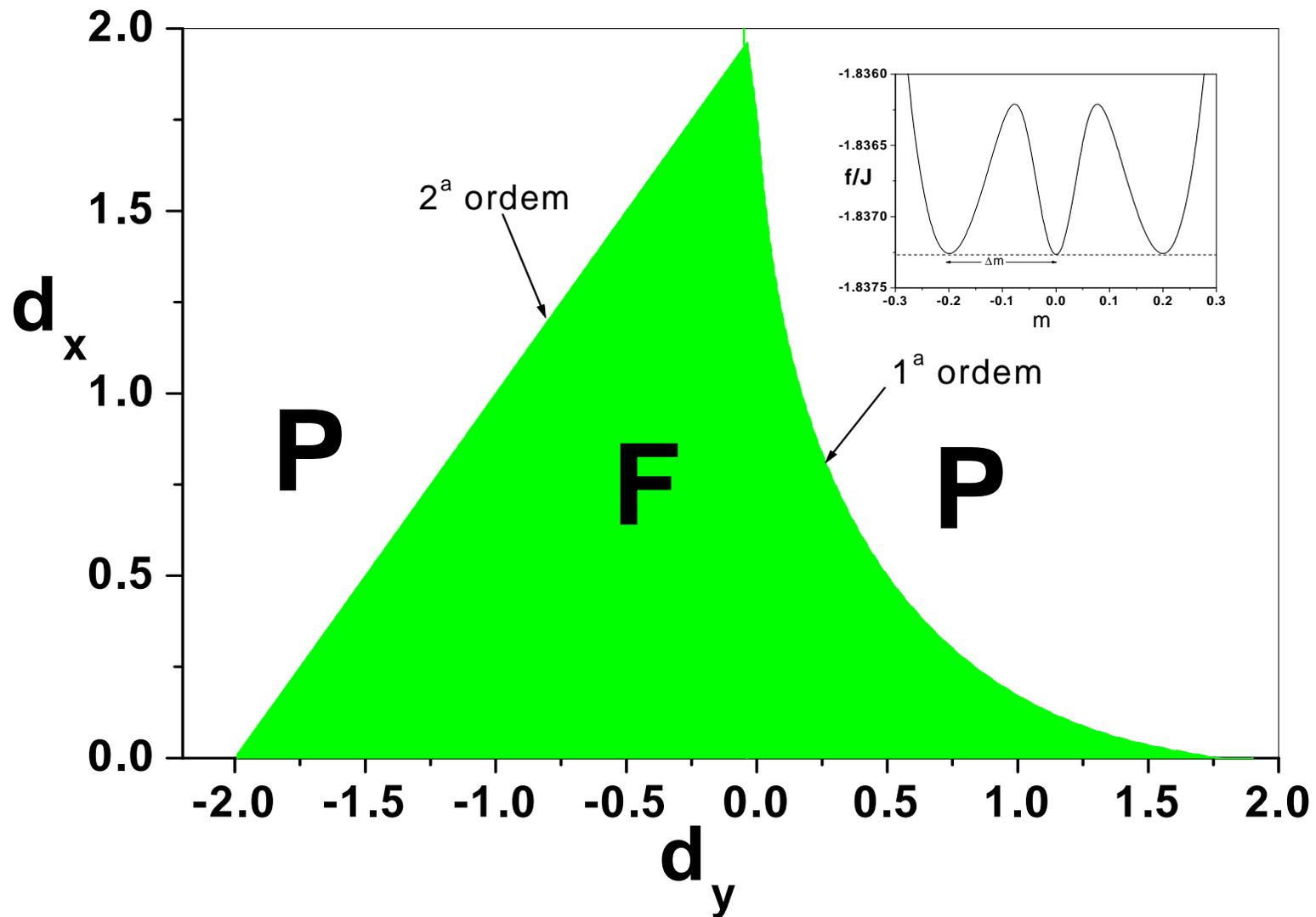
onde $\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\}$ são os autovalores da matriz

$$\mathcal{H}_{oi} = \begin{bmatrix} L^+ & 0 & L^- \\ 0 & 2L^+ & 0 \\ L^- & 0 & L^+ \end{bmatrix}$$

sendo

$$L^\pm = \beta(D_x \pm D_y)/2$$

Diagrama de Fase (T=0)



Modelo de van Hemmen Quântico

$$\mathcal{H}_N = -\frac{J_0}{N} \sum_{i \neq j} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - H \sum_i \sigma_i^z - \Omega \sum_i \sigma_i^x - D_x \sum_i (\sigma_i^x)^2 - D_y \sum_i (\sigma_i^y)^2$$

$$J_{ij} = \frac{J}{N} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i)$$

$$P(\xi_i, \eta_i)$$

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \langle \sigma_i^z \rangle = \frac{1}{N} \frac{\text{Tr} \sum_i \sigma_i^z \exp(-\beta \mathcal{H}_N)}{\text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}_N)},$$

**Parâmetro
de ordem**

$$q_1 = \frac{1}{N} \sum_i \xi_i \langle \sigma_i^z \rangle$$

=

$$q_2 = \frac{1}{N} \sum_i \eta_i \langle \sigma_i^z \rangle$$

$$m = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial K} P(\xi, \eta) d\xi d\eta$$

$$q = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\xi + \eta)}{\Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial K} P(\xi, \eta) d\xi d\eta$$

$$f = \frac{1}{\beta} \left[\frac{1}{2} (k_1 m^2 + 2k_2 q^2) - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(\Gamma) P(\xi, \eta) d\xi d\eta \right]$$

$$k_1 = \beta J_o, k_2 = \beta J, k_3 = \beta H, k_4 = \beta \Omega, k_5 = \beta D_x \text{ e } k_6 = \beta D_y$$

$$K = k_1 m + k_2 [(\xi + \eta)(q_1 + q_2) - (\xi q_1 + \eta q_2)] + k_3$$

$$\Gamma = \sum_{n=1}^3 \exp(\lambda_n)$$

$$P_B(\xi, \eta) = P_B(\xi) P_B(\eta) = \left\{ \frac{1}{2} [\delta(\xi - 1) + \delta(\xi + 1)] \right\} \left\{ \frac{1}{2} [\delta(\eta - 1) + \delta(\eta + 1)] \right\}$$

$$P_G(\xi, \eta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\phi_1^2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2\phi_1^2}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi\phi_2^2}} \exp\left(-\frac{\eta^2}{2\phi_2^2}\right)$$

Resultados

Caso da anisotropia biaxial simétrica ($D_x/J = D_y/J$)

$$D_z = D_y \quad (J_o = 0)$$



$$\mathcal{H}_{\text{UNIAXIAL}} = -\sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z + D_z \sum_i (\sigma_i^z)^2 - \Omega \sum_i \sigma_i^x,$$

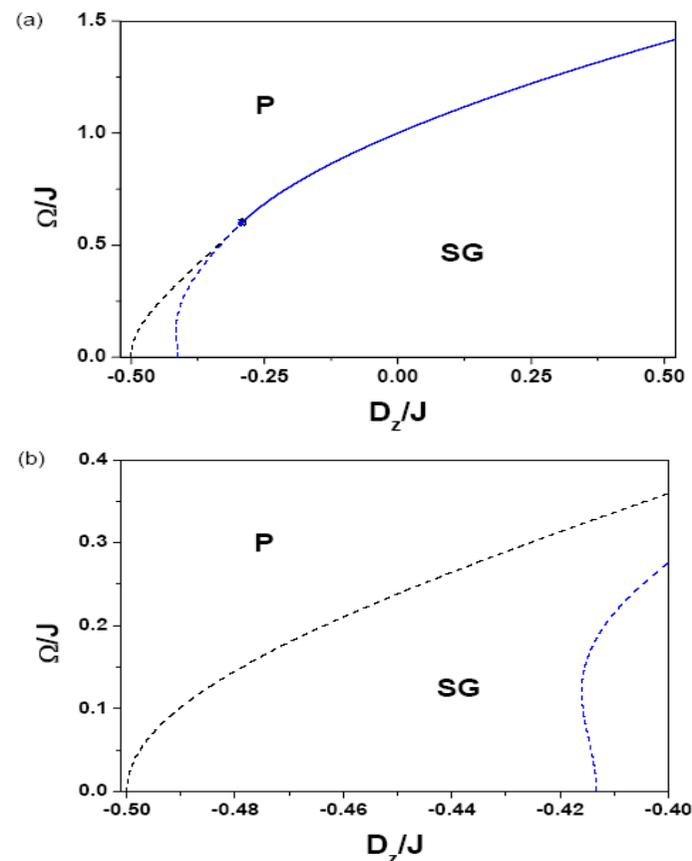


Figura 3.13: Fig.(a) Diagrama de fase do estado fundamental do modelo VH quântico axial no plano $\Omega/J - D_z/J$ obtida a partir das aplicações das distribuições de probabilidades bimodal (linha superior) e gaussiana (linha inferior). As linhas contínuas são de transição de segunda ordem e que as linhas descontínuas são de transições de primeira ordem. Na Fig.(b) temos em detalhe a reentrância observada na linha de transição obtida a partir da DPG.

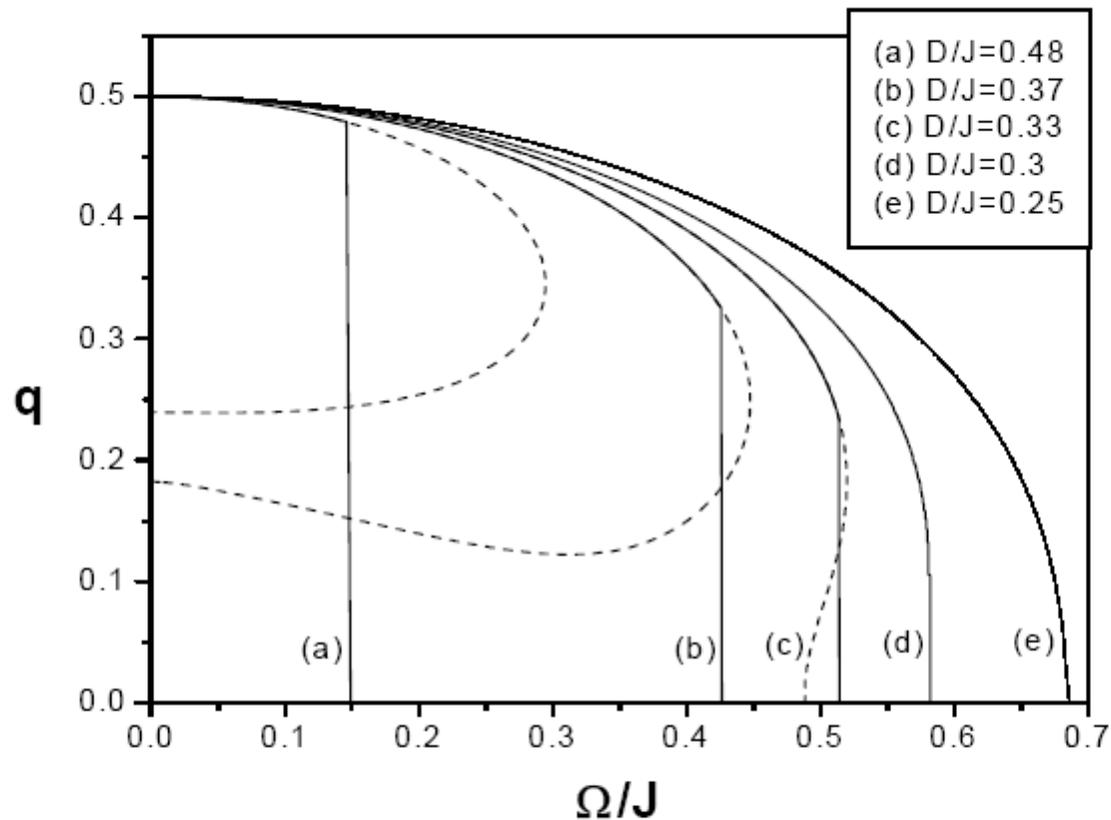


Figura 3.15: Comportamento do parâmetro de ordem vidro de spin q em função do campo transversal no estado fundamental para vários valores de $D_x/J = D_y/J$ usando DPB. As linhas tracejas são soluções instáveis.

Caso da anisotropia biaxial antissimétrica ($D_x/J \neq 0$ e $D_y/J = 0$)

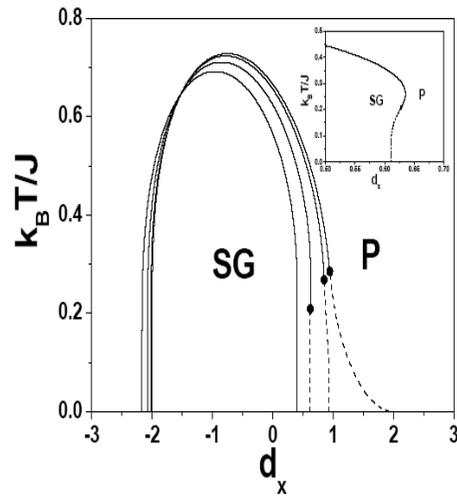


FIG. 1: Phase diagram in the $T - d_x$ plane for the VH biaxial model with $d_y = 0$ and different values of transverse field $\delta (= 0, 0.2, 0.4, 0.6)$ in decreasing order. The continuous (dashed) correspond the second (first)-order phase transition line. The TCP is made by a black circle. The inset shows the region of the reentrant behavior at low temperature for $\delta = 0.4$.

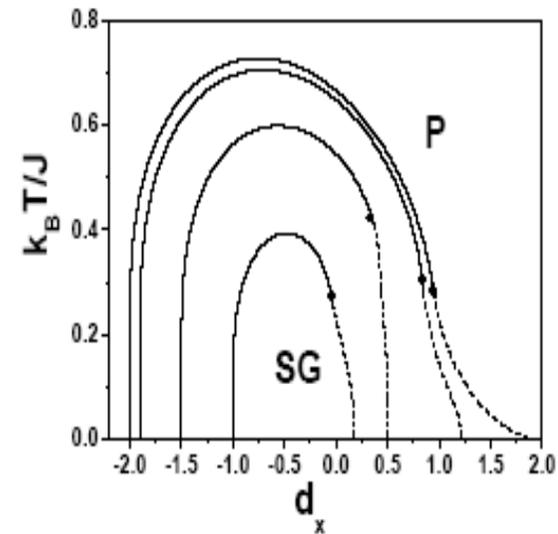


FIG. 2: Phase diagram in the $T - d_x$ plane for the VH biaxial model with $\delta = 0$ and different values of transverse crystal-field $d_y (= 0, 0.1, 0.5, 1)$ in decreasing order. The continuous (dashed) correspond the second (first)-order phase transition line. The TCP is made by a black circle.

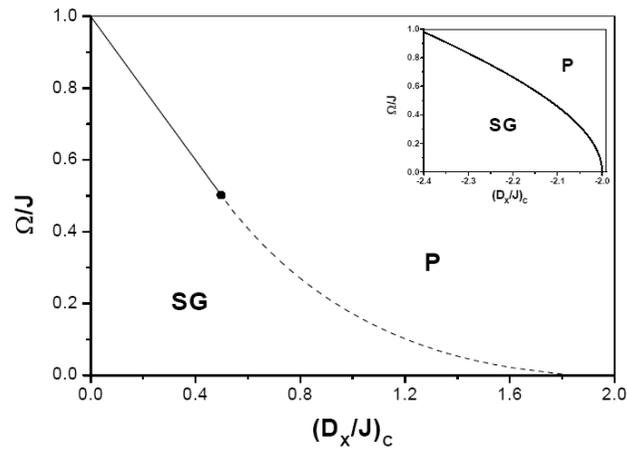


Figura 3.23: Diagrama de fase do estado fundamental no plano $\Omega/J - D_x/J$ para o modelo de VH quântico biaxial com $D_y = 0$ usando a DPB. As linhas contínuas e tracejadas correspondem a transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. A figura menor corresponde ao caso em $D_x/J < 0$.

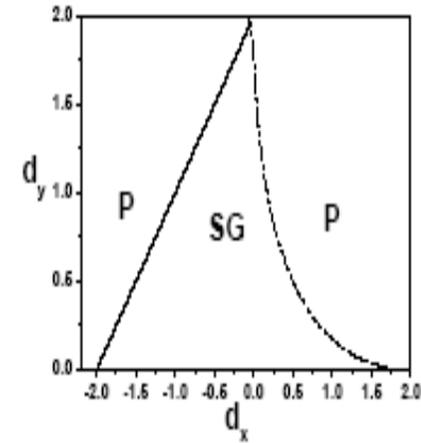


FIG. 4: Ground-state phase diagram in the $d_x - d_y$ plane for the VH biaxial model with $\delta = 0$. The continuous (dashed) line corresponds to the second (first)-order phase transition line.

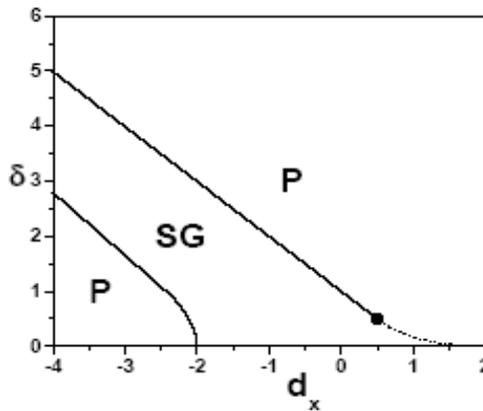


FIG. 5: Ground-state phase diagram in the $d_x - \delta$ plane for the VH biaxial model with $d_y = 0$. The continuous (dashed) line corresponds to the second (first)-order phase transition line.

Modelo de Heisenberg spin 1/2

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)} \frac{J}{r_{ij}^p} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j,$$

Formalismo da Função de Green

$$E \ll A | B \gg_E = \frac{1}{2\pi} \langle [A, B]_\eta \rangle + \ll A^{(1)} | B \gg_E$$

sendo

$$A^{(1)} = [A(t), \mathcal{H}]$$

$$F_{BA}(t-t') = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\{G(w+i\varepsilon) - G(w-i\varepsilon)\}}{e^{\beta w} - \eta} e^{\beta w} e^{-iw(t-t')} dw$$

e

$$F_{AB}(t-t') = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\beta w}}{e^{\beta w} - \eta} \{G(w+i\varepsilon) - G(w-i\varepsilon)\} e^{-iw(t-t')} dw.$$

Resultados

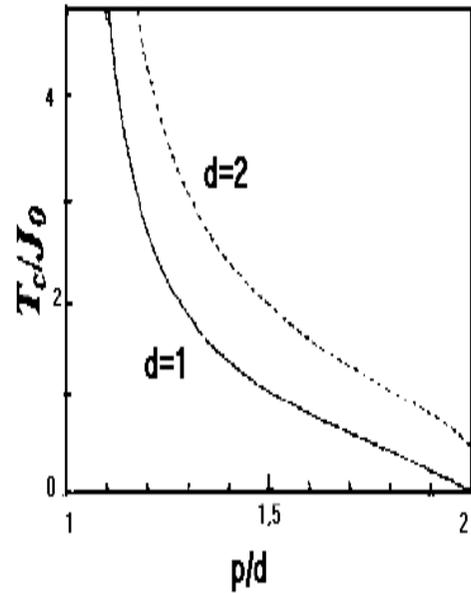


Figura 2.3: Comportamento da temperatura crítica reduzida como função de p/d para o modelo com spin $s = \frac{1}{2}$ obtido pelo formalismo da Função de Green na aproximação RPA [55].

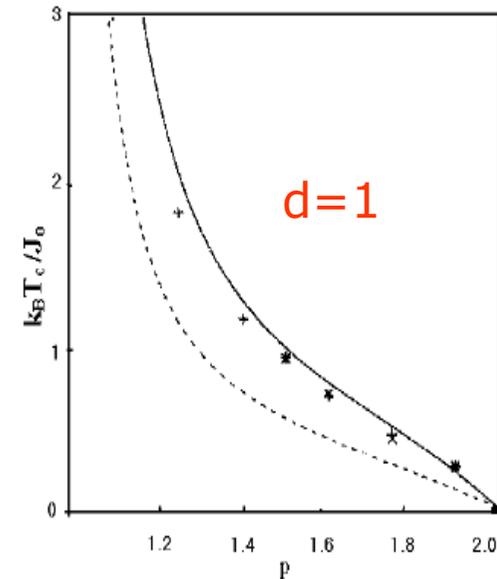


Figura 2.4: Temperatura crítica reduzida como função do parâmetro p para o modelo de Heisenberg quântico de spin $\frac{1}{2}$ unidimensional. A linha tracejada corresponde aos resultados de campo de reação de Onsager [58], a contínua aos resultados de Função de Green [55] e em barra aos resultados de Monte Carlo [60].

Classe de universalidade

Campo médio

$$d < p \leq 3d/2$$



$$\beta = \frac{1}{2}, \gamma = 1, \delta = 3, \alpha = 0, \nu = 1/\sigma, \eta = 2 - \sigma; p = d + \sigma$$

$$3d/2 < p < 2d$$



$$\gamma = \begin{cases} 1, & d < p < \begin{cases} \frac{3d}{2}, & d < 4 \\ d + 2, & d > 4 \end{cases} \\ 1_{\ln}, & p = \frac{3d}{2}, d \leq 4 \\ \frac{p-d}{2d-p}, & \frac{3d}{2} < p < \begin{cases} 2d, & d \leq 2 \\ d + 2, & d > 2 \end{cases} \end{cases}$$

$$\gamma = \begin{cases} \frac{2}{d-2}, & 2 < d < 4, \\ 1_{\ln}, & d = 4 \\ 1, & d > 4, \end{cases}$$

para $p \geq d + 2$, onde x_{\ln} refere-se a dependência logarítmica ($\kappa_o \simeq (T - T_c)^{-1} \ln(1/(T - T_c))$).

$$\delta = \begin{cases} 3, & d < p < \begin{cases} \frac{3d}{2}, & d < 4 \\ d + 2, & d > 4 \end{cases} \\ 3_{\ln}, & p = \frac{3d}{2}, d \leq 4 \\ \frac{p}{2d-p}, & \frac{3d}{2} < p < \begin{cases} 2d, & d \leq 2 \\ d + 2, & d > 2 \end{cases} \end{cases} \quad \alpha = \begin{cases} 0, & d < p < \begin{cases} \frac{3d}{2}, & d < 4 \\ d + 2, & d > 4 \end{cases} \\ 0_{\ln}, & p = \frac{3d}{2}, d \leq 4 \\ \frac{3d-2p}{2d-p}, & \frac{3d}{2} < p < \begin{cases} 2d, & d \leq 2 \\ d + 2, & d > 2 \end{cases} \end{cases}$$

$$\delta = \begin{cases} \frac{d+2}{d-2}, & 2 < d < 4, \\ 3_{\ln}, & d = 4 \\ 3, & d > 4, \end{cases} \quad \alpha = \begin{cases} \frac{d-4}{d-2}, & 2 < d < 4, \\ 0_{\ln}, & d = 4 \\ 0, & d > 4, \end{cases}$$

para $p \geq d+2$.

Relação de escala

$$\gamma = \beta(\delta - 1), \alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad \alpha + \beta(1 + \delta) = 2$$

Tabela II.2: Estimativas do expoente crítico $\gamma(p)$ para o modelo de Heisenberg quântico de spin 1/2 ferromagnético unidimensional com interação de longo alcance para alguns valores de $p > 3/2$. No intervalo $1 < p < 3/2$ o expoente crítico é tipo campo médio. Denotamos por método 1 e 2 os resultados de função de Green e simulação de Monte Carlo, respectivamente.

p	1.5	1.6	1.75	1.9	2.5	3	4
Método 1	1.0	1.5	3.0	9.0	3.0	1.0	2.0
Método 2	1.3	1.5	2.2	2.9	2.5	2.0	1.8

Na região não crítica ($T_c = 0$) o comportamento da susceptibilidade paramagnética para $d \leq 2$ e $p \geq 2d$ temos a seguinte dependência de χ_o com a temperatura

$$\chi_o = \begin{cases} e^{A_d/T}, & p = 2d \\ T^{-\frac{(p-d)}{p-2d}}, & 2d < p < 2 + d \\ T^{-\frac{2}{2-d}} [\ln(\frac{1}{T})]^{\frac{d}{2-d}}, & p = 2 + d \\ T^{-\frac{2}{2-d}}, & p > 2 + d, \end{cases}$$

Absence of Néel order in Heisenberg chains: Long-range antiferromagnetic interactions

J. T. M. Pacobahyba,* Wagner Nunes,[†] and J. Ricardo de Sousa

$$\mathcal{H} = \sum_{i,n=1}^{\infty} J_n \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+n}$$

$$J_n = \frac{(-1)^n J}{|n|^p}$$

$$T_N^{-1} = \frac{8k_B}{N} \sum_k \frac{J_0}{J_0^2 - J_k^2} = \frac{4k_B}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{J_0 dk}{J_0^2 - J_k^2}$$



Ausência de ordem de longo-alcance

Modelo de Heisenberg com anisotropia de íon único

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} \frac{J}{r_{ij}^p} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) - D \sum_i (S_i^z)^2$$

$$Z_2 = 6 \langle (S_i^z)^2 \rangle - 4$$

$$\frac{1}{N} \sum_K \frac{D}{E_{0K}} \coth \left(\frac{\beta E_{0K}}{2} \right) = \frac{(8 - Z_2)}{3Z_2}.$$

$$\frac{4(Z_2 - 2)}{3Z_2^2} = \frac{1}{N} \sum_K \frac{-\beta(2J_0 - J_K)}{4} \operatorname{csc} h^2 \left(\frac{\beta E_{0K}}{2} \right) - \frac{1}{N} \sum_K \frac{J_K}{2E_{0K}} \coth \left(\frac{\beta E_{0K}}{2} \right).$$

$T_c(p, D)$

Região não extensiva

Carvalho, Cosenza e de Cesare, *Physica A* 305, 152 (2002)

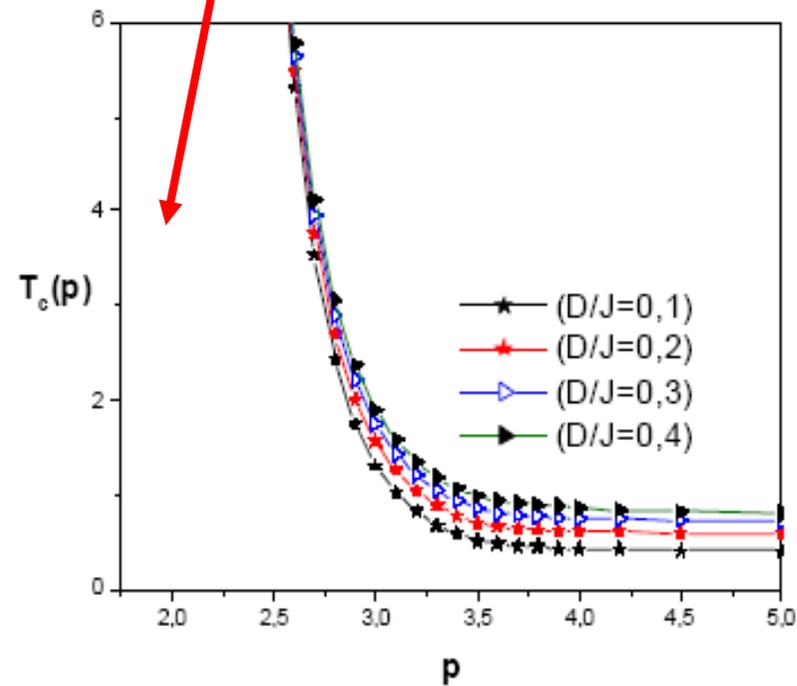
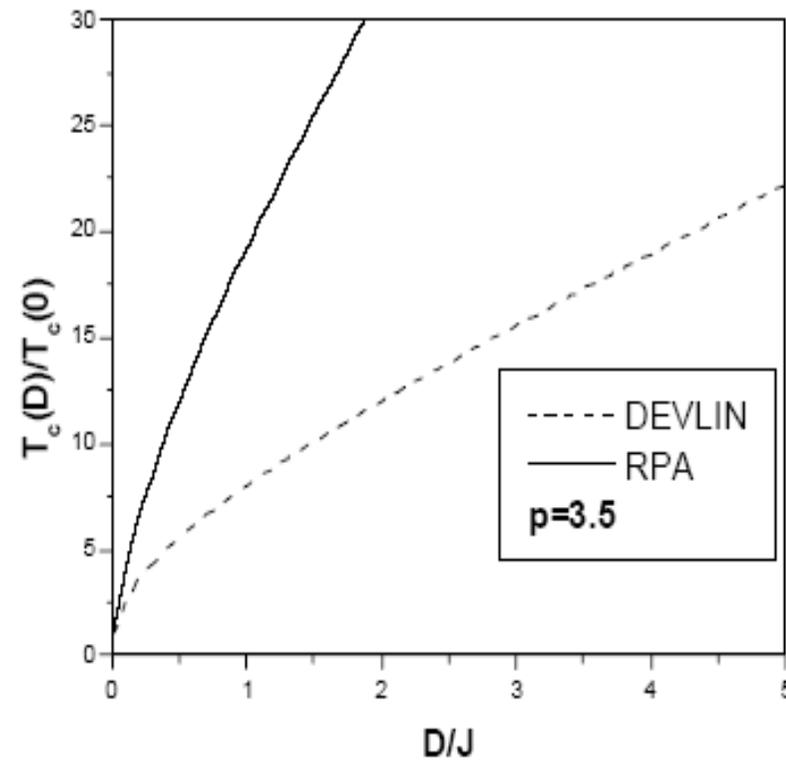
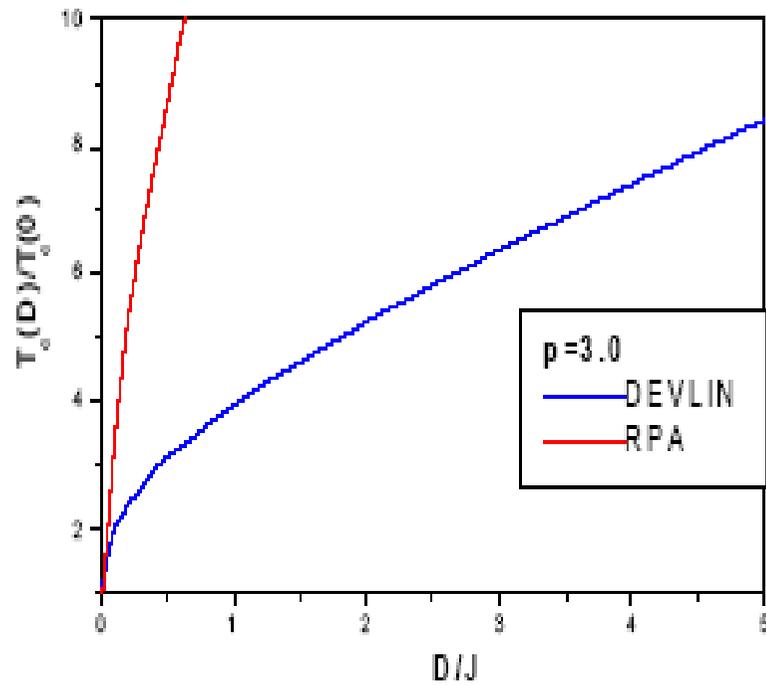


Figura 4.2: Comportamento da temperatura crítica T_c em função do parâmetro de interação de longo alcance p para $D/J = 0.1; 0.2; 0.3; 0.4$ do Modelo de Heisenberg com spin $S=1$ ferromagnético em duas dimensões.

Teorema de Mermin e Wagner

$T_c(p > 2, D = 0) = 0$ em rede $d = 2$





DF

Estudantes

- Márcio Amazonas (doutorando)
- Fabian Litaiff (doutorando)
- Rosana dos Anjos (doutorando)
- Wagner Nunes (doutorando)
- Marcio Gomes (doutorando)
- José Carlos (mestrando)
- Sabrina Ruffo (mestrando)