

Modelo de Ising na rede quadrada através do método *Cluster Mean-Field*

Iago Francisco Mühl, Mateus Schmidt, Matheus Roos
Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Maria
Santa Maria, Brasil

Resumo

1 Equações

No presente trabalho foi realizado um estudo sobre o modelo de Ising com interações entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos em uma rede quadrada. Este modelo pode ser descrito através da hamiltoniana

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad . \quad (1)$$

Onde J é o termo de acoplamento entre os *spins*. σ é a variável de *spin*, que neste caso pode assumir os valores $\pm 1/2$, na prática foram utilizados valores ± 1 para um melhor desempenho computacional. Com "i" e "j" denotando as localizações dos i -ésimos e j -ésimos sítios, respectivamente. A soma estende-se até o N -ésimo sítio da rede.

Neste sistema, temos dois tipos de interações entre pares de sítios, a ferromagnética ($J < 0$) e antiferromagnética ($J > 0$). A interação ferromagnética ocorre quando as variáveis de *spin* que estão interagindo têm a mesma orientação. Já a antiferromagnética ocorre na situação oposta, quando o par de *spins* interagentes têm orientação oposta.

Com a hamiltoniana do modelo definida, o próximo passo para obtermos a termodinâmica do sistema é calcular a função de partição

$$Z = \sum_i e^{-\beta H_i}, \quad (2)$$

onde

$$\beta = \frac{1}{k_B T}. \quad (3)$$

Em que T é a temperatura do sistema e k_B a constante de Boltzmann. Em nossos cálculos adotamos o sistema de unidades naturais, sendo assim, consideramos por simplicidade a constante de Boltzmann como igual a um.

Podemos realizar a conexão com a termodinâmica através da energia livre de Helmholtz

$$f = - \lim_{n_s \rightarrow \infty} \frac{T \ln(Z)}{n_s}. \quad (4)$$

Onde n_s é o número de sítios. E dessa forma, podemos obter todas as quantidades termodinâmicas desejadas, caso o limite exista [5].

Podemos calcular o valor médio de um observável físico O , através da seguinte equação:

$$\langle O \rangle = \sum_i \frac{O e^{-\beta H_i}}{Z}. \quad (5)$$

Dessa forma, o valor médio da magnetização m será dado por

$$m_i = \langle \sigma_i \rangle. \quad (6)$$

Onde m_i é o valor médio da magnetização no sítio i .

Então, utilizando as Eq. (5) e Eq. (6), escrevemos o valor médio da magnetização do i -ésimo sítio como

$$m_i = \sum_i \frac{\sigma_i e^{-\beta H_i}}{Z}. \quad (7)$$

2 Fases

Uma fase em um sistema termodinâmico pode ser definida como um estado específico da matéria que se encontra em equilíbrio termodinâmico. Analogamente, a fase pode ser definida pelo chamado parâmetro de ordem, que é uma quantidade termodinâmica, e neste caso, será a magnetização. Para uma fase desordenada, o parâmetro de ordem é nulo, já para uma fase ordenada, o parâmetro de ordem assume um valor diferente de zero.

O sistema com o qual trabalhamos possui quatro fases distintas, sendo três delas ordenadas. Essas três fases ordenadas são respectivamente: antiferromagnética (AF), superantiferromagnética (SAF) e *staggered dimer* (SD). A fase desordenada é chamada de paramagnética (PM).

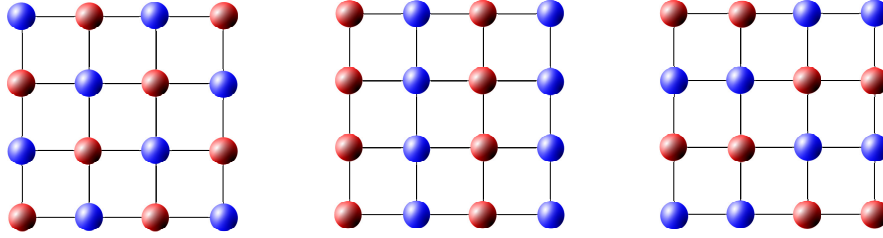


Figura 1: Da esquerda para a direita: fase antiferromagnética (AF), superantiferromagnética (SAF) e *staggered dimer* (SD).

2.1 Fase antiferromagnética

A fase antiferromagnética (AF) é caracterizada por interações antiferromagnéticas entre primeiros vizinhos plenamente satisfeitas, já as interações entre segundos e terceiros vizinhos são frustradas. A frustração se dá por conta das interações de segundos e terceiros vizinhos não serem simultaneamente satisfeitas. Isso pode ser observado na Fig. (2), que exhibe a configuração de *spins* da fase AF, onde os círculos em azul representam os *spins* de orientação positiva e os em vermelho, de orientação negativa. Esta convenção será utilizada nas demais figuras desta seção.

Na fase AF, a energia por sítio no estado fundamental, ou seja, na ausência de flutuações térmicas, é

$$U_{AF} = -2J_1 + 2J_2 + 2J_3. \quad (8)$$

Como é possível notar na Eq. (8), o estado AF depende das três interações, sendo que as interações entre segundos e terceiros vizinhos introduzem frustração ao sistema.

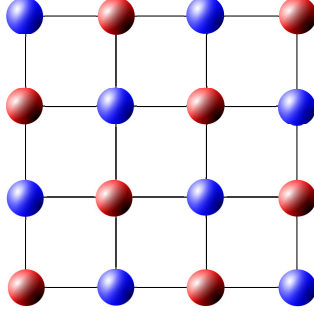


Figura 2: Configuração de *spins* para a fase AF.

A fase AF, por ter duas configurações de *spins* que possuem a mesma energia no estado fundamental, é portanto, duas vezes degenerada.

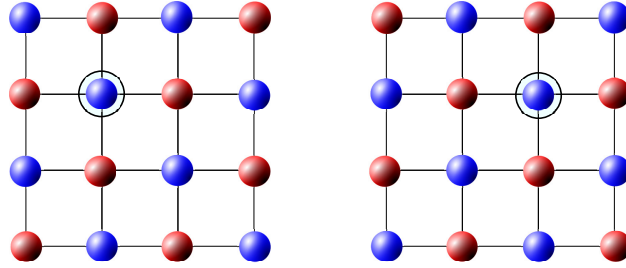


Figura 3: Degenerescência da fase AF.

A Fig. (3) ilustra a degenerescência desta fase, obtida transladando a rede da esquerda por um espaçamento de rede, em outras palavras, fazendo uma inversão global de *spins*.

2.2 Fase superantiferromagnética

A fase superantiferromagnética (SAF) é caracterizada por ter todas as interações antiferromagnéticas entre segundos vizinhos plenamente satisfeitas. Dessa forma, as interações entre primeiros vizinhos são parcialmente satisfeitas e também cancelam-se mutuamente, já as interações entre terceiros vizinhos são frustradas.

Na fase (SAF), a energia por sítio no estado fundamental é:

$$U_{SAF} = -2J_2 + 2J_3. \quad (9)$$

Observamos que a energia da fase SAF é dada apenas em termos de J_2 e J_3 , isso ocorre pois a contribuição de J_1 ocorre entre pares sítios alinhados e

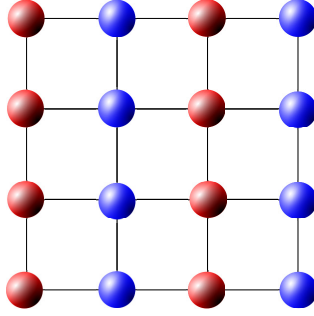


Figura 4: Configuração de *spins* para a fase SAF.

anti-alinhados em mesma quantidade, resultando em uma contribuição nula para a energia no estado fundamental.

A fase SAF é quatro vezes degenerada, como notamos na Fig.([FIGURA DEGENERESCENCIA SAF](#))

2.3 Fase *staggered dimer*

A fase *staggered dimer* (SD) é caracterizada por ter três interações entre primeiros vizinhos com spins anti-alinhados e uma interação entre primeiros vizinhos com um *spin* alinhado. Em uma de suas possibilidades, pode ser identificada visualmente por um *zig-zag* entre pares, como representado na Fig. 5.

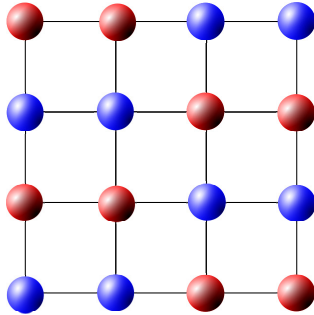


Figura 5: Configuração de *spins* para a fase SD.

Desse modo, na fase *staggered dimer* (SD) a energia por sítio no estado fundamental é

$$U_{SD} = -J_1. \quad (10)$$

A energia no estado fundamental dessa fase é dada apenas por J_1 , pois análogo ao o que ocorre na fase SAF, há um cancelamento mútuo entre in-

terações. Na fase SD as interações de segundos e terceiros vizinhos cancelam-se mutuamente.

A fase staggered dimer (SD), por conta de sua configuração peculiar, é oito vezes degenerada, ou seja, oito configurações diferentes que apresentam a mesma energia por sítio no estado fundamental.

FIGURA 8 DEGENERECENCIA SD

2.4 Diagrama do Estado Fundamental

Analisando as energias por sítio de cada uma das fases, podemos obter o diagrama do estado fundamental. Por conveniência, normalizamos as equações das energias do estado fundamental pelo fator de escala de energia J_1 . Assim, obtemos as seguintes expressões:

$$\frac{U_{AF}}{J_1} = 2\frac{J_2}{J_1} + 2\frac{J_3}{J_1} - 2. \quad (11)$$

$$\frac{U_{SAF}}{J_1} = -2\frac{J_2}{J_1} + 2\frac{J_3}{J_1}. \quad (12)$$

$$\frac{U_{SD}}{J_1} = -1. \quad (13)$$

Como nas fronteiras entre as fases, a energia do estado fundamental de cada uma é a mesma, igualamos as energias entre as fases para obter suas fronteiras em termos de J_2/J_1 e J_3/J_1 .

Para a fronteira AF-SD, igualamos as Eq. (11) e a Eq. (13), e então dividimos por um fator 2, obtendo:

$$\frac{J_3}{J_1} = \frac{1}{2} - \frac{J_2}{J_1}. \quad (14)$$

Essa é uma equação do primeiro grau, decrescente e de raiz $\frac{1}{2}$, em outras palavras, é zero quando $J_2/J_1 = 0.5$. Com coef. angular igual a unidade.

Para a fronteira SAF-SD, fazemos o procedimento análogo ao anterior, resultando em:

$$\frac{J_3}{J_1} = \frac{J_2}{J_1} - \frac{1}{2}. \quad (15)$$

A Eq. (15) é linear, crescente, de coeficiente linear -0.5 e da mesma forma que a Eq. (14), tem raiz $\frac{1}{2}$.

Para a fronteira AF-SAF, temos:

$$\frac{J_2}{J_1} = \frac{1}{2}. \quad (16)$$

Como podemos observar, a fronteira AF-SAF no estado fundamental não depende de J_3 . Isso se deve pois a contribuição de J_3 em ambas as fases é a mesma, ou seja, anula-se ao igualarmos as energias.

É interessante ressaltar que a região de maior frustração nesse sistema (para o caso de $J_3 < 0$) é próximo de $J_2/J_1 = 0.5$.

O diagrama foi obtido através das equações (14), (15) e (16).

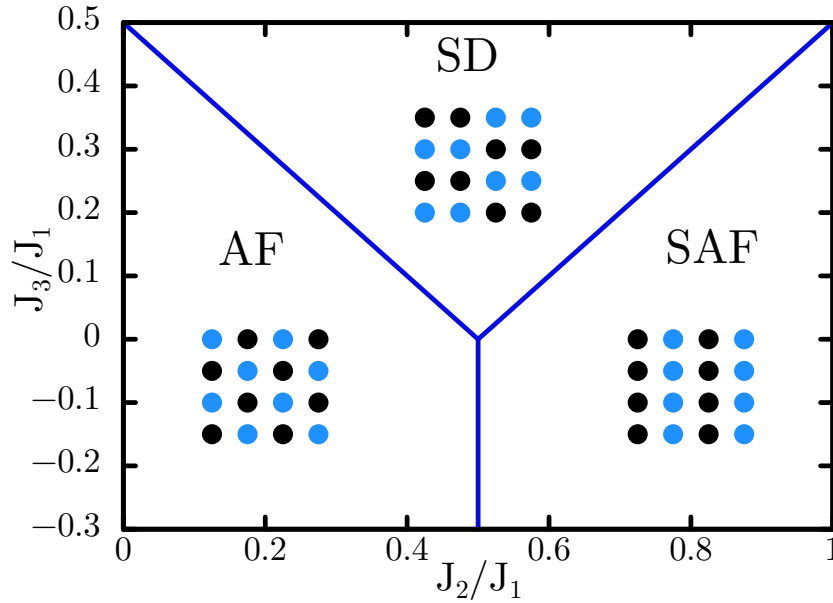


Figura 6: Diagrama de fases do estado fundamental.

Na Fig. (6) apresentamos o diagrama de $J_3/J_1 \times J_2/J_1$ para o estado fundamental. Onde no eixo horizontal temos a magnitude da interação J_2 , e no eixo vertical a de J_3 , ambas normalizadas por J_1 . Nesta notação, adotamos $J_3 > 0$ representando as interações antiferromagnéticas, e por conseguinte, nas interações ferromagnéticas, ($J_3 < 0$). Desse modo, notamos a ocorrência da fase SD apenas para $J_3 > 0$, ou seja, antiferromagnético.

Estamos trabalhando com interações J_3 fraca, ou seja, $|J_3| < 0.5$. Isso se deve por conta da ocorrência de outra fase ordenada quando $J_3 > 0.5$, ou seja, quando a interação J_3 é antiferromagnética e dominante, e que não é objeto do nosso estudo. Nos mantivemos em $-0.5 \leq J_3 \leq 0.5$ para observar os efeitos que J_3 fraco pode ocasionar nas transições de fase do sistema.

2.5 Transições de fase

Transições de fase são caracterizadas por uma mudança qualitativa nas propriedades e no comportamento do sistema. A água, por exemplo, possui transições de fase, quando ao diminuir a sua temperatura até uma temperatura crítica, esta passa do estado líquido para o sólido. Também quando aquecemos a água até uma temperatura crítica, ocorre uma transição de fase, do estado líquido para o gasoso. Uma transição de fase pode ser acessada através de um parâmetro de controle, como a pressão, a temperatura, um campo externo, dentre outros.

Em sistemas magnéticos, transições de fase se comportam de forma similar. Nesse tipo de sistema, podemos acessar uma transição de fase ao variarmos a temperatura, o campo magnético, a intensidade da interação entre *spins* (em um sistema de *spins* interagentes), dentre outros parâmetros de controle.

Na natureza, as transições de fase podem ser de dois tipos, de primeira ou de segunda ordem.

Transições de primeira ordem são caracterizadas por exibir uma descontinuidade na derivada primeira da energia livre em relação a temperatura. Esta descontinuidade na derivada primeira ocorre exatamente no cruzamento entre as energias livres das fases.

As transições de segunda ordem, por sua vez, exibem a derivada primeira da energia livre em relação a temperatura, contínua, enquanto que a derivada de segunda ordem é descontínua. Nesse caso, identificamos uma transição de segunda ordem no ponto onde o parâmetro de ordem vai a zero.

Outro conceito importante para ser apresentado é ponto tricrítico. Esse ponto indica a mudança da natureza da transição de fase, em outras palavras, identifica onde a transição passa de primeira para segunda ordem.

Para o nosso caso em particular, o parâmetro de ordem utilizado é a magnetização, que pode ser obtida (quem é obtida é A magnetização) obtida através da derivada da energia livre em relação à (não vai crase com palavra masculina) a um campo magnético conjugado. Em transições de primeira ordem, o parâmetro de ordem apresenta uma descontinuidade em relação à temperatura. Já em transições de segunda ordem, o parâmetro não apresenta descontinuidade, (mas sua derivada em relação à temperatura apresenta) tem certeza disso?.

O parâmetro de ordem recebe configurações diferentes para cada fase ordenada, ou seja, ele depende da fase em questão (isso é óbvio, uma vez que ele define a fase) assume uma forma específica para cada fase, como vemos a seguir. Desse modo particularizamos da seguinte forma:

- Magnetização Parâmetro de ordem para a fase AF:

$$m_{AF} = \frac{m_1 - m_2 - m_3 + m_4}{4}. \quad (17)$$

(No qual, podemos escrever:

$$m_1 = -m_2 = -m_3 = m_4. \quad (18)$$

) Esta parte tu transfere lá pra hamiltoniana. Use como argumento: utilizando a eq. (tal), que descreve o parâmetro de ordem para a fase tal, podemos escrever: e vem com a eq.

- Magnetização **Parâmetro de ordem** para a fase SAF:

$$m_{SAF} = \frac{m_1 - m_2 + m_3 - m_4}{4}. \quad (19)$$

Mesma coisa aqui. De modo que:

$$m_1 = -m_2 = m_3 = -m_4. \quad (20)$$

- Magnetização **Parâmetro de ordem** para a fase SD:

$$m_{SD} = \frac{m_1 + m_2 - m_3 - m_4}{4}. \quad (21)$$

E aqui.

Por conseguinte:

$$m_1 = -m_2 = m_3 = -m_4. \quad (22)$$

A magnetização local de cada *spin* será necessária para a utilização da aproximação de campo médio.

3 CMF

Resultados exatos para a rede quadrada com spins de Ising existem apenas para interações de primeiros vizinhos e sem a ação de um campo externo [2]. Sendo assim, para que possamos estudar redes com interações mais distantes que primeiros vizinhos é necessária a utilização de uma abordagem aproximativa.

No nosso estudo, utilizamos a técnica de campo médio com clusters (TCMC), com clusters de quatro sítios, sendo este uma sub-rede derivada da rede infinita periódica. A escolha do cluster é feita respeitando as simetrias do problema e a capacidade do cluster apresentar as propriedades da rede infinita.

Melhorou bastante a descrição do cluster. No entanto, creio que conseguirá explicar de forma mais fluida se vier do caso mais geral, e vir particularizando com conclusões lógicas. Vou te passar o caminho:

- Traga um figura com a rede da fase AF, de dimensão 6 sítios por 6 sítios (sem clusters).
- Fale que o cluster pode, a princípio, possuir qualquer formato e número de sítios. No entanto, essa escolha pode impactar nos resultados, então há uma escolha melhor.
- Justifique a escolha de um cluster quadrado, diga pq um cluster em linha, para os nossos propósitos não é o ideal. Isso limita nossa escolha a um cluster de $n_s n_s$ sítios.
- Fixamos o formato, mas qual o número de sítios. As fases que estudados possuem uma paridade em seu padrão de repetição. Então n_s deve ser par, ímpar, ou qualquer?
- Traga uma figura e mostre para fase AF, um cluster 2×2 sítios e outro cluster 3×3 , para uma rede 6×6 .
- A princípio, quanto mais sítios melhor. Discuta pq será melhor.
- Finalmente, depois de tudo isso, qual o número n_s ?

A adoção de um cluster de dimensões ~~2x2~~ 2×2 se deve a dois motivos principais, ~~a.~~ A simetria do problema e ~~ao~~ custo computacional. Um cluster de 9 sítios, por exemplo, não seria o ideal por conta do número ímpar de sítios, o qual influenciaria diretamente no cálculo das interações *intracluster* e dessa forma não respeitaria as interações que configuram as fases em si.

Um meio para resolver isso seria adotarmos clusters de 16 sítios, que respeitariam a simetria do problema. Mas como o custo computacional do problema cresce exponencialmente com o tamanho do cluster adotado e o cluster de 4 sítios apresenta um comportamento qualitativamente satisfatório, principalmente na identificação das transições e do ponto tricrítico [1], o adotamos em detrimento da temperatura de ordenamento.

O cálculo das interações é dividida em termos intracuster e interclusters. Então, aproximamos a hamiltoniana de Ising da Eq. (1) através da hamiltoniana H_{CMF} :

$$H \approx H_{CMF} = H_{intra} + H_{inter}. \quad (23)$$

O cálculo da hamiltoniana *intracuster* é realizado via enumeração exata, cuja considera apenas **computa** as interações entre os sítios do cluster central **via enumeração exata**. Podemos escrever a hamiltoniana *intracuster*, que é compartilhada por todas as fases, da seguinte forma:

$$H_{intra} = J_1(\sigma_1 + \sigma_4)(\sigma_2 + \sigma_3) + J_2(\sigma_1\sigma_4 + \sigma_2\sigma_3). \quad (24)$$

Há interações J_3 intracuster? Comente isso

Já o cálculo da contribuição *inter-cluster*, depende da configuração de cada uma das fases ordenadas **Toda hamiltoniana dependerá da configuração da fase, tanto H_{intra} como esta**. Neste cálculo, utilizamos a **Para os termos intercluster, computamos via** aproximação de campo médio, q. **Que** entra na aproximação da interação entre um sítios do cluster vizinho σ_j com um sítio do cluster central σ_i .

De forma geral, podemos escrever a hamiltoniana *intercluster* da seguinte forma:

$$\begin{aligned} H_{inter} = & J_1[\sigma_1(\sigma'_2 + \sigma_3) + \sigma_2(\sigma'_1 + \sigma_4) + \sigma_3(\sigma'_4 + \sigma_1)\sigma_4(\sigma'_3 + \sigma_2)]/2 \\ & + J_2[\sigma_1(\sigma_4 + 2\sigma'_4) + \sigma_2(\sigma_3 + 2\sigma'_3) + \sigma_3(\sigma_2 + 2\sigma'_2) + \sigma_4(\sigma_1 + 2\sigma'_1)]/2 \\ & + 2J_3[\sigma_1(\sigma_1 + \sigma'_1) + \sigma_2(\sigma_2 + \sigma'_2) + \sigma_3(\sigma_3 + \sigma'_3) + \sigma_4(\sigma_4 + \sigma'_4)]/2 \end{aligned} \quad (25)$$

Existe alguma diferença entre σ'_i e σ_i ?

A aproximação de campo médio é fornecida mediante a equação:

$$\sigma_i\sigma_j \approx \sigma_i m_j + \sigma_j m_i - m_i m_j. \quad (26)$$

Antes de particularizar para cada uma das fases, aplique a aproximação de campo médio na hamiltoniana H_{inter} .

Comente, que diferentemente da hamiltoniana intra, esta dependerá também da magnetização.

Particularizando para cada fase ordenada, a magnetização da a fase AF pode ser escrita como **a partir das expressões para os parâmetros de ordem**:

Mova esta equação lá pro final da discussão das fases.

$$m_{AF} = \frac{m_1 - m_2 - m_3 + m_4}{4}. \quad (27)$$

À fim de simplificação, escrevemos a hamiltoniana H_{inter} de cada fase em termos da magnetização do sítio 1.

No qual, podemos escrever:

$$m_1 = -m_2 = -m_3 = m_4. \quad (28)$$

Desse modo, a hamiltoniana *intercluster* para a fase AF será:

$$H_{inter;AF} = (-2J_1 + 3J_2 + 4J_3)(\sigma_1 - \sigma_2 - \sigma_3 + \sigma_4 - 2m_1)m_1. \quad (29)$$

Pode-se notar a dependência pelas interações até terceiros vizinhos para a fase AF na hamiltoniana *intercluster*, assim como ocorre no estado fundamental.

Para a fase SAF, o parâmetro de ordem pode ser escrito como:

$$m_{SAF} = \frac{m_1 - m_2 + m_3 - m_4}{4}. \quad (30)$$

De modo que:

$$m_1 = -m_2 = m_3 = -m_4. \quad (31)$$

Assim, a hamiltoniana *intercluster* para a fase SAF será dada por:

$$H_{inter;SAF} = (-3J_2 + 4J_3)(\sigma_1 - \sigma_2 + \sigma_3 - \sigma_4 - 2m_1)m_1. \quad (32)$$

A fase SAF independe da interação J_1 *interclusters*. Sendo assim, a mesma dependência que foi observada no estado fundamental.

Para a fase SD, o parâmetro de ordem adotado será:

$$m_{SD} = \frac{m_1 + m_2 - m_3 - m_4}{4}. \quad (33)$$

Por conseguinte:

$$m_1 = -m_2 = m_3 = -m_4. \quad (34)$$

Tu definiu o parâmetro de ordem da fase em listras verticais, mas na eq. acima tu escreveu como padrão de listras horizontais. Defina apenas uma forma!

A hamiltoniana *intercluster* para a fase SD pode ser escrita como:

$$H_{inter;SD} = (-2J_1 + J_2)(\sigma_1 + \sigma_2 - \sigma_3 - \sigma_4 - 2m_1)m_1. \quad (35)$$

Na contribuição *intercluster* para a fase $SD_{\bar{7}}$ nota-se a independência da interação J_3 , aspecto também encontrado no estado fundamental. **Faltou comentar o mais importante, neste caso, nem a hamiltoniana intra, como a inter, dependem de J_3 .** Mas por outro lado, apresenta dependência de J_2 , aspecto não encontrado no estado fundamental.

Este parágrafo está deslocado, tu deve falar da técnica e justificar seu uso, antes de utilizá-la, não depois que tu já usou. Portanto, mova este parágrafo lá pro momento em que tu tá escolhendo a técnica aproximativa. A técnica de campo médio com clusters apresenta vantagens e desvantagens frente as outras técnicas aproximativas. No caso da temperatura de ordenamento por exemplo, a técnica CMF superestima a temperatura de ordenamento, quando comparada com outras técnicas como as simulações de Monte Carlo. Por outro lado, o termo de acoplamento entre spins mantém boa precisão. Nosso objetivo é investigar as transições de fase do modelo e determinar a localização do ponto tricrítico, aspectos em que a técnica apresenta ótimos resultados para sistemas semelhantes, como no modelo de Ising J_1 - J_2 [1], por estas razões utilizamos esta abordagem.

3.1 Cluster para a fase antiferromagnética:

Não há a necessidade de uma seção para cada cluster de cada fase. Crie apenas uma para comentar as diferenças da fase SD

Mova este cluster lá pra seção que discute a técnica. Tu mostra um monte de eq. fala das interações e não tem nenhuma figura pra indicar.

Na Fig. (7) que apresenta o cluster adotado para a fase, as linhas sólidas denotam interações intracluster e as linhas tracejadas indicam interações interclusters.

As interações entre primeiros vizinhos estão representadas na cor preta, as interações entre segundos vizinhos estão em cor vermelha e entre terceiros vizinhos na cor verde. Esta convecção será utilizada no restante da seção.

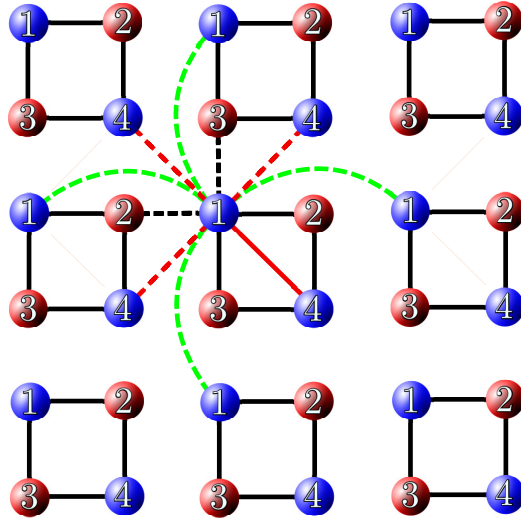


Figura 7: Cluster da fase antiferromagnética. Sempre suba as figuras com o rótulo 'ht' ao invés de só 'h'.

Os círculos indicam a localização dos sítios na rede. As cores representam a orientação de spin dos sítios, seguinte a mesma representação da seção precedente.

3.2 Cluster para a fase superantiferromagnética:

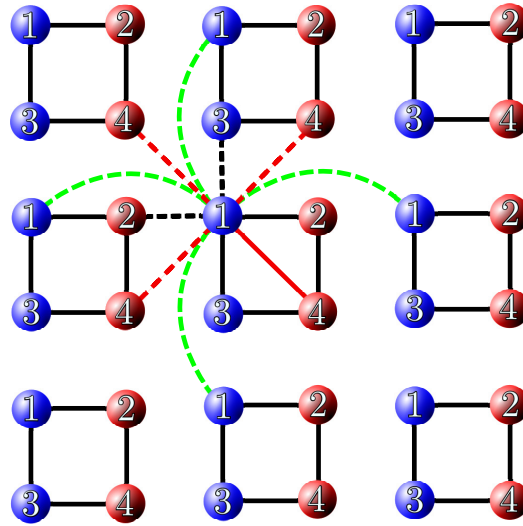


Figura 8: Cluster da fase superantiferromagnética.

3.3 Cluster para a fase *staggered dimer*:

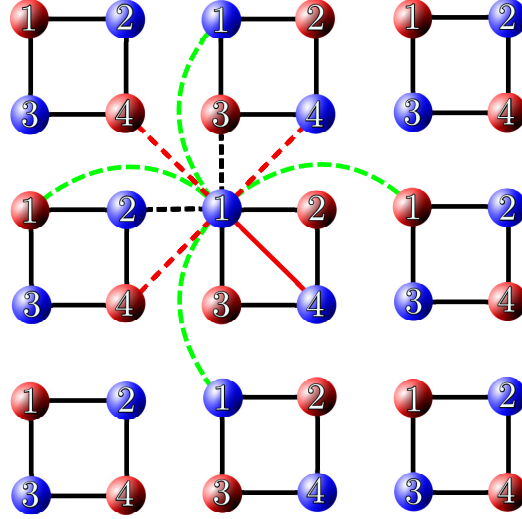


Figura 9: Cluster da fase *staggered dimer*.

A fase *staggered dimer* se diferencia das demais por possuir duas possibilidades de cluster com interações intracluster distintas. Uma que se assemelha ao cluster da fase AF e outra ao da fase SAF. Outra peculiaridade da fase em questão, visível na Fig. (9), é o fato de que todos os sítios do sistema podem ser encontrados em orientação positiva e negativa, o sítio 1 por exemplo, aparece tanto em vermelho quanto em azul na figura, essa particularidade faz com que seja necessário uma condição especial na obtenção da hamiltoniana. Esta última frase não tem sentido.

Não fale em termos de sítios, pq assim tua frase fica sem sentido. spin positivo e negativo é óbvio, são as duas possibilidades de spins.

Troque por cluster, fale que tu pode ter cluster idênticos a menos de uma inversão global de spins. Isso possui sentido.

Esta fase em questão, não depende da interação J_3 , como mostra a Eq. (35), mas por outro lado, as demais fases dependem. De modo que, a intensidade de J_3 influenciará o intervalo J_2/J_1 de ocorrência da fase SD.

Nessa fase, utilizamos o rótulo *prime* para expressar $m'_i = -m_i$.

Como foi apontado, a opção de escolha **apropriada** do cluster é importante no estudo da fase SD.

Mostre uma figura com um cluster para a fase SD, onde os termos intracluster são como da fase AF e noutro como da fase SAF.

Calcule a hamiltoniana intracluster para a fase SD para cada um destes dois clusters.

Compare este resultado com o encontrado no estado fundamental.

Em nosso estudo, utilizamos a escolha que se assemelha à fase SAF pois nessa escolha a frustração é introduzida pelas interações de primeiros vizinhos calculadas através de diagonalização exata (Tu não está utilizando diagonalização exata), ou seja, essa escolha se traduz em maior em melhor incorporar a frustração no do sistema [4].

4 Obtenção da magnetização

A obtenção da magnetização de cada sítio se dá através de uma auto-consistência. De forma prática, damos um chute inicial m_{guess} , e comparamos este chute com o valor m calculado através da Eq. (7).

A diferença entre o valor calculado e o chute inicial deve ser menor que uma certa tolerância, arbitrária a princípio, mas adequada ao problema.

$$tol \geq |m_{guess} - m| \quad (36)$$

Caso essa diferença seja maior do que a tolerância, o valor de m calculado será atribuído ao chute inicial e a diferença recalculada, esse processo segue até que a diferença entre m_{guess} e m satisfaça a condição de tolerância. Nossos resultados foram obtidos com a tolerância igual a 10^{-8} .

Quando a Eq. (36) é finalmente satisfeita, o valor de m é adotado como a magnetização de fato.

Coloque um fluxograma explicando esse algoritmo da auto-consistência.

Crie uma seção, e plote duas linhas para a transição SAF-PM, de primeira, obtida apenas via parâmetro de rodem (a utilizada na transição de segunda ordem) e outra, com cruzamento das energia livres no regime $0.5 < J_2/J_1 < g^*$, e no restante do espectro quando o parâmetro de ordem é nulo.

5 Diagramas de fase

Nossos resultados são apresentados na Fig.(10), em que obtemos os diagramas de fase no intervalo de $-0.3 \leq J_3 \leq 0.2$, onde os valores positivos de J_3 indicam interação antiferromagnética entre terceiros vizinhos.

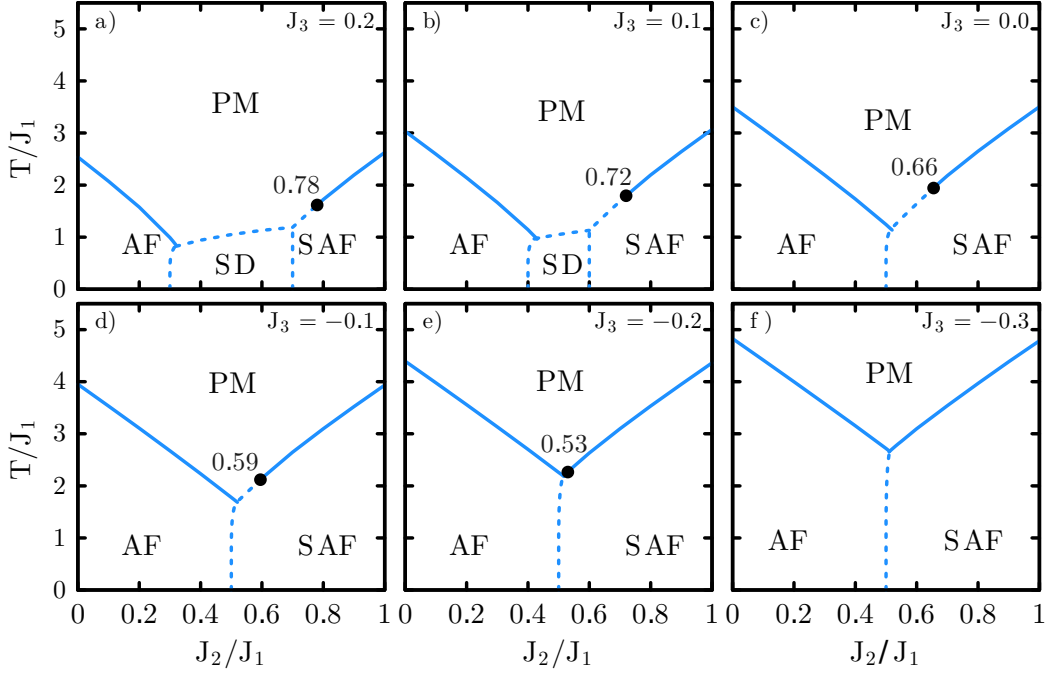


Figura 10: Diagramas de Fase.

Nos diagramas, as linhas tracejadas representam transições de primeira ordem, enquanto que as linhas sólidas denotam transições de segunda ordem, o círculo preto nos diagramas representa o ponto tricrítico.

As transições de primeira ordem que se apresentam verticalmente, como as fronteiras AF-SD, SD-SAF e AF-SAF, foram obtidas com valores fixos de temperatura e variando a intensidade de J_2 , sendo identificadas através do cruzamento das energias livres.

Para as transições de primeira ordem horizontais, como SD-PM e SAF-PM, o ponto de transição foi obtido com J_2 fixo e a temperatura variável, também identificando as fronteiras através das energias livres.

No caso das transições de segunda ordem, AF-PM e SAF-PM, todas foram obtidas através da variação de temperatura com J_2 fixo, e identificadas pelo zero do parâmetro de ordem.

O ponto tricrítico é encontrado no ponto onde não há mais o cruzamento

entre as energias livres. A precisão da identificação do ponto tricrítico é de duas casas decimais, ~~sendo que a variação é~~ , **com erro** de ± 0.005 .

Tomando como referência o painel (c) da Fig. (10), que reproduz os resultados do modelo de Ising $J_1 - J_2$, podemos comparar os resultados obtidos com os dispostos na literatura. ~~Notamos, por exemplo, que a localização do ponto tricrítico através da técnica CMF no cluster de 4 sítios com $J_3 = 0$, difere um pouco do encontrado por Monte Carlo [1].~~ Através da técnica de Monte Carlo (MC) ,**em um estudo recente** [1], o ponto tricrítico é **foi** localizado em 0.67, e . ~~Enquanto que o obtido por nossos estudos~~ **resultados** ~~se encontra em~~ **indicam** $g^* \approx 0.66$. Também observamos que os resultados obtidos por MC apresentam uma temperatura de ordenamento menor do que a encontrada por CMF. ~~Por outro lado,~~ **'Por outro lado' tá totalmente equivocado aqui. Tu dá a ideia que vai mostrar um outro lado a cerca da temp. de ordenamento, mas tu comenta outra coisa (ponto triplo). Nossos estudos (tu repete muito 'nossos estudos', procure sinônimos, além que nesta etapa da discussão é 'nossos resultados')** **resultados** ~~foram capazes de identificar o~~ **indicam a existência de um** ponto triplo ~~a~~ à temperatura finita (**Qual a condição de existência de um ponto triplo?**); ~~identificável ('identificável' é meu ovo, pare de usar essa flexão verbal, ela não se encaixa em descrições científicas.)~~ , **conforme podemos identificar** nos painéis (a) e (b); ~~resultado que não é obtido por MC~~ **Por outro lado, resultados de simulações de MC não indicam a presença deste ponto triplo à temperatura finita** [3].

Nos diagramas, os pontos onde a temperatura de ordenamento é a menor são os pontos de maior frustração do sistema (**reescreva esta frase, inverta a ordem, fale que uma característica da frustração é a redução da temperatura de ordenamento, peque um diagrama pra mostrar onde há a maior frustração é justamente a tendência de redução da temp. de ordenamento.** Esse ponto é localizado entre a fase AF e a respectiva fase ordenada que faz fronteira com a citada **Esta frase tá mal coloca, reescreva. (e estes pontos entre a fase SD e SAF, não há redução de temp.?).** Isso ocorre nos pontos onde as transições de primeira e segunda ordem são **estão** muito próximas e qualquer flutuação térmica pode alterar completamente a configuração do sistema. **Tu tá tentando explicar pq determinado ponto é a região de maior frustração. Deixe explícito que tu tá explicando o que é uma região de maior frustração.** Importante salientar que nas transições de primeira ordem as fases coexistem, mas nas de segunda ordem não. **Esta frase está deslocada, ela deve estar junto da descrição do ponto triplo, pois só há ponto triplo, se há transição entre três fases.**

Ainda sobre os painéis (a) e (b), o intervalo de J_2/J_1 em que ocorre o aparecimento da fase SD, é o mesmo intervalo em que a fase surge no di-

agrama do estado fundamental na Fig. (6). A intensidade de J_3 afeta a temperatura de ordenamento das fases ordenadas AF e SAF, que ~~diminuem para $J_3 > 0$~~ **reduzem para interações J_3 antiferromagnéticas mais intensas**. Enquanto que para a fase SD, a intensidade de J_3 amplia o intervalo de ocorrência da fase em termos de J_2/J_1 , mas não influencia na sua temperatura de ordenamento.

Como já **havíamos identificado** ~~identificamos~~ através das Eq. (35) e Eq. (HAMILTONIANA INTRA SD), a fase SD não depende **explicitamente** de J_3 . Por outro lado, as demais fases dependem, assim, a ampliação do intervalo de ocorrência da fase SD se deve pela regressão do intervalo de ocorrência das demais fases ordenadas em termos de J_2/J_1 .

Notamos que o ponto tricrítico se desloca para valores maiores de J_2/J_1 quando $J_3 > 0$. Também é possível notar o aparecimento de um ponto triplo entre as fase SD-SAF-PM à temperatura finita, resultado não encontrado em estudos por Monte Carlo [3].

Quando $J_3 < 0$, notamos um aumento da temperatura de ordenamento (painéis inferiores), assim como um deslocamento do ponto tricrítico para valores menores de J_2/J_1 , em particular, ele desaparece para $J_3 = -0.3$, como observamos no painel (f), com todas as transições ordem-desordem passando a ser de segunda ordem. **Enquanto** as transições ordem-ordem são sempre de primeira ordem. O incremento na temperatura de ordenamento para $J_3 < 0$ nos sugere que a interação ferromagnética entre terceiros vizinhos favorece fases ordenadas e transições de segunda ordem.

Referências

- [1] Songbo Jin, Arnab Sen, Wenan Guo, and Anders W. Sandvik. Phase transitions in the frustrated ising model on the square lattice. [Phys. Rev. B](#), 87:144406, 2013.
- [2] N. Kellermann, M. Schmidt, and F. M. Zimmer. Quantum ising model on the frustrated square lattice. [Phys. Rev. E](#), 99:012134, Jan 2019.
- [3] D. P. Landau and K. Binder. Phase diagrams and critical behavior of ising square lattices with nearest-, next-nearest-, and third-nearest-neighbor couplings. [Phys. Rev. B](#), 31:5946–5953, 1985.
- [4] M. Roos. Efeitos de interações de terceiros vizinhos sobre a criticalidade do modelo de Ising quântico na rede quadrada frustrada. Dissertação, UFSM, 2023.
- [5] Sílvia RA Salinas. Introdução a física estatística vol. 09. Edusp, 1997.