

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA  
CENTRO DE CIÊNCIAS NATURAIS E EXATAS  
CURSO DE GRADUAÇÃO EM FÍSICA BACHARELADO

Leonardo Camargo Rossato

**TRANSIÇÕES DE FASE NO MODELO DE ISING  
ANTIFERROMAGNÉTICO EM UMA REDE HEXAGONAL BICAMADA  
FRUSTRADA**

Santa Maria, RS  
2022

**Leonardo Camargo Rossato**

**TRANSIÇÕES DE FASE NO MODELO DE ISING ANTIFERROMAGNÉTICO EM UMA  
REDE HEXAGONAL BICAMADA FRUSTRADA**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Física Bacharelado, Área de Concentração em Matéria Condensada, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para obtenção do grau de **Graduação em Física Bacharelado**.

ORIENTADOR: Prof. Mateus Schmidt

Santa Maria, RS  
2022

**Leonardo Camargo Rossato**

**TRANSIÇÕES DE FASE NO MODELO DE ISING ANTIFERROMAGNÉTICO EM UMA  
REDE HEXAGONAL BICAMADA FRUSTRADA**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Física Bacharelado, Área de Concentração em Matéria Condensada, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para obtenção do grau de **Graduação em Física Bacharelado**.

**Aprovado em 15 de agosto de 2022:**

---

**Mateus Schmidt, Dr. (UFSM)**  
(Presidente/Orientador)

---

**Eleonir João Calegari, Dr. (UFSM)**

---

**Rogério José Baierle, Dr. (UFSM)**

Santa Maria, RS  
2022

## **RESUMO**

# **TRANSIÇÕES DE FASE NO MODELO DE ISING ANTIFERROMAGNÉTICO EM UMA REDE HEXAGONAL BICAMADA FRUSTRADA**

AUTOR: Leonardo Camargo Rossato

ORIENTADOR: Mateus Schmidt

Neste trabalho, investigamos as transições de fase do modelo de Ising em uma rede hexagonal bicamada frustrada. Estudos recentes indicam a possível existência de um ponto tricrítico neste modelo. Com o objetivo de investigar a possível existência de tricriticalidade, empregamos a teoria de campo médio com clusters no estudo deste modelo. Esta abordagem incorpora efeitos de frustração e consiste em uma metodologia que permite avaliar a natureza das transições de fase. O comportamento de algumas quantidades termodinâmicas, como energia livre, parâmetros de ordem e calor específico, também foram analisadas. Como resultado, obtivemos diagramas de fase que permitiram identificar a presença de um ponto tricrítico no modelo em diferentes cenários. Em particular, nossos resultados indicam a existência de tricriticalidade em um cenário para o qual estudos recentes de Monte Carlo e rede de Bethe para o modelo indicam transições ordem-desordem contínuas.

**Palavras-chave:** Matéria condensada. Sistemas frustrados. Frustração. Antiferromagnetismo. Rede hexagonal bicamada.

## ABSTRACT

# PHASE TRANSITIONS IN ANTIFERROMAGNETIC ISING MODEL IN A FRUSTRATED BILAYER HEXAGONAL LATTICE

AUTHOR: Leonardo Camargo Rossato

ADVISOR: Mateus Schmidt

In this work, we investigate the phase transitions of the Ising model on a frustrated bilayer hexagonal lattice. Recent studies indicate the possible existence of a tricritical point in this model. In order to investigate the possible existence of tricriticality, we used the clusters mean field theory in the study of this model. This approach incorporates frustration effects and consists of a methodology that allows assessing the nature of phase transitions. The behavior of some thermodynamic quantities, such as free energy, order parameters and specific heat, were also analyzed. As a result, we obtained phase diagrams that allowed us to identify the presence of a tricritical point in the model in different scenarios. In particular, our results indicate the existence of tricriticality in a scenario for which recent Monte Carlo and Bethe network studies for the model indicate continuous order-disorder transitions.

**Keywords:** Condensed matter. Frustrated systems. Antiferromagnetism. Hexagonal bilayer lattice.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Representação esquemática da fase ferromagnética para as redes quadrada (a) cúbica simples (b) e hexagonal bicamadas (c). ....	12
Figura 1.2 – Representação esquemática de uma das possíveis configurações da fase antiferromagnética para as redes quadrada (a) cúbica simples (b) e hexagonal bicamadas (c). ....	14
Figura 1.3 – Curva de coexistência de oito fluidos evidenciam um comportamento coletivo que se ajusta com uma equação cúbica — resultado clássico que exemplifica a fenomenologia de Landau e o conceito de universalidade dos coeficiente críticos. Este resultado também é citado por Salinas (2005). Além disso, é válido informar que as densidades e as temperaturas são divididas pelos valores no ponto crítico. ....	17
Figura 1.4 – O painel (a) representa um cluster com 3 sítios da rede triangular. No painel (b) é ilustrado um cluster com 4 sítios da rede quadrada. ....	18
Figura 1.5 – Representação de todas configurações possíveis de ordenamento de spins em um cluster de 3 sítios. ....	19
Figura 1.6 – Representação de todas configurações possíveis de ordenamento de spins em um cluster de 4 sítios. ....	20
Figura 1.7 – Estrutura da rede hexagonal bicamada em 1) e 2). Na figura 2), a rede é construída usando a quadratura (plaqueta*) {A,B,C,D} no centro como base para a modelagem do artigo pelo método de Bethe. ....	21
Figura 1.8 – Em 1), o diagrama de fases ocorre para $0.0 \leq T/J_p \leq 2.55$ por $0.0 \leq J_x/J_p \leq 0.5$ . As fases $AF_1$ e $AF_2$ são demarcadas pelas curvas: em vermelho, gerada pelo método de Monte Carlo, usando o algoritmo de Metropolis; em azul, usando o método da rede de Bethe. Os sub-índices b) e c), referem-se: ao cumulante de Binder $U_\phi$ e a susceptibilidade magnética $\chi_\phi$ . O ponto de cruzamento entre os diferentes tamanhos de rede, em b) e c), demarca o valor de $T/J_p$ no diagrama a). Em 2), o diagrama de fases ocorre para $0.0 \leq T/J_p \leq 3.0$ por $0.0 \leq J_x/J_p = J_1/J_p \leq 0.85$ . As fases $AF_1$ e $PM$ são demarcadas: pela curva em vermelho, relacionada à transição de fase de primeira ordem; e em roxo, relacionada à transição de fase de segunda ordem. A região " $AF_2 + U_2$ " não é definida como fase, sendo demarcada pela curva em cor preta, usando o máximo do calor específico. O símbolo de cruz, em verde, indica a existência de um possível ponto tricrítico no modelo. .	22
Figura 2.1 – Ítem a) esquematiza as fases antiferromagnéticas usadas no modelo de rede hexagonal bicamada — representado no ítem b). Em a) é destacado a quadratura ABCD do hexágono $\nu$ . As interações $J_p, J_x$ e $J_1$ são as mesmas da figura (2.2). ....	23
Figura 2.2 – As interações estão associadas aos termos das equações (2.4), (2.5) e (2.6), para o caso $n_s = 12$ sítios. Em laranja, são representadas as interações cruzadas, entre planos, mas dentro do mesmo cluster (intracluster); em vermelho, interações no mesmo plano intracluster; em roxo, interações cruzadas, entre planos e entre clusters (interclusters); e, por último, em azul, interações no mesmo plano e intercluster. ....	25
Figura 2.3 – Caso cluster base $\nu$ com $n_s = 12$ . Em ambas perspectivas, em duas ou	

três dimensões, o cluster base  $\nu$  foi destacado em azul; e a rede hexagonal bicamada seria o conjunto de infinitos clusters idênticos ao cluster base  $\nu$ . ..... 26

Figura 2.4 – Caso cluster base  $\nu$  com  $n_s = 24$ . Em ambas perspectivas, em duas ou três dimensões, o cluster base  $\nu$  foi destacado em vermelho; e a rede hexagonal bicamada seria o conjunto de infinitos clusters idênticos ao cluster base  $\nu$ . ..... 27

Figura 2.5 – Caso cluster base  $\nu$  com  $n_s = 4$ . Em ambas perspectivas, em duas ou três dimensões, o cluster base  $\nu$  foi destacado em verde; e a rede hexagonal bicamada seria o conjunto de infinitos clusters idênticos ao cluster base  $\nu$ . ..... 28

Figura 2.6 – Definição dos parâmetros de ordem das fases AF1, AF2 e U2. Cluster base ilustrado com  $n_s = 12$  sítios — contudo, os padrões de fase se mantêm para  $n_s \neq 12$  sítios. Esferas representam os sítios do cluster; a direção e cor da seta representam o estado de spin do sítio: esfera verde, com seta direcionada para cima, sítio apresenta spin para cima. Esfera vermelha, seta para baixo, sítio apresenta spin para baixo. ..... 30

Figura 2.7 – Para magnetizações locais foi usado a notação  $m(i)$  ao invés de  $m_i$  — onde  $m(i) = \pm 1$ . O conjunto de valores  $m(i)$  no cluster variam a cada interação com o ambiente (e pelo cálculo computacional, a cada iteração da autoconsciência). Arbitrando um conjunto inicial de valores  $m(i)$  para todos os sítios do cluster, o cálculo consegue captar mais facilmente a existência de uma fase. São 4 entradas de fase tabelada (chutes iniciais): AF1, AF2, U2 e PM. Os padrões iniciais de magnetização têm por base a definição das fases como pode ser visto na figura (2.6). ..... 31

Figura 2.8 – Diagramas para  $J_1/J_p = 0.8$  com  $T/J_p = \{0.5, 1.0, 1.4, 1.5, 1.6, 2.0\}$ . A curva em vermelho, corresponde à fase AF2, com  $J_x/J_p$  variando de 0.0 até 0.6. Em preto, à fase AF2, com  $J_x/J_p$  variando de 0.6 até 0.0. Padrões de entrada para  $n_s = 12$  sítios estão exemplificados na figura (2.7). O cruzamento na energia livre para  $T/J_p < \approx 1.6$ , configura transição AF1-AF2 de primeira ordem. Para  $T/J_p > \approx 1.6$  a sobreposição em um intervalo  $J_x/J_p$  associa-se à fase PM. O primeiro ponto de coexistência das curvas refere-se à transição AF2-PM; O último, à transição PM-AF1. ..... 32

Figura 3.1 – Comparação entre: (a) energia livre, (b) parâmetro de ordem,(c) entropia e (d) calor específico. Caso (1):  $T/J_p = 1.0$ . Caso (2):  $T/J_p = 2.0$ . Ambos com  $J_1/J_p = 0.8$  e  $0.0 \leq J_x/J_p \leq 0.6$ . A curva em vermelho foi calculada com a entrada de dados referente à fase AF1; em preto, à fase AF2. No caso (1), o cruzamento da energia livre (1.a), configura uma transição de primeira ordem. No caso (2), a ausência do cruzamento na energia livre (2.a), juntamente com a mudança suave e contínua do parâmetro de ordem (2.b) caracteriza uma transição de segunda ordem. Ainda para (2), a região em que as curvas se sobrepõem, pela análise do parâmetro de ordem (2.b), configura a fase PM. ..... 36

Figura 3.2 – Comparação do calor específico, no caso  $J_1/J_p = J_x/J_p = \{0.0, 0.1, 0.2, 0.3\}$ . Com  $J_x/J_p$  no eixo horizontal e valores do calor específico, na vertical. O

máximo de cada curva está associado à demarcação da região "AF2 + U2" no diagrama de fase da figura (3.7). ....	37
Figura 3.3 – Diagrama de fases para $\{0.0 \leq T/J_p \leq 3.5\}$ por $\{0.0 \leq J_x/J_p \leq 0.6\}$ com $n_s = 12$ sítios e $J_1/J_p = 1.0$ . Linhas contínuas referem-se às transições de segunda ordem; enquanto as linhas tracejadas, transições de primeira ordem. O ponto $P_T$ refere-se ao ponto tricrítico. ....	38
Figura 3.4 – Diagrama de fases para o cluster de 12 sítios. Nesse caso, apresentamos diagramas 2D com $J_1/J_p$ fixado em $\{0.2; 0.4; 0.6; 0.8; 1.0\}$ enquanto $J_x/J_p$ e $T/J_p$ estão variando, respectivamente entre: $\{0.0 \leq J_x/J_p \leq 0.6\}$ e $\{0.0 \leq T/J_p \leq 3.5\}$ . ....	39
Figura 3.5 – Diagramas de fase para $\{0.0 \leq T/J_p \leq 1.5\}$ por $\{0.0 \leq J_x/J_p \leq 0.6\}$ com $n_s = 12$ e $J_1/J_p$ fixado em $\{0.32, 0.34\}$ . Linhas contínuas representam transições de primeira ordem, enquanto tracejadas, de segunda ordem. No caso $J_1/J_p = 0.32$ são detectadas as fases U2, AF2 e PM; enquanto, no caso $J_1/J_p = 0.34$ , AF1, AF2 e PM — evidenciando uma mudança na emergência das fases existentes no sistema entre algum valor fixo de $J_1/J_p = 0.32$ e $J_1/J_p = 0.34$ . ....	41
Figura 3.6 – Diagrama de fases $J_1/J_p = 1.0$ , comparando três tamanhos $n_s$ de clusters: 04, 12 e 24 sítios. A curva em azul, refere-se ao diagrama calculado para $n_s = 4$ ; em vermelho, refere-se a $n_s = 12$ ; e, em preto, refere-se a $n_s = 24$ . Todos os casos apresentam um comportamento semelhante, principalmente entre os casos de 12 e 24 sítios. Entre as fases AF1 e PM, a localização do ponto tricrítico difere um pouco em cada caso – no qual, é razoável estipular uma tendência: a medida que $n_s$ aumenta, o valor de $T/J_p$ diminui e $J_x/J_p$ aumenta. Os pontos tricríticos foram destacados com um traço verde no gráfico. ....	42
Figura 3.7 – Diagrama de fases $J_1/J_p = J_x/J_p$ comparando três tamanhos $n_s$ de clusters: { 04; 12 e 24 sítios}. A curva em azul, refere-se ao diagrama calculado para $n_s = 4$ ; em vermelho, refere-se a $n_s = 12$ ; e, em preto, refere-se a $n_s = 24$ . Todos os casos apresentam um comportamento semelhante, principalmente entre os casos de 12 e 24 sítios. A detecção da região "AF2 + U2", como já foi explicada anteriormente, foi demarcada usando o máximo do calor específico. Entre as fases AF1 e PM, a localização do ponto tricrítico difere em cada caso – no entanto, é razoável estipular uma tendência: a medida que $n_s$ aumenta, tanto os valores de $J_1/J_p$ e $T/J_p$ diminuem. ....	43
Figura A.1 – Representação esquemática do processo computacional do modelo aplicado no presente trabalho. O cálculo do <b>erro</b> dentro da autoconsistência é feito da seguinte forma: $\text{erro} =  m_{\text{actual}} - m_{\text{anterior}} $ , onde $m$ está relacionado aos valores de magnetização local; enquanto a condição de parada do looping depende do padrão de entrada. Por exemplo, se estivermos analisando um diagrama entre $J_x/J_p$ por $T/J_p$ , então a <b>condição de parada</b> da autoconsistência pode ser quando $T = 0$ para um padrão de entrada da fase PM; ou $T = T_{\max}$ quando o padrão de entrada for AF1, AF2 ou U2. Contudo, também podemos variar o $J_x/J_p$ para encontrar pontos de transição e, nesse caso, a <b>condição de parada</b> seria $J_x = 0$ para entrada AF2; e para AF1 ou U2, seria $J_x = J_{x_{\max}}$ . Quanto a etapa "gerar base de spins", refere-se à criação de uma matriz que contém to-	

das as  $2^{n_s}$  configurações possíveis de spins no modelo — quanto maior o número de sítios  $n_s$  do cluster base da rede, maior a matriz base de spins e, consequentemente, maior será o custo de tempo computacional para realizar cálculos no modelo. .... 50

## **LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS**

<i>TCMC</i>	Teoria de Campo Médio com Clusters
<i>AF1</i>	FASE: Antiferromagnética tipo AF1
<i>AF2</i>	Antiferromagnética tipo AF2
<i>U2</i>	Antiferromagnética tipo U2
<i>PM</i>	Paramagnética

## SUMÁRIO

<b>1 INTRODUÇÃO .....</b>	<b>11</b>
1.1 FASES E TRANSIÇÕES MAGNÉTICAS .....	12
1.2 MODELOS DE SPINS INTERAGENTES .....	12
1.3 ANTIFERROMAGNETISMO .....	14
1.4 CRITÉRIOS DE TRANSIÇÃO E FENOMENOLOGIA DE LANDAU .....	16
1.5 FRUSTRAÇÃO.....	18
1.6 REDE HEXAGONAL BICAMADA .....	20
<b>2 METODOLOGIA .....</b>	<b>23</b>
2.1 TEORIA DE CAMPO MÉDIO COM CLUSTERS .....	24
2.2 PADRÓES DE CLUSTER E FORMAÇÃO DA REDE HEXAGONAL BICAMADA .....	26
2.3 QUANTIDADES TERMODINÂMICAS .....	28
<b>3 RESULTADOS .....</b>	<b>34</b>
3.1 COMPARAÇÃO ENTRE QUANTIDADES TERMODINÂMICAS .....	34
3.2 COMPARAÇÃO TERMODINÂMICA: CASO $J_1/J_P = J_X/J_P$ .....	37
3.3 DIAGRAMAS DE FASE .....	38
3.4 COMPARAÇÃO DE DIAGRAMAS DE FASE: CASO $N_S = 12$ .....	39
3.5 TRANSIÇÕES DE FASE PARA $J_1/J_P \approx 1/3$ .....	40
3.6 COMPARAÇÃO ENTRE CLUSTERS: CASO $J_1/J_P = 1.0$ .....	41
3.7 COMPARAÇÃO ENTRE CLUSTERS: CASO $J_1/J_P = J_X/J_P$ .....	43
<b>4 CONSIDERAÇÕES FINAIS .....</b>	<b>45</b>
4.1 CONCLUSÕES .....	45
4.2 PERSPECTIVAS .....	47
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>48</b>
<b>APÊNDICE A – METODOLOGIA PARTE COMPUTACIONAL .....</b>	<b>50</b>

## 1 INTRODUÇÃO

Fenômenos magnéticos são objeto de estudo há muitos séculos, seja pela contribuição em diversas áreas de estudos, seja pela grande aplicabilidade tecnológica. Desde a antiguidade, por volta de 800 a.C<sup>1</sup>, já há registros de estudos e tentativas de entendimento sobre algumas propriedades da magnetita pelos gregos, como discutido em Mattis (1981), Lowrie (2007) e em Bassalo (1993). Outros povos, ao longo da história, também demonstraram interesse nesse fenômeno de magnetização, como os chineses, em torno do século 1 d.C<sup>2</sup>, quando descobriram que podiam usar a mesma magnetita como uma ferramenta de orientação geográfica - uma bússola primitiva (LOWRIE, 2007).

A medida que as sociedades foram se desenvolvendo, houve o aumento na troca de informações sobre a magnetização e o que era um conjunto de curiosidades simples de alguns fenômenos isolados, começou a se tornar uma área de estudos mais correlacionada e sistematizada. Em meados de 1269, o erudito Petrus Peregrinus registra o primeiro tratado sobre materiais magnéticos com base experimental (ARNOLD, 2008). E no século 14, a frota britânica já escalava o uso de bússolas, bem mais rebuscadas que as citadas anteriormente, para expedições de navios ao longo dos oceanos (LOWRIE, 2007).

Em 1600, um marco na história do ferromagnetismo acontece: o médico e físico William Gilbert, publica um trabalho intitulado "*De magnete, magneticisque corporibus, et de magno magnete tellure*". Dentre várias citações a trabalhos anteriores e a replicação e confirmação dos experimentos de Petrus Peregrinus, um resultado se sobressai: a descoberta de que o aquecimento de ímãs é capaz de anular sua capacidade de atrair pedaços de ferro (BASSALO, 1993).

Essa descoberta enunciada por William Gilbert abre caminho para linha de investigação do presente trabalho. Dessa constatação, que a partir de uma certa temperatura crítica o material perde suas "características magnéticas de atração do ferro", é possível deduzir o conceito de fase magnética e transição de fase.

---

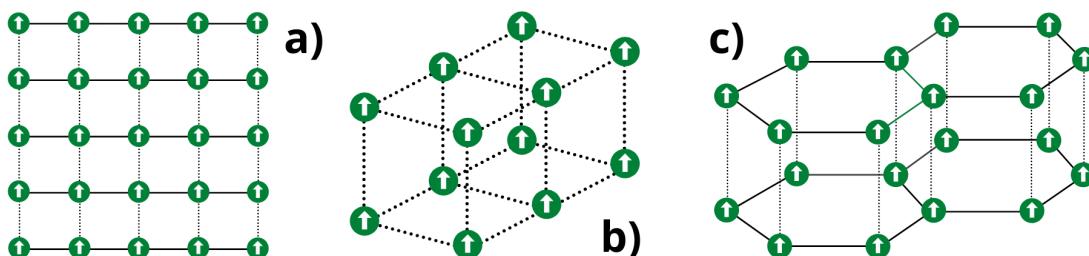
<sup>1</sup>De acordo com Bassalo (1993), já há registros de estudos e tentativas a Magnetita é citada pelos seguintes pensadores gregos: Tales de Mileto(624 a.C - 546 a.C); Anaxágora de Clazômenas(500 a.C - 428 a.C); Sócrates de Atenas (470 a.C - 399 a.C); Platão de Atenas (427 a.C - 347 a.C), entre outros.

<sup>2</sup>Em Bassalo (1993), há uma breve explanação sobre uso de bússolas primitivas tanto para uso terrestre quanto marítimo pelos chineses desde 2637 a.C. Contudo, não há um consenso sobre uma data específica, a exemplo de (HIRTH, 1906) que menciona a origem entre (1115 a.C - 1079 a.C).

## 1.1 FASES E TRANSIÇÕES MAGNÉTICAS

Assim como existem fases termodinâmicas como os 3 estados da matéria (sólido, líquido e gasoso); existem fases relacionadas a propriedades magnéticas como as fases ferromagnética, paramagnética e antiferromagnética. Cada uma dessas fases é a representação de um certo ordenamento interno do material que, frequentemente, podemos atrelar a um conjunto de configurações possíveis na rede de spins. Cada padrão de ordenamento apresenta características próprias, como o alinhamento de todos os momentos magnéticos (spins) em uma mesma direção e sentido, denominado ferromagnetismo e que acontece espontaneamente<sup>3</sup> em ferromagnéticos, como a magnetita (YOSIDA, 1996); (CULLITY; GRAHAM, 2008). Todavia, nesse mesmo material, como o físico William Gilbert constatou, existe uma certa temperatura, acima da qual a magnetização se reduz a quantidades ínfimas e a isso vinculamos um desordenamento dos spins do material. A esse estado desordenado, denominamos paramagnetismo e normalmente o associamos a temperaturas altas — acima da temperatura de Curie ( $T_C$ ). Contudo, alguns materiais apresentam paramagnetismo em baixas temperaturas como a liga de  $\text{GdCl}_3$  que possui  $T_C = 2,2 \text{ K}$  — como citado em Ashcroft (1973).

Figura 1.1 – Representação esquemática da fase ferromagnética para as redes quadrada (a) cúbica simples (b) e hexagonal bicamadas (c).



Fonte: Adaptado de Yosida (1996).Cullity e Graham (2008)

## 1.2 MODELOS DE SPINS INTERAGENTES

Ainda nesse mesmo contexto, é relevante ressaltar que a descrição destes fenômenos em escala microscópica é uma realização relativamente recente. Mais especificamente, após a virada do século 20 com a introdução das ideias de quantização e amadurecimento da física estatística, um número muito grande de estudos de sistemas magnéticos

<sup>3</sup>A magnetização em ferromagnéticos é induzida por um campo magnético externo. Após desligar o campo externo, o ferromagneto permanece magnetizado abaixo da temperatura crítica.

foi e tem sido realizado. Com o advento e popularização dos trabalhos de Curie e Weiss sobre campos moleculares (CURIE, 1894)(WEISS, 1907) e teorias de aproximação de campo médio, diferentes modelos e métodos aproximativos tem sido propostos para o estudo de fases magnéticas. Em meados de 1920, o físico alemão Wilhelm Lenz propõe uma abordagem de interações em micro-escala, para o entendimento do ferromagnetismo (Lenz, 1920) (NISS, 2004) (BASSALO, 1993) e com isso, fundamenta as bases do que hoje conhecemos como modelo de Ising-Lenz (ou somente: modelo de Ising). Em 1925, o seu aluno de doutorado, Ernest Ising publica uma solução em uma dimensão do problema de Lenz utilizando um modelo de spins binários ( $\sigma$ ), podendo assumir apenas  $\pm 1$  (ISING, 1925) (KHARCHENKO, 2018). Em 1928, o físico na época já bem conhecido academicamente pelas contribuições em mecânica quântica, Heisenberg também contribui para o estudo do magnetismo da matéria, lançando o trabalho "Zur theorie des ferromagnetismus" (HEISENBERG, 1928) que utiliza um termo de exchange (interação de troca entre os spins) para primeiros vizinhos a fim de explicar a minimização da energia da rede associado ao alinhamento dos momentos magnéticos (BASSALO, 1993).

Ao longo das décadas seguintes, vários pesquisadores também se interessaram pelo modelo de Ising-Lenz e contribuiriam para o seu desenvolvimento. Em 1936, R. Peierls na obra "On Isings model of ferromagnetism" (PEIERLS, 1936) populariza o nome "modelo de Ising" com o respectivo modelo. E, em 1944, Onsager calcula a solução exata para a função de partição do modelo de Ising em duas dimensões (ONSAGER, 1944). Desde então, o modelo torna-se uma referência em um número significativo de trabalhos de análise sobre fases magnéticas e suas transições. Inclusive, como explanado em Niss (2004), o modelo de Ising pode ser considerado um grande sucesso que instigou quase um século de estudos sobre transições de fase; e, até hoje, é referência em publicações da área — tal como no presente trabalho.

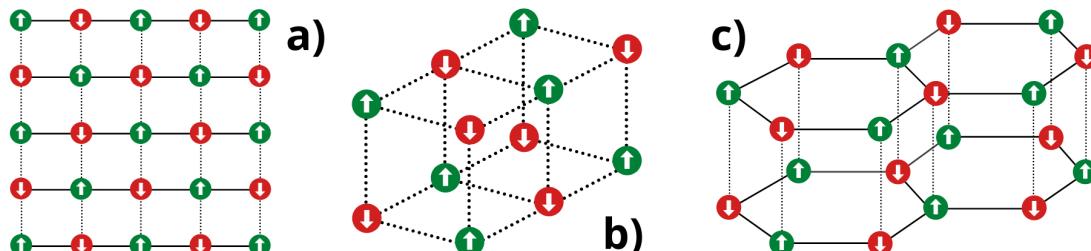
Tendo contextualizado a linha de desenvolvimento do modelo de Ising sobre transições de fase é natural também explanar a linha de desenvolvimento do modelo de Weiss sobre campos moleculares — que aconteceu e acontece concomitantemente ao de Lenz-Ising. Dado isso, podemos retomar que depois das publicações anteriormente citadas de Curie e Weiss, vários pesquisadores também se debruçaram sobre esse modelo, entre eles Louis Néel. Segundo o livro de introdução ao magnetismo de Cullity e Graham (CULLITY; GRAHAM, 2008), Neél, em 1932, publica uma série de trabalhos sobre o antiferromagnetismo e suas propriedades. Em 1948, o mesmo autor apresenta seu trabalho "Propriétés magnétiques des ferrites ferrimagnétisme et antiferromagnétisme" (Néel, 1948), que demonstra que tal como nos ferromagnetos, há uma temperatura crítica ( $T_{Neel}$  ou  $T_N$ ) onde a magnetização de sub-redes diminui a níveis desprezíveis (próximas de zero), configurando um estado desordenado de spins e, portanto, paramagnético. Neste mesmo trabalho, Néel também explana que a fase antiferromagnética, diferentemente da ferromagnética, não possui uma magnetização espontânea.

Após as publicações de Néel, muitos conceitos foram preservados (Néel fez uma significativa contribuição, ao longo de sua vida, para descrição de antiferromagnéticos). Todavia, o estudo de algumas características e propriedades continuam em aberto, como, por exemplo, a existência de frustração em antiferromagnéticos (BOBÁK et al., 2016; ALBAR-RACÍN; ROSALES, 2016; ALBARRACÍN; ROSALES; SERRA, 2018) ou as teses sobre a quebra de simetria da rede e a ordenação das fases (CHATTERJEE; SACHDEV, 2017; PODOLSKY et al., 2004).

### 1.3 ANTIFERROMAGNETISMO

Com isso em vista, é relevante apresentar uma definição atual da fase antiferromagnética. Como explanado no livro de introdução em materiais magnéticos do Cullity e Graham (CULLITY; GRAHAM, 2008): a fase antiferromagnética é uma fase onde os momentos magnéticos de spins tendem a se ordenar de forma que os primeiros vizinhos estejam antialinhados (mesma direção e sentidos opostos), na ausência de um campo externo. Quando expostos a um campo fraco, tendem a manter a configuração mencionada acima (antialinhados). Contudo, sob influência de um campo forte, os momentos magnéticos tendem a se alinhar na direção e sentido do campo. Quanto a relação de ordem e quebra de simetria da rede, os antiferromagnéticos apresentam uma relação semelhante ao dos ferromagnetos: quando expostos a uma quebra de simetria translacional na rede é percebido uma ordenação magnética. Todavia, diferentemente dos últimos, os primeiros não apresentam magnetização espontânea em toda rede, mas é possível identificar um ordenamento magnético caracterizado por duas sub-redes interpenetrantes de estruturas idênticas (YOSIDA, 1996; CULLITY; GRAHAM, 2008; ASHCROFT, 1973).

Figura 1.2 – Representação esquemática de uma das possíveis configurações da fase antiferromagnética para as redes quadrada (a) cúbica simples (b) e hexagonal bicamadas (c).



Fonte: Adaptado de Yosida (1996) Cullity e Graham (2008)

Exemplos de materiais antiferromagnéticos são: hematita, metais como cromo, ligas metálicas como ferro manganês (FeMn) e óxidos como óxido de níquel (NiO) (SHULL;

STRAUSER; WOLLAN, 1951). Um caso, particularmente relevante para o presente trabalho, é sobre estruturas de rede semelhantes a apresentada pelo material  $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)_x$ , (ALBARRACÍN; ROSALES; SERRA, 2018) que também possui fase antiferromagnética sendo candidato à realização da rede hexagonal bicamada<sup>4</sup>. Motivados pela realização experimental desta estrutura de rede, Albarracín, Rosales e Serra (2018) investigaram a rede hexagonal bicamada com spins de Ising, adotando um conjunto de três métodos principais de análise das fases e transições do sistema com o intuito de conseguir modelar a estrutura da rede de forma que os resultados incorporassem os efeitos de frustração. Neste caso, eles utilizaram o método de Monte Carlo usando tanto o algoritmo de Metropolis quanto o algoritmo de Wang-Landau; e também o método da rede de Bethe. Onde todos os métodos foram aplicados em um modelo de Ising para a rede hexagonal bicamada, contendo interações cruzadas entre planos e priorizando as relações antiferromagnéticas<sup>5</sup>.

Ainda sobre essa publicação, um resultado que foi apresentado é a indicação da existência de um ponto tricrítico<sup>6</sup> no modelo — que consideramos uma questão interessante e que nos levou a elaborar esse trabalho. Para isso, escolhemos aplicar a TCMC (teoria de campo médio com clusters) na modelagem da rede por ser um método alternativo aos que foram utilizados em Albarracín, Rosales e Serra (2018) e que nos permitiu confirmar a indicação do ponto tricrítico proposto nos outros métodos. Outros possíveis resultados que obtemos com esse trabalho, é uma compreensão melhor das transições de fase quando diferentes combinações de interações são consideradas. Assim, podemos obter detalhes do comportamento das transições de primeira e segunda ordem do diagrama de fases do modelo, além de conseguir algumas informações de quantidades termodinâmicas relevantes como: o parâmetro de ordem, a energia livre, a energia interna, a entropia, e o calor específico.

<sup>4</sup>É o equivalente a "rede honeycomb bilayer" e a "rede favo de mel com 2 camadas". Ainda pode ser encontrado na literatura a expressão "rede hexagonal multicamadas"; ou ainda "rede bicamada de grafeno"

<sup>5</sup>Mais detalhes sobre o modelo utilizado em Albarracín, Rosales e Serra (2018) e no presente trabalho, encontram-se na seção de metodologia (2)

<sup>6</sup>Um ponto tricrítico é um ponto no diagrama de fase de um sistema em que a coexistência trifásica termina. Essa definição é paralela à definição de um ponto crítico comum como o ponto em que a coexistência de duas fases termina.

Existe também outro ponto termodinamicamente relevante que é o ponto de convivência trifásica, denominado de ponto triplo. Este, no que lhe concerne, é encontrado em um sistema de um único componente, uma vez que, a partir da regra de fase de Gibbs, esta condição só é alcançada por um único ponto no diagrama de fase ( $F = 2-3+1 = 0$ ). Para que pontos tricríticos sejam observados, é preciso mais componentes. Pode-se mostrar que três é o número mínimo de componentes para os quais esses pontos podem aparecer. Neste caso, pode-se ter uma região bidimensional de convivência trifásica ( $F = 2-3+3 = 2$ ) (assim, cada ponto nesta região corresponde a um ponto triplo). Esta região terminará em duas linhas críticas de convivência em duas fases; essas duas linhas críticas podem então terminar em um único ponto tricrítico. Este ponto é, portanto, "duas vezes crítico", uma vez que pertence a dois ramos críticos.

## 1.4 CRITÉRIOS DE TRANSIÇÃO E FENOMENOLOGIA DE LANDAU

No contexto das transições de fase, há algumas fenomenologias desenvolvidas a fim de embasar os critérios, parâmetros e definições de conceitos relacionados a demarcação das fases em um sistema e as respectivas formas de transições entre elas.

Uma dessas fenomenologias, como podemos nos aprofundar no livro do Salinas (2005), é a teoria de Landau. Tal proposta, foi apresentada na década de 30 e baseia-se na introdução do conceito de parâmetro de ordem e no estabelecimento de uma expansão da energia livre que seja definida em termos dos invariantes dessa grandeza. Portanto, exige-se que a energia livre seja uma função analítica na vizinhança da criticalidade.

Muitas vezes é possível definir o parâmetro de ordem associado a uma determinada transição de diferentes maneiras. Em alguns casos, o parâmetro de ordem pode ser um escalar, como também, para sistemas mais complexos, um vetor ou até um tensor. No caso desse trabalho, o parâmetro de ordem " $\psi$ ", na simbologia de Landau, (e " $\phi$ " na notação adotada neste trabalho) é definido como um escalar positivo com valores entre 0 e 1 calculados a partir de um somatório de magnetizações locais.

Em geral, segundo Salinas (2005), temos  $\psi = 0$  na fase mais simétrica (desordenada ou que ocorre a altas temperaturas) e  $\psi \neq 0$  na fase menos simétrica (ou ordenada). No caso deste trabalho, a fase simétrica equivale a uma fase paramagnética (PM) enquanto a fase ordenada equivale a 3 formas diferentes de fases antiferromagnéticas: AF1, AF2 e U2 — definidas na seção de metodologia (2) e considerando que o sistema não está exposto a um campo magnético externo (ou seja, quando consideramos  $H_{ext} = 0$ ).

A energia livre, na fenomenologia de Landau, pode e deve ser expandida em termos dos valores invariantes relacionados ao parâmetro de ordem adotado no sistema — de maneira tal que as diferentes grandezas termodinâmicas possam ser obtidas desta expansão. Com base nisso, também é possível calcular os expoentes críticos<sup>7</sup> e, consequentemente, obter uma melhor compreensão do comportamento de sistemas próximos das transições de fase. Contudo, como podemos encontrar em Salinas (2005), perto da vizinhança dos pontos de criticalidade, os experimentos realizados sugerem que os expoentes críticos assumem valores universais, relativamente bem definidos, que não necessariamente coincidem com as previsões relacionadas à fenomenologia de Landau. Mais

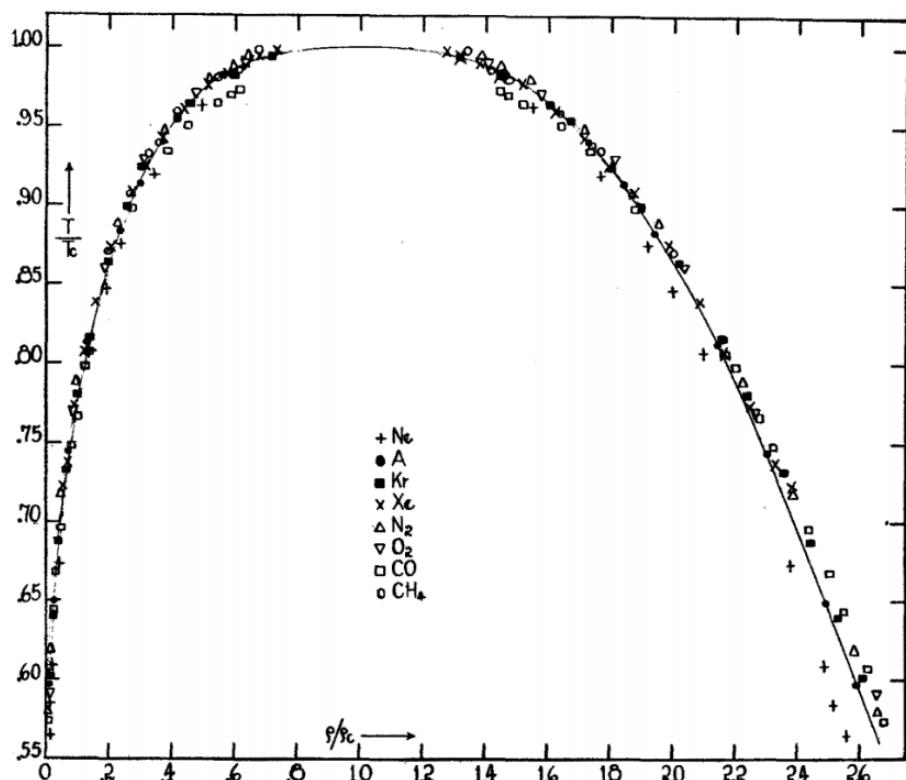
---

<sup>7</sup>Expoentes críticos descrevem o comportamento das quantidades físicas perto de transições contínuas de fase. Acredita-se, embora não comprovado, que eles são universais, ou seja, não dependem dos detalhes do sistema físico, mas apenas de algumas de suas características gerais. Por exemplo, para sistemas ferromagnéticos, os expoentes críticos dependem apenas de: a dimensão do sistema, o raio de interação, e a dimensão de giro. Essas propriedades de expoentes críticos são suportadas por dados experimentais. Os resultados analíticos podem ser teoricamente alcançados na teoria de campo médio em altas dimensões ou quando soluções exatas são conhecidas, como o modelo de Ising bidimensional. Transições de fase e expoentes críticos aparecem em muitos sistemas físicos, como água na transição de vapor líquido, em sistemas magnéticos, em supercondutividade, em percolação e em fluidos turbulentos.

— *Nesse trabalho não calculamos os expoentes críticos, todavia é importante realizar uma pequena menção sobre o conceito.*

recentemente, existe um reconhecimento na literatura acerca de os expoentes críticos serem determinados por alguns fatores, como: a dimensionalidade do parâmetro de ordem, a dimensionalidade dos sistemas físicos e o alcance das interações microscópicas.

Figura 1.3 – Curva de coexistência de oito fluidos evidenciam um comportamento coletivo que se ajusta com uma equação cúbica — resultado clássico que exemplifica a fenomenologia de Landau e o conceito de universalidade dos coeficiente críticos. Este resultado também é citado por Salinas (2005). Além disso, é válido informar que as densidades e as temperaturas são divididas pelos valores no ponto crítico.



Fonte: Retirado de Guggenheim (1945).

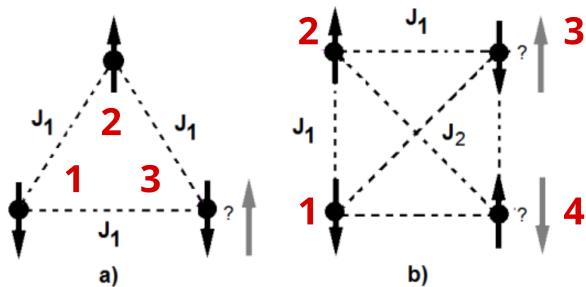
A figura (1.3) é um diagrama apresentado por Guggenheim, em 1945, para  $\rho/\rho_c$  (onde  $\rho_c$  é a densidade no ponto crítico) contra  $T/T_c$  ao longo da curva de coexistência de oito fluidos diferentes (sendo esses, a base de: neônio (Ne), argônio (Ar), criptônio (Kr), xenônio (Xe), nitrogênio 4 (N<sub>4</sub>), oxigênio 4 (O<sub>4</sub>), monóxido de carbono (CO) e Metano (CH<sub>4</sub>)). Hoje, podemos considerar esse trabalho como um "divisor de águas" entre os estudos clássicos e os modernos sobre fenômenos críticos, juntamente com a solução analítica de Onsager, em 1944, para a rede quadrada do modelo de Ising (STANLEY, 1987) — que citamos na introdução, no breve desenvolvimento histórico dos modelos de análise de materiais magnéticos. O resultado apresentado por Guggenheim evidencia que o comportamento de coexistência daqueles fluidos se ajusta muito bem a uma curva cúbica — e, com isso, diferindo da fenomenologia de Landau, que previa uma curva parabólica. O diagrama (1.3) indica o comportamento coletivo emergente, próximo às regiões críticas,

apresentado por alguns grupos de materiais. A análise do comportamento crítico de diversos sistemas, principalmente das correlações entre os componentes destes sistemas, tem-se provado nas últimas décadas uma ferramenta importante para auxílio no entendimento das transições de fase contínuas.

## 1.5 FRUSTRACÃO

O fenômeno denominado frustração magnética pode ser inicialmente definido como: quando não é possível, em um sistema, satisfazer todas as interações simultaneamente. No caso deste trabalho, podemos elencar duas causas para esse fenômeno: frustração devido à competição entre diferentes tipos de interações entre spins ou quando a própria geometria da rede não permite satisfazer todas as interações simultaneamente (HUNGTHE, 2013).

Figura 1.4 – O painel (a) representa um cluster com 3 sítios da rede triangular. No painel (b) é ilustrado um cluster com 4 sítios da rede quadrada.

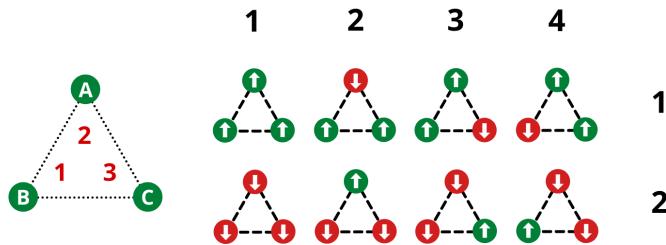


Fonte: Adaptado de Griffith (2013).

As redes apresentadas na figura (1.4) exemplificam os dois casos de frustração elencados acima. Por exemplo, a rede triangular é geometricamente frustrada, pois não há nenhuma combinação de interações entre primeiros vizinhos que satisfaça completamente o sistema. Neste caso, para interações antiferromagnéticas, podemos afirmar que o terceiro spin sempre será "frustado". Isto é, nenhuma das duas possibilidades de alinhamento nesse terceiro sítio, tanto spin para cima quanto spin para baixo, satisfazem ao mesmo tempo todas interações entre seus primeiros vizinhos. Por exemplo, se adotarmos como referência o sítio 1 da rede, o sítio 3 deveria conter um spin apontando para cima. Todavia, se tomamos o sítio 2 como referência, o sítio 3 deveria conter um spin apontando para baixo. Com isso, independente do estado de spin associado ao sítio 3, o sistema apresenta "frustração".

Também conseguimos visualizar a frustração na rede triangular a partir da figura (1.5), onde todas as possíveis configurações de spins estão demonstradas. Se observar-

Figura 1.5 – Representação de todas configurações possíveis de ordenamento de spins em um cluster de 3 sítios.



Fonte: Adaptado de Griffith (2013).

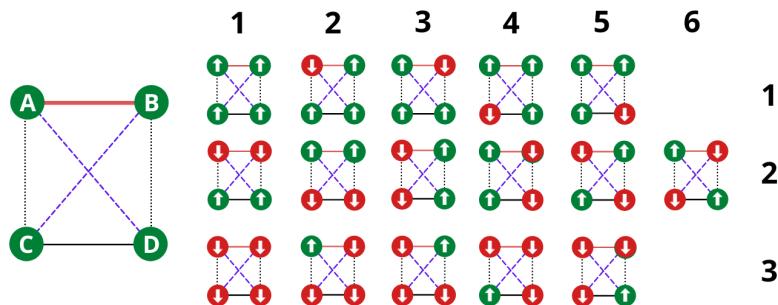
mos os elementos das colunas 2, 3 e 4 da linha 1, percebemos que essas configurações apresentam dois spins para cima e um spin para baixo, diferindo-se apenas no arranjo posicional dos sítios — com isso notamos que uma interação antiferromagnética não é satisfeita, configurando assim uma frustração. O mesmo pode-se notar nas colunas 2, 3 e 4 da linha 2 — onde as três configurações possuem dois spins para baixo e um spin para cima.

Outro fenômeno que também pode ser observado nesses mesmos exemplos é a degenerescência: que é quando dois ou mais diferentes estados físicos têm o mesmo nível de energia associado. Tanto no caso dos elementos das colunas 2, 3 e 4 da linha 1, quanto nas colunas 2, 3 e 4 da linha 2, os estados de energia calculado nessas configurações são os mesmos (ou valores muito próximos que podemos considerar iguais). Além disso, se estes estados de mesma energia são a configuração de menor energia do sistema, então denominamos essa situação como "degenerescência do estado fundamental do sistema", que é uma característica frequentemente encontrada em sistemas magnéticos frustrados.

Outra forma de perceber a frustração seria comparando elementos com spin iguais em dois sítios, diferindo apenas no terceiro sítio. Observando a configuração {4,1} com a {2,2}, notamos que os sítios A e B são iguais e somente o C é diferente. Se analisarmos as interações por pares, começando primeiro por A e B, percebemos que há a minimização da energia no par — um sítio tem o valor oposto do outro; estão antialinhados, satisfazendo a interação antiferromagnética. Contudo, a terceira posição (C), pode assumir dois valores possíveis, spin para cima a fim de minimizar a interação entre o par A-B, ou spin para baixo em relação ao par A-C. Se assumirmos qualquer uma dessas possibilidades, uma das interações antiferromagnética não será satisfeita e, portanto, configurando uma frustração no sistema.

Uma questão relevante de se atentar é que esse tipo de conflito (frustração geométrica) não existe para o caso do cluster de 4 sítios, que podemos visualizar nas figuras 1.4 e 1.6. Se verificarmos apenas as interações entre primeiros vizinhos, notamos que todas as interações no sistema são satisfeitas. Contudo, ao adicionarmos interações entre segundos vizinhos ( $J_2$ ), começa a existir uma competição das diferentes formas de inte-

Figura 1.6 – Representação de todas configurações possíveis de ordenamento de spins em um cluster de 4 sítios.



Fonte: Adaptado de Griffith (2013).

rações entre os sítios e o sistema acaba deixando de ter todas as interações satisfeitas; e, portanto, apresentando outra forma de frustração magnética — denominada "frustração por competição".

O caso da rede hexagonal bicamada apresenta frustração pela competição entre as três formas de interações  $J_1$ ,  $J_x$  e  $J_p$  que há no sistema.

## 1.6 REDE HEXAGONAL BICAMADA

Em uma escala maior, nas últimas décadas, modelos de análise de transição de fase da física-estatística têm sido aplicados para resolução de inúmeros problemas em diversas áreas que podem transitar desde ciências exatas, econômicas, saúde e até em humanas. Exemplos dessa "transitividade de áreas" na aplicação de modelos com caráter complexo são abundantes na literatura, como: Bornholdt e Wagner (2002), publicando sobre a utilização de modelos de transição de fase, como o de Ising, no estudo da estabilidade da moeda; ou Tkacik (2006), utilizando também modelos de Ising de transição de fase para analisar redes de neurônios humanos.

Semelhantemente, o mesmo desenvolvimento aconteceu na área da matéria condensada. Vários artigos têm recentemente elaborado teses de novas fases magnéticas e diagramas de fase em materiais com diferentes modelagens capazes de captar os efeitos de frustração. Exemplos de publicações atuais nessa linha são:

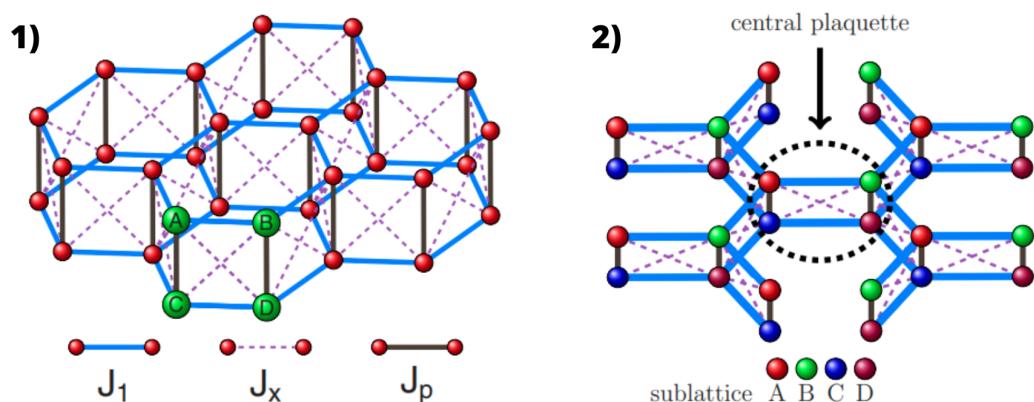
- Ren, Tong e Xie (2014) com o uso do método de campo médio aplicado ao modelo de Heisenberg – usando como referência materiais a base de óxidos (Cu)-básicos dopados, no caso de supercondutividade em altas temperaturas; e materiais semelhantes a  $Li_2VOSiO_4$ , para o caso de modelos de líquidos de spin.
- Bobák et al. (2016), que encontraram um ponto tricrítico no modelo de Ising na rede hexagonal  $J_1-J_2$  — utilizando método de Monte Carlo. Nesse caso, obtendo resul-

tados com referência apenas na estrutura de rede hexagonal, sem citar um material em específico, ao longo do artigo.

- Albarracín e Rosales (2016) utilizando uma aproximação esférica para estimar efeitos de frustração no modelo de rede hexagonal bicamada – usando como orientação materiais com estrutura de rede semelhante à apresentada pelo material  $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ .

Uma publicação em especial para justificativa do presente trabalho é sobre o mesmo tipo de estrutura de rede apresentada por Albarracín e Rosales (2016) –  $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$  – o qual é analisado, pelos mesmos autores principais posteriormente, em Albarracín, Rosales e Serra (2018) e representado na figura (1.7). Em tal trabalho, foi utilizado um conjunto de três métodos principais (e também outros procedimentos matemáticos<sup>8</sup> que auxiliam no entendimento de alguns resultados secundários, mas não menos significativos ao nível de literatura geral) para modelar a estrutura da rede de forma que os resultados conseguissem captar os efeitos de frustração. Nesse caso, eles utilizaram o método de Monte Carlo, primeiramente, com o algoritmo de Metropolis e posteriormente, com Wang-Landau; e também o método da rede de Bethe. Todos os métodos foram aplicados em um modelo de Ising para a rede hexagonal bicamada, contendo interações cruzadas e focando no efeito de interações antiferromagnéticas.

Figura 1.7 – Estrutura da rede hexagonal bicamada em 1) e 2). Na figura 2), a rede é construída usando a quadratura (plaqueta\*) {A,B,C,D} no centro como base para a modelagem do artigo pelo método de Bethe.

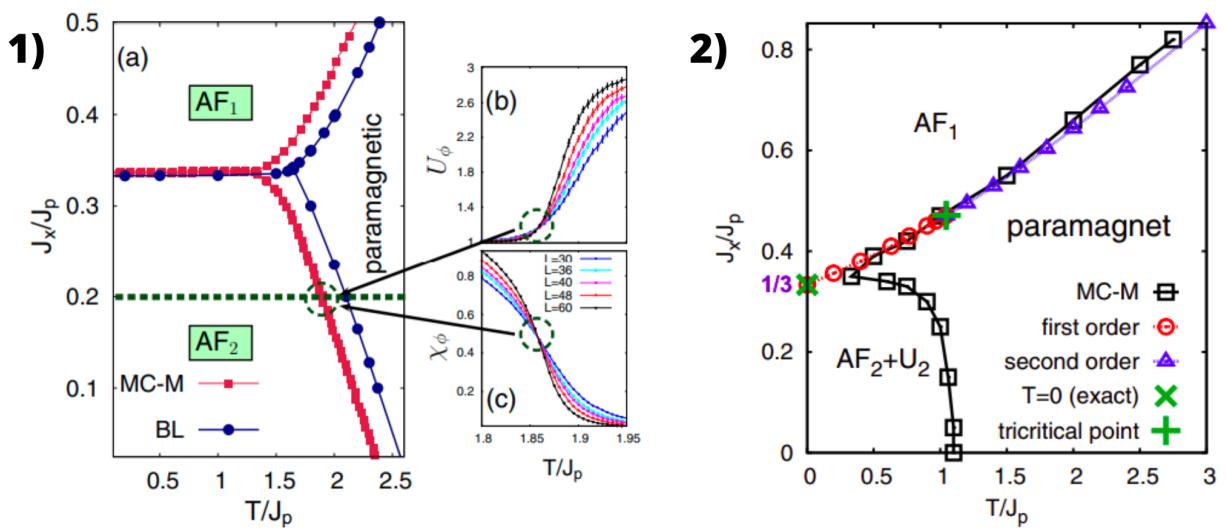


Fonte: Retirado de Albarracín, Rosales e Serra (2018).

Ainda sobre essa publicação, um resultado bem interessante registrado é a indicação da existência de um ponto tricrítico no modelo — como pode ser visto no diagrama de fases da figura (1.8).

<sup>8</sup>Foram utilizados procedimentos como o cumulante de Binder para encontrar pontos críticos (de transição de fase) nos dados obtidos pelo método de Monte Carlo e de Bethe; bem como a criação de uma função de correlação a fim de evidenciar e ajudar a distinguir as fases do material.

Figura 1.8 – Em 1), o diagrama de fases ocorre para  $0.0 \leq T/J_p \leq 2.55$  por  $0.0 \leq J_x/J_p \leq 0.5$ . As fases  $AF_1$  e  $AF_2$  são demarcadas pelas curvas: em vermelho, gerada pelo método de Monte Carlo, usando o algoritmo de Metropolis; em azul, usando o método da rede de Bethe. Os sub-índices b) e c), referem-se: ao cumulante de Binder  $U_\phi$  e a susceptibilidade magnética  $\chi_\phi$ . O ponto de cruzamento entre os diferentes tamanhos de rede, em b) e c), demarca o valor de  $T/J_p$  no diagrama a). Em 2), o diagrama de fases ocorre para  $0.0 \leq T/J_p \leq 3.0$  por  $0.0 \leq J_x/J_p = J_1/J_p \leq 0.85$ . As fases  $AF_1$  e PM são demarcadas: pela curva em vermelho, relacionada à transição de fase de primeira ordem; e em roxo, relacionada à transição de fase de segunda ordem. A região " $AF_2 + U_2$ " não é definida como fase, sendo demarcada pela curva em cor preta, usando o máximo do calor específico. O símbolo de cruz, em verde, indica a existência de um possível ponto tricrítico no modelo.



Fonte: Retirado de Albarracín, Rosales e Serra (2018).

Tendo isso em vista, entendemos que seria significativa a elaboração de uma investigação sobre essa região, o que nos levou a realizar esse trabalho. Para isso, escolhemos aplicar a TCMC na modelagem da rede por ser um método alternativo aos que foram utilizados em Albarracín, Rosales e Serra (2018) e que nos permite confirmar a indicação do ponto tricrítico proposto nos outros métodos — haja vista que tal método é conhecido da literatura como efetivo para encontrar pontos tricríticos em diagramas de fase. Outros possíveis resultados que obteremos com esse trabalho, é uma compreensão melhor das transições de fase quando diferentes combinações de interações são consideradas. Dessa forma, poderemos obter detalhes do comportamento das transições de primeira e segunda ordem do diagrama de fases do modelo, além de conseguir algumas informações de quantidades termodinâmicas pertinentes como: o parâmetro de ordem, a magnetização do sistema, a entropia, a energia livre, a energia interna e o calor específico.

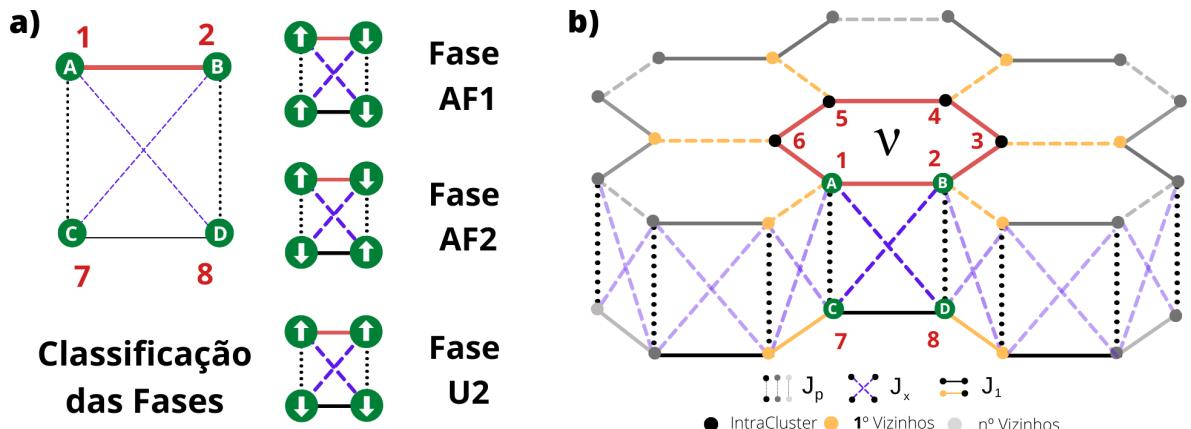
## 2 METODOLOGIA

Neste trabalho, estudaremos uma rede hexagonal bicamada utilizando spins de Ising e interações antiferromagnéticas. Este modelo, proposto por Albarracín, Rosales e Serra (2018), é descrito pelo seguinte hamiltoniano:

$$H = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + J_p \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j + J_x \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i, \quad (2.1)$$

onde  $\sigma$  são spins de Ising, os quais assumem valores  $+1$  ou  $-1$ , e estão localizados nos  $N$  sítios da rede. Na equação (2.1),  $\langle i, j \rangle$  denota uma soma sobre primeiros vizinhos em um mesmo plano hexagonal,  $(i, j)$  denota uma soma sobre primeiros vizinhos pertencentes a planos distintos e  $\langle\langle i, j \rangle\rangle$  denota uma soma sobre pares de segundos vizinhos pertencentes a planos distintos. Os parâmetros  $J_1$ ,  $J_p$  e  $J_x$  são as interações de troca incorporadas no modelo <sup>1</sup>. Em particular,  $J_1$  refere-se as interações intra-planares (que estão dentro de um dos dois planos / camadas da rede);  $J_p$  refere-se as interações inter-planares, perpendiculares aos planos;  $J_x$  refere-se as interações cruzadas inter-planares. O modelo também inclui o campo magnético externo longitudinal  $h$  — no entanto, nesse trabalho, consideramos apenas casos onde  $h = 0$ .

Figura 2.1 – Ítem a) esquematiza as fases antiferromagnéticas usadas no modelo de rede hexagonal bicamada — representado no ítem b). Em a) é destacado a quadradatura ABCD do hexágono  $\nu$ . As interações  $J_p$ ,  $J_x$  e  $J_1$  são as mesmas da figura (2.2).



Fonte: Autor.

<sup>1</sup>Os parâmetros  $J_1$ ,  $J_p$  e  $J_x$  podem ser compreendidos como valores de energia para cada interação correspondente. Contudo, por questões de literatura e consenso acadêmico, utilizamos como base dos cálculos os parâmetros normalizados por  $J_p$ , resultando em variáveis adimensionais, i.e., valores sem alguma unidade de grandeza física relacionada — no caso, os parâmetros utilizados são:  $J_1/J_p$ ,  $J_x/J_p$  e  $T/J_p$ . Por questões de otimização dos cálculos, arbitramos  $J_p = 1$ , haja vista que o comportamento emergente dos resultados analisados não modifica por um valor de normalização de  $J_p$  diferente de 1.

## 2.1 TEORIA DE CAMPO MÉDIO COM CLUSTERS

O modelo descrito pelo hamiltoniano da equação (2.1) não tem solução analítica conhecida. Portanto, a adoção de métodos aproximativos é uma forma de investigar o comportamento do modelo. Neste trabalho, adotaremos a teoria de campo médio com clusters. Nesta metodologia, o sistema é dividido em clusters com  $n_s$  sítios, de forma que o número de clusters  $N_{cl}$  é dado por  $N_{cl} = N/n_s$  — onde  $N$  é o número total de sítios da rede. Enquanto as interações dentro dos clusters são incorporadas exatamente, as interações entre clusters são aproximadas utilizando a aproximação de campo médio convencional, onde  $m_i = \langle \sigma_i \rangle$  é o valor médio da magnetização do sítio  $i$ :

$$\sigma_i \sigma_j = \sigma_i m_j + \sigma_j m_i - m_i m_j. \quad (2.2)$$

Os clusters que serão adotados neste trabalho permitem relacionar as magnetizações locais de clusters distintos, de forma que é possível escrever um hamiltoniano efetivo de um único cluster, onde só há dependência com magnetizações provenientes de sítios do próprio cluster. Para exemplificar, vamos escrever o hamiltoniano efetivo para um cluster de  $n_s = 12$  sítios, ilustrado na figura (2.2).

$$H_{eff} = H_1 + H_p + H_x \quad (2.3)$$

O termo  $H_1$  está associado as interações antiferromagnéticas dentro dos planos sendo obtido após a aplicação da aproximação de campo médio nas interações entre clusters. Esse termo é dado por:

$$\begin{aligned} H_1 = J_1 \Big\{ & \sigma_1(\sigma_2 + \sigma_6) + \sigma_3(\sigma_2 + \sigma_4) + \sigma_5(\sigma_4 + \sigma_6) + \sigma_7(\sigma_8 + \sigma_{12}) + \sigma_9(\sigma_8 + \sigma_{10}) \\ & + \sigma_{11}(\sigma_{10} + \sigma_{12}) + \sigma_1 m_4 + \sigma_2 m_5 + \sigma_3 m_6 + \sigma_4 m_1 + \sigma_5 m_2 + \sigma_6 m_3 + \sigma_7 m_{10} \\ & + \sigma_8 m_{11} + \sigma_9 m_{12} + \sigma_{10} m_7 + \sigma_{11} m_8 + \sigma_{12} m_9 + \\ & - [m_1 m_4 + m_2 m_5 + m_3 m_6 + m_7 m_{10} + m_8 m_{11} + m_9 m_{12}] \Big\}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

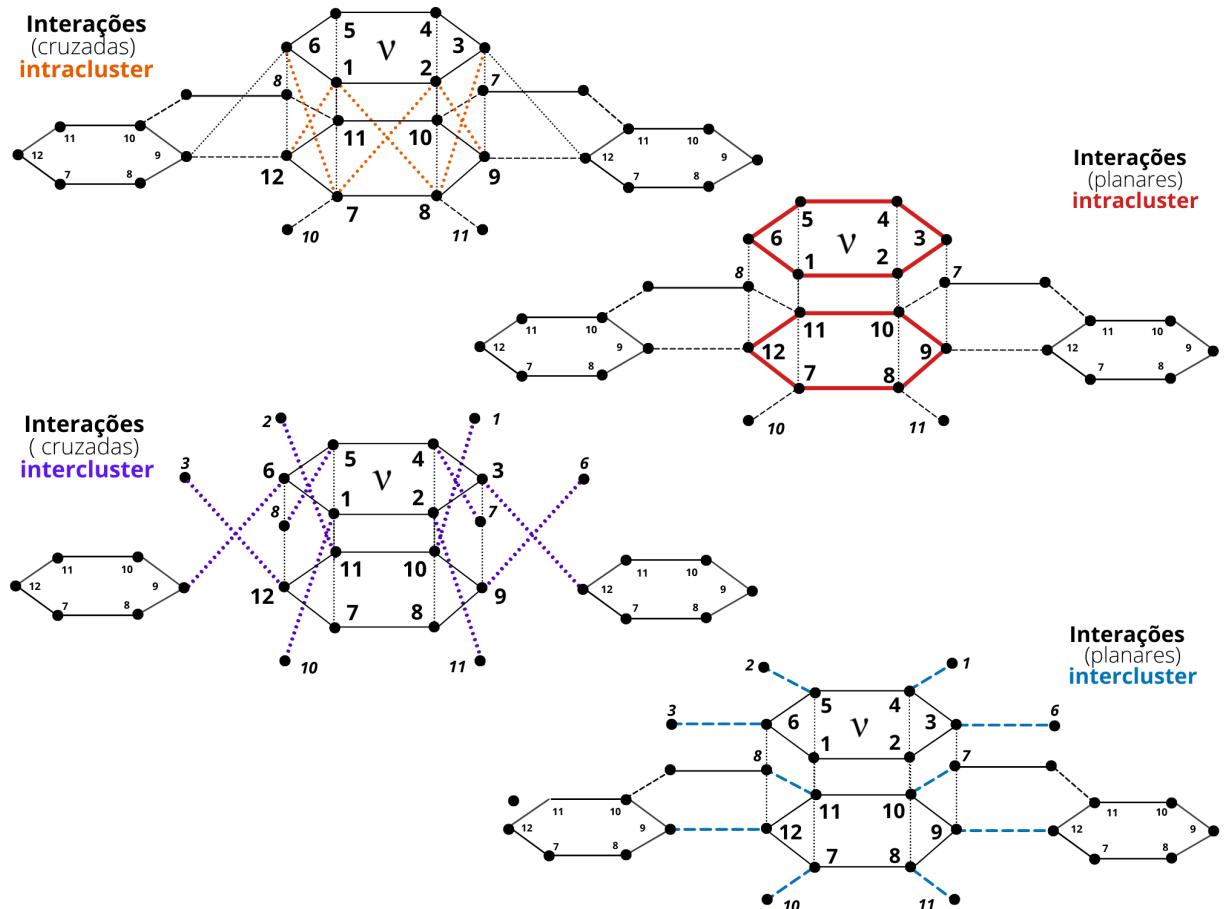
As interações entre primeiros vizinhos que pertencem a planos distintos são incorporadas sem a necessidade da aproximação de campo médio, ou seja,

$$H_p = J_p (\sigma_1 \sigma_7 + \sigma_2 \sigma_8 + \sigma_3 \sigma_9 + \sigma_4 \sigma_{10} + \sigma_5 \sigma_{11} + \sigma_6 \sigma_{12}). \quad (2.5)$$

Contudo, as interações entre segundos vizinhos que pertencem a clusters distintos são incorporadas, parcialmente, utilizando a aproximação de campo médio. Consequentemente, temos que:

$$\begin{aligned}
H_x = J_x \Big\{ & \sigma_1(\sigma_8 + \sigma_{12}) + \sigma_2(\sigma_7 + \sigma_9) + \sigma_3(\sigma_8 + \sigma_{10}) + \sigma_4(\sigma_9 + \sigma_{11}) \\
& + \sigma_5(\sigma_{10} + \sigma_{12}) + \sigma_6(\sigma_{11} + \sigma_7) + \sigma_1 m_{10} + \sigma_2 m_{11} + \sigma_3 m_{12} + \sigma_4 m_7 + \sigma_5 m_8 + \sigma_6 m_9 \\
& + \sigma_7 m_4 + \sigma_8 m_5 + \sigma_9 m_6 + \sigma_{10} m_1 + \sigma_{11} m_2 + \sigma_{12} m_3 + \\
& - [m_1 m_{10} + m_2 m_{11} + m_3 m_{12} + m_4 m_7 + m_5 m_8 + m_6 m_9] \Big\}. \quad (2.6)
\end{aligned}$$

Figura 2.2 – As interações estão associadas aos termos das equações (2.4), (2.5) e (2.6), para o caso  $n_s = 12$  sítios. Em laranja, são representadas as interações cruzadas, entre planos, mas dentro do mesmo cluster (intracluster); em vermelho, interações no mesmo plano intracluster; em roxo, interações cruzadas, entre planos e entre clusters (interclusters); e, por último, em azul, interações no mesmo plano e intercluster.



Fonte: Autor.

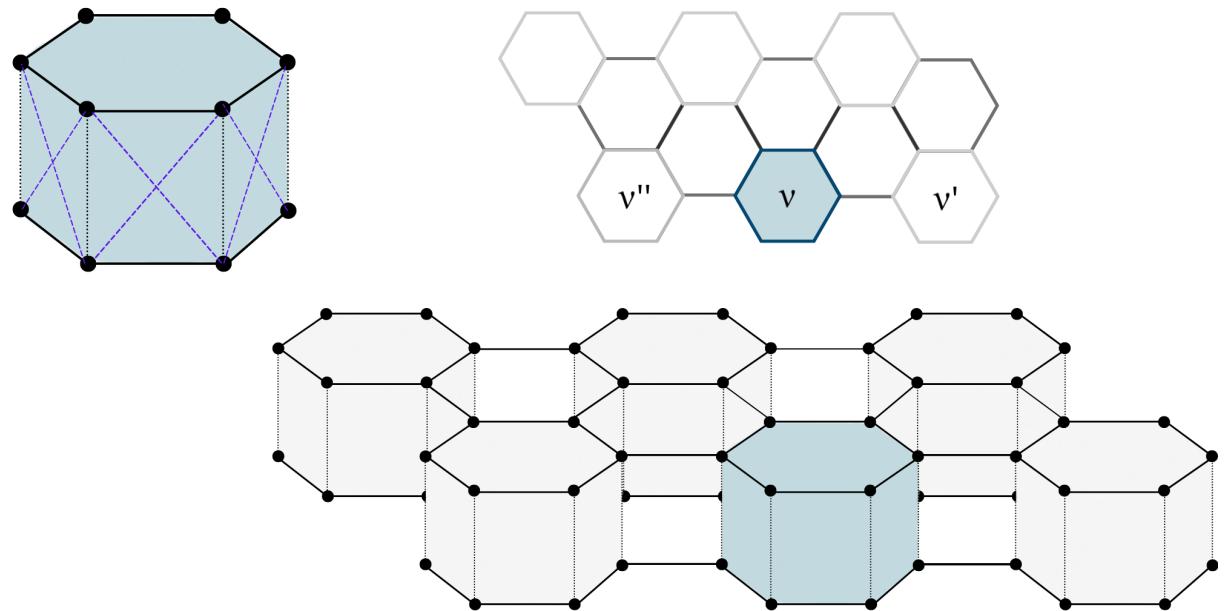
Na figura (2.2) foram omitidas, por questão de melhor representação, as seguintes interações: intercluster planar (azul) dos sítios 1 e 2 com a vizinhança; intercluster cruzadas (roxo) dos sítios 7 e 8; e intracluster cruzadas (laranja) dos sítios 10 e 11.

## 2.2 PADRÕES DE CLUSTER E FORMAÇÃO DA REDE HEXAGONAL BICAMADA

Neste trabalho adotamos 3 padrões diferentes de cluster base da construção da rede hexagonal bicamada. Cada padrão possui um número de sítios  $n_s$  no cluster base, podendo ser: 04, 12 ou 24 sítios.

Inicialmente, descreveremos o padrão apresentado na figura (2.3), referente ao caso  $n_s = 12$ . No canto superior esquerdo, há representado um cluster hexagonal bicamada contendo 12 sítios e as três formas de interação:  $J_1$ ,  $J_x$  e  $J_p$  — a esse cluster denominamos "cluster  $\nu$ ". Ao lado, no canto superior direito, visualizamos uma parte da rede hexagonal bicamada, por uma perspectiva bidimensional, onde as interações no plano correspondem a  $J_1$ . Em azul, está destacado o cluster base  $\nu$ , ao qual assumimos haver infinitos cluster idênticos a este que ao todo compõem a rede. Os clusters mais próximos são definidos como "clusters vizinhos" e na figura foram denominados  $\nu'$  e  $\nu''$ . Por último, à região inferior da figura, podemos visualizar a representação da rede em uma perspectiva em três dimensões.

Figura 2.3 – Caso cluster base  $\nu$  com  $n_s = 12$ . Em ambas perspectivas, em duas ou três dimensões, o cluster base  $\nu$  foi destacado em azul; e a rede hexagonal bicamada seria o conjunto de infinitos clusters idênticos ao cluster base  $\nu$ .

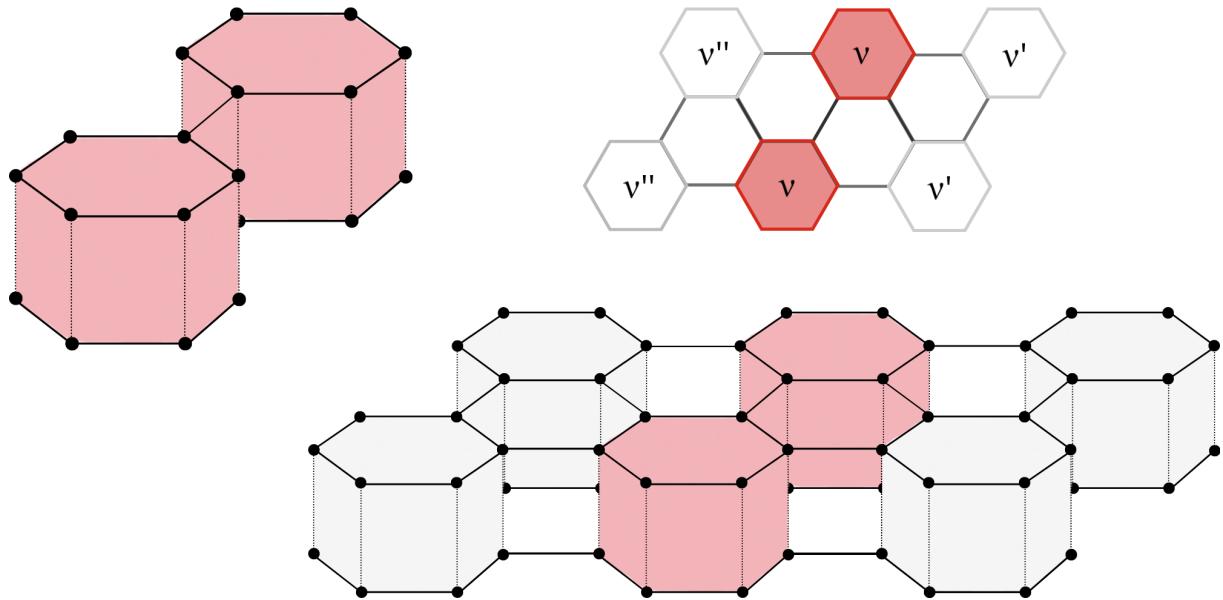


Fonte: Autor.

A figura (2.4), por sua vez, é referente ao caso  $n_s = 24$ . No canto superior esquerdo, também há representado um cluster hexagonal bicamada, mas dessa vez contendo 24 sítios e as três formas de interação:  $J_1$ ,  $J_x$  e  $J_p$  — a esse cluster denominamos "cluster  $\nu$ ". Ao lado, no canto superior direito, visualizamos uma parte da rede hexagonal bicamada, por uma perspectiva bidimensional, onde as interações no plano correspondem a  $J_1$ . Em

vermelho, está destacado o cluster base  $\nu$ , ao qual assumimos haver infinitos cluster idênticos a este que compõem ao todo a rede. Os clusters mais próximos são definidos como "clusters vizinhos" e na figura foram denominados  $\nu'$  e  $\nu''$ . Por último, à região inferior da figura, podemos visualizar a representação da rede em uma perspectiva em três dimensões.

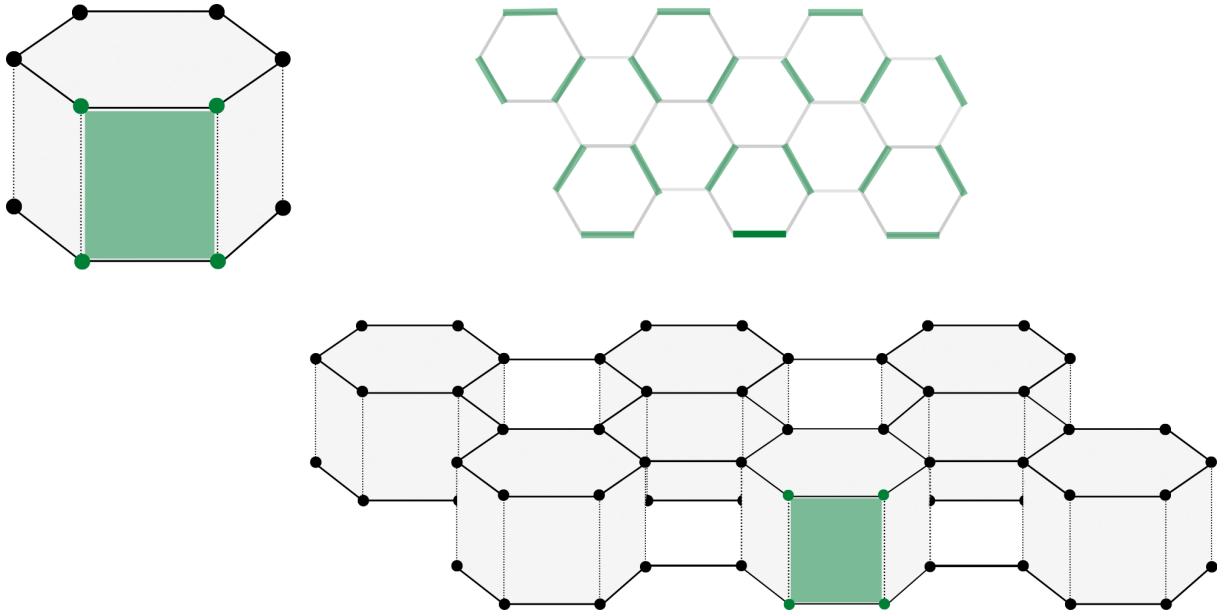
Figura 2.4 – Caso cluster base  $\nu$  com  $n_s = 24$ . Em ambas perspectivas, em duas ou três dimensões, o cluster base  $\nu$  foi destacado em vermelho; e a rede hexagonal bicamada seria o conjunto de infinitos clusters idênticos ao cluster base  $\nu$ .



Fonte: Autor.

Por último, a figura (2.5) é referente ao caso  $n_s = 04$ . No canto superior esquerdo, há representado um cluster hexagonal bicamada com 12 sítios e em destaque, em verde, uma das faces contendo 04 sítios — que representa o cluster base  $\nu$  com  $n_s = 04$ . As três formas de interação também são:  $J_1$ ,  $J_x$  e  $J_p$ . Ao lado, no canto superior direito, visualizamos uma parte da rede hexagonal bicamada, por uma perspectiva bidimensional, onde as interações no plano correspondem a  $J_1$ . Em verde, está destacado o cluster base  $\nu$ , ao qual assumimos haver infinitos cluster idênticos a este que ao todo compõem a rede. Os clusters mais próximos são definidos como "clusters vizinhos" e na figura foram denominados  $\nu'$  e  $\nu''$ . Por último, à região inferior da figura, podemos visualizar a representação da rede em uma perspectiva em três dimensões.

Figura 2.5 – Caso cluster base  $\nu$  com  $n_s = 4$ . Em ambas perspectivas, em duas ou três dimensões, o cluster base  $\nu$  foi destacado em verde; e a rede hexagonal bicamada seria o conjunto de infinitos clusters idênticos ao cluster base  $\nu$ .



Fonte: Autor.

### 2.3 QUANTIDADES TERMODINÂMICAS

Quando definimos o hamiltoniano efetivo na equação (2.1), utilizamos os parâmetros  $m_i$  relacionados a magnetização local de cada sítio da rede. Tais magnetizações locais, foram consideradas como os campos médios que atuam sobre os spins do cluster  $\nu$  (que pode ser visualizado tanto na figura (2.1) quanto em (2.2)). Isto é possível, pois consideramos que os clusters têm comportamento magnético idêntico, ou seja, a rede é composta por clusters idênticos e isso possibilita que obtenhamos as magnetizações locais dos clusters vizinhos usando sítios equivalentes do cluster base. Dessa forma, assumimos que uma ordem antiferromagnética de longo alcance é viável. E, dada a simetria entre todos os clusters da rede, podemos calcular as magnetizações locais através do cluster  $\nu$ , da seguinte forma, onde a soma é realizada sobre  $2^{n_s}$  configurações:

$$m_i = \frac{\sum_{k=1}^{2^{n_s}} \sigma_i e^{-\beta H_{eff,k}}}{\sum_{k=1}^{2^{n_s}} e^{-\beta H_{eff,k}}}, \quad (2.7)$$

A função de partição pode ser definida como:  $Z = \sum_{k=1}^{2^{n_s}} e^{-\beta H_{eff,k}}$  e  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ , na qual  $k_B$  refere-se à constante de Boltzmann <sup>2</sup>. Nota-se também que se há  $n_s = 12$  sítios no cluster, então há 12 magnetizações locais, uma para cada spin.

---

<sup>2</sup>Adotamos um artifício matemático da área no qual assumimos o valor de  $k_B = 1$ , a fim de facilitar o cálculo das variáveis, pois isso não modifica o comportamento das quantidades termodinâmicas.

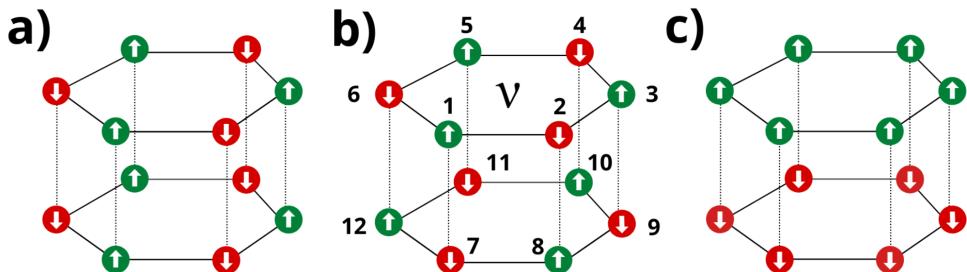
Uma questão essencial de discussão sobre a equação (2.7) que nos fornece a magnetização local é que ela depende do hamiltoniano que envolve esta magnetização e, por isso, precisamos construir uma rotina autoconsistente para resolvê-la. Nesta rotina, atribuímos um valor inicial  $m'_i$  a equação (2.3) obtendo os valores do hamiltoniano utilizado na equação (2.7). Isso permitirá calcular um novo valor para as magnetizações locais ( $m_i$ ). O próximo passo é calcular o erro entre o valor inicial e o resultante — definimos o valor máximo obtido do valor absoluto das diferenças  $|m_i - m'_i|$ . Se este erro for menor que uma tolerância estabelecida, admite-se  $m_i$  como correto, caso contrário, reinicia-se o processo fazendo  $m'_i = m_i$ . Após resolver o problema autoconsistente, somos capazes de calcular o hamiltoniano efetivo e, posteriormente, as quantidades termodinâmicas — um esquema contendo um fluxograma do método computacional utilizado nesse trabalho encontra-se no apêndice (A.1).

Outra quantidade termodinâmica necessária de ser definida é o parâmetro de ordem — haja vista que tal quantidade possui uma função central na teoria de transição de fases. Pelas teses de Landau, como mencionado na sessão de introdução (1), o parâmetro de ordem  $\phi$  (juntamente com a energia livre) desempenha o papel de definir as configurações do sistema que associaremos às fases existentes; além de fornecer uma forma de localizar as transições de fase (STANLEY, 1989). Por isso, definimos o parâmetro de ordem  $\phi$  de forma que haja K funções  $\phi_k$  correspondentes a K diferentes entradas de dados relacionadas, respectivamente, a cada fase que, *a priori*, há no sistema. Mais especificamente, no conjunto de diagramas que iremos analisar da estrutura da rede hexagonal bicamada, entendemos que *a priori*, haverá três possíveis fases ordenadas: AF1, AF2 e U2 (que foram representadas nas figuras (2.1) e (2.6)).

Com isso, podemos definir, textualmente, as fases da seguinte forma:

- Fase AF1: 1º vizinhos entre planos estão alinhados. E 1º vizinhos no mesmo plano são anti-alinhados. Pela figura (2.6), a fase AF1 corresponde a letra a).
- Fase AF2: 1º vizinhos entre planos estão anti-alinhados. E 1º vizinhos no mesmo plano são anti-alinhados. Pela figura (2.6), a fase AF2 corresponde a letra b).
- Fase U2: 1º vizinhos no mesmo plano estão alinhados. E 1º vizinhos entre planos são anti-alinhados. Pela figura (2.6), a fase U2 corresponde a letra c).

Figura 2.6 – Definição dos parâmetros de ordem das fases AF1, AF2 e U2. Cluster base ilustrado com  $n_s = 12$  sítios — contudo, os padrões de fase se mantêm para  $n_s \neq 12$  sítios. Esferas representam os sítios do cluster; a direção e cor da seta representam o estado de spin do sítio: esfera verde, com seta direcionada para cima, sítio apresenta spin para cima. Esfera vermelha, seta para baixo, sítio apresenta spin para baixo.



Fonte: Autor.

Podemos calcular o parâmetro de ordem  $\phi_k$ , com as seguintes equações<sup>3</sup>:

$$\phi_{AF1} = \left| \frac{1}{n_s} \sum_{i=1}^{n_s} (-1)^{i+1} m_i \right| \quad (2.8)$$

$$\phi_{AF2} = \left| \frac{1}{n_s} \left( \sum_{i=1}^{n_s/2} (-1)^{i+1} m_i - \sum_{i=(n_s/2)+1}^{n_s} (-1)^{i+1} m_i \right) \right| \quad (2.9)$$

$$\phi_{U2} = \left| \frac{1}{n_s} \left( \sum_{i=1}^{n_s/2} m_i - \sum_{i=(n_s/2)+1}^{n_s} m_i \right) \right| \quad (2.10)$$

Tendo os parâmetros de ordem, conseguimos então estabelecer os possíveis "padrões de entrada" ("chute dos valores iniciais") que serão atrelados aos valores de magnetização inicial  $m_i$  dos sítios locais  $\sigma_i$  do cluster base  $\nu$  para cada fase  $\phi_k$  definida nas equações (2.8), (2.9) e (2.10). Também devemos definir um padrão de entrada para a fase paramagnética. Isto é, para fins de implementação computacional da autoconsistência, cada fase presente nos diagramas possui um certo padrão de entrada nos valores declarados às  $n_s$  magnetizações locais dos spins do cluster base. Esses valores de entrada podem ser  $m = \pm 1$  para as fases ordenadas e, para fase paramagnética, atribuímos valores iguais a  $m = 0$ .

Podemos exemplificar os valores de entrada usando o modelo com  $n_s = 12$  sítios no cluster base, como podemos ver na figura (2.7).

---

<sup>3</sup>Adotamos o somatório começando com  $i = 1$  e o valor de (1) elevado na "i + 1" a fim de manter o padrão de entrada dos valores das magnetizações locais para as fases — estipulados na figura (2.7). Outros padrões de somatório podem ser escolhidos, haja vista que há mais de uma forma de definir a entrada de dados de cada fase.

Figura 2.7 – Para magnetizações locais foi usado a notação  $m(i)$  ao invés de  $m_i$  — onde  $m(i) = \pm 1$ . O conjunto de valores  $m(i)$  no cluster variam a cada interação com o ambiente (e pelo cálculo computacional, a cada iteração da autoconscistência). Arbitrando um conjunto inicial de valores  $m(i)$  para todos os sítios do cluster, o cálculo consegue captar mais facilmente a existência de uma fase. São 4 entradas de fase tabelada (chutes iniciais): AF1, AF2, U2 e PM. Os padrões iniciais de magnetização têm por base a definição das fases como pode ser visto na figura (2.6).

Padrão de Entrada Fase AF1	Padrão de Entrada Fase AF2	Padrão de Entrada Fase U2	Padrão de Entrada Fase PM
$m(1) = +1 \ m(2) = -1 \ m(3) = +1$ $m(4) = -1 \ m(5) = +1 \ m(6) = -1$ $m(7) = +1 \ m(8) = -1 \ m(9) = +1$ $m(10) = -1 \ m(11) = +1 \ m(12) = -1$	$m(1) = +1 \ m(2) = -1 \ m(3) = +1$ $m(4) = -1 \ m(5) = +1 \ m(6) = -1$ $m(7) = -1 \ m(8) = +1 \ m(9) = -1$ $m(10) = +1 \ m(11) = -1 \ m(12) = +1$	$m(1) = +1 \ m(2) = +1 \ m(3) = +1$ $m(4) = +1 \ m(5) = +1 \ m(6) = +1$ $m(7) = -1 \ m(8) = -1 \ m(9) = -1$ $m(10) = -1 \ m(11) = -1 \ m(12) = -1$	$m(1) = 0 \ m(2) = 0 \ m(3) = 0$ $m(4) = 0 \ m(5) = 0 \ m(6) = 0$ $m(7) = 0 \ m(8) = 0 \ m(9) = 0$ $m(10) = 0 \ m(11) = 0 \ m(12) = 0$

Fonte: Autor.

Após a definição das fases e do parâmetro de ordem, podemos definir uma quantidade termodinâmica essencial na análise do sistema estudado: a energia livre. Tal alegação pode ser fundamentada quando observamos que, em transições de primeira ordem, a energia livre para diferentes soluções apresenta um cruzamento, o qual relacionamos com um ponto de mudança de fase. E, após anotar vários pontos de cruzamento, para várias temperaturas diferentes, ou para vários valores de  $J_1/J_p$  ou  $J_x/J_p$ , podemos plotar as curvas de transição de primeira ordem — como pode ser visto na figura (2.8).

Conseguimos calcular os valores da energia livre do sistema utilizando a seguinte equação, onde  $Z$  é a função de partição do sistema (pelo ensemble canônico):

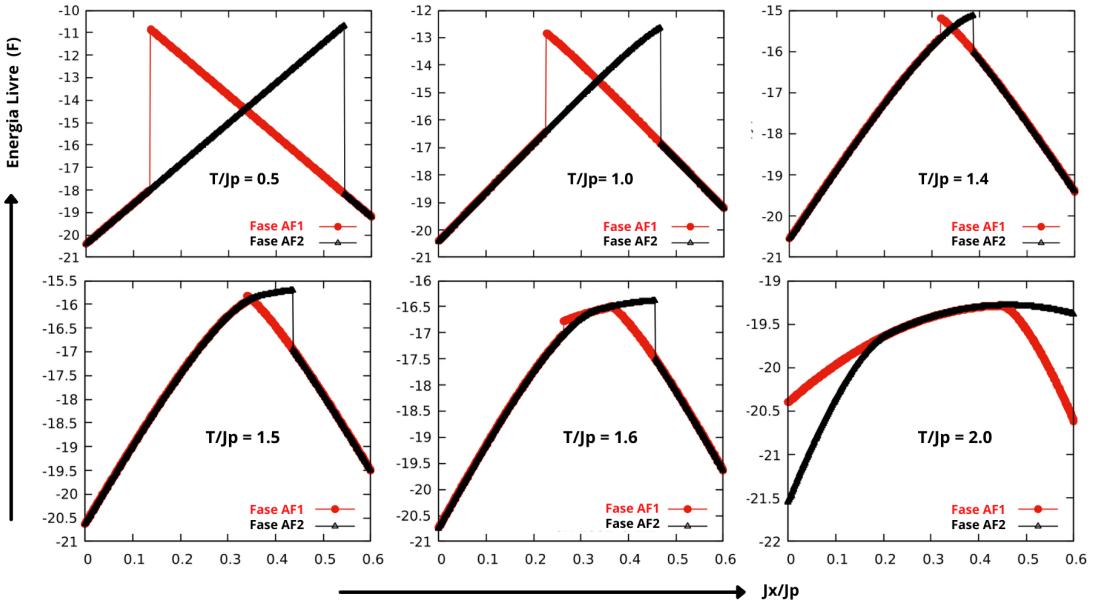
$$F = -\frac{\ln(Z)}{\beta} \quad (2.11)$$

Ainda sobre energia livre, é pertinente salientar que a utilização desse parâmetro para identificar transições de primeira ordem é feita devido ao "princípio de extremos de potenciais termodinâmicos": *para um sistema mecanicamente isolado ( $V$  constante), mantido a temperatura ( $T$ ) constante através do contato diatérmico com um reservatório de temperatura, o estado de equilíbrio é aquele de mínima energia livre ou potencial termodinâmico de Helmholtz.*<sup>4</sup>

Outra quantidade termodinâmica pertinente de se mencionar é o calor específico. Tal quantidade é interessante devido à possibilidade de poder contribuir, em alguns casos, na delimitação das regiões no diagrama de fases onde ocorrem as transições de fase — sendo, esse recurso, principalmente utilizado em análises de transições de segunda ordem em forma alternativa ao parâmetro de ordem, como feito em Albarracín e Rosales (2016).

<sup>4</sup> Texto referenciado no livro do Salinas (2005).

Figura 2.8 – Diagramas para  $J_1/J_p = 0.8$  com  $T/J_p = \{0.5, 1.0, 1.4, 1.5, 1.6, 2.0\}$ . A curva em vermelho, corresponde à fase AF2, com  $J_x/J_p$  variando de 0.0 até 0.6. Em preto, à fase AF2, com  $J_x/J_p$  variando de 0.6 até 0.0. Padrões de entrada para  $n_s = 12$  sítios estão exemplificados na figura (2.7). O cruzamento na energia livre para  $T/J_p < \approx 1.6$ , configura transição AF1-AF2 de primeira ordem. Para  $T/J_p > \approx 1.6$  a sobreposição em um intervalo  $J_x/J_p$  associa-se à fase PM. O primeiro ponto de coexistência das curvas refere-se à transição AF2-PM; O último, à transição PM-AF1.



Fonte: Autor.

Quanto ao cálculo do calor específico pode ser definido pela seguinte equação, onde  $n_s$  é o número de sítios do cluster:

$$C_v = \frac{1}{n_s} \frac{\partial U}{\partial T} \quad (2.12)$$

De uma maneira semelhante ao calor específico, somos capazes de utilizar também a entropia para análises de transições de segunda ordem em forma alternativa ao parâmetro de ordem — entretanto, a entropia não é um bom critério para transições de segunda ordem. Ela pode ser usada, em transições de primeira ordem, para ilustrar o caráter descontínuo da transição. Mas, em nenhum dos tipos de transição, a entropia é um bom critério para localizar transições de fase. Outra utilização mais significativa dessa quantidade, seria na análise da constatação de entropia residual no sistema, quando nos aproximamos de  $T \rightarrow 0$ , como feito em Albarracín, Rosales e Serra (2018). Quanto ao cálculo da entropia pode ser fornecida pela equação (2.13), onde  $F$  é a energia livre:

$$S = \frac{U - F}{T} \quad (2.13)$$

Por último, a energia interna (U) do sistema definida como:

$$U = \langle H_{eff} \rangle = \frac{Tr(H_{eff}e^{-\beta H_{eff}})}{Tr(e^{-\beta H_{eff}})}$$

### 3 RESULTADOS

Neste capítulo, discutiremos nossos resultados para o modelo de Ising na rede hexagonal bicamada com interações frustradas entre planos. Inicialmente vamos apresentar alguns resultados para o comportamento de quantidades termodinâmicas. Também vamos discutir algumas correlações entre tais quantidades em casos diferentes. Após isso, apresentaremos os principais resultados do trabalho: os diagramas de fase. No caso, apresentamos diagramas de fase para diferentes valores de  $J_1/J_p$  e também discutimos o caso particular  $J_1/J_p = J_x/J_p$ , para clusters de 4, 12 e 24 sítios.

#### 3.1 COMPARAÇÃO ENTRE QUANTIDADES TERMODINÂMICAS

Fixando um valor para  $J_1/J_p = 0.8$  e  $J_p = 1.0$ , podemos realizar uma comparação entre as quantidades termodinâmicas de interesse, sendo o caso: (a) energia livre, (b) parâmetro de ordem, (c) entropia e (d) calor específico. Em outras seções também apresentamos resultados do comportamento da energia interna. Primeiramente, cada quantidade foi calculada a partir da variação de  $J_x/J_p$  entre  $0.0 \leq J_x/J_p \leq 0.6$  e, consequentemente, para cada uma das quantidades, foi gerado um valor correspondente, como podemos visualizar na figura (3.1). Notamos que em todos os gráficos há duas curvas, uma em vermelho relacionada ao cálculo com entrada de dados da fase AF1; e uma em preto, relacionada ao cálculo da entrada de fase AF2. Ou seja, cada curva partiu de uma solução AF1 ou AF2 especificada pela entrada de dados das magnetizações locais, como explanado na seção de metodologia, mais especificamente na figura (2.7).

Podemos perceber, inicialmente, que há dois casos apresentados: o caso (1) em que  $T/J_p = 1.0$  e o caso (2) em que  $T/J_p = 2.0$ . No primeiro, há o cruzamento da energia livre (1.a), o que configura uma transição de primeira ordem. No último, não há o cruzamento na energia livre (2.a) e, portanto, precisamos verificar o parâmetro de ordem (2.b) para classificar o caso como uma transição contínua, de segunda ordem. Tal indício de classificação se dá pela forma em que as curvas apresentam, tanto relacionadas a fase AF1 quanto AF2. No caso (1), para  $T/J_p = 1.0$ , a transição no parâmetro de ordem se dá de forma abrupta, descontínua; enquanto (2), para  $T/J_p = 2.0$ , se dá de forma suave, contínua.

Um detalhe importante sobre o caso (2), para  $T/J_p = 2.0$ , é que as curvas relacionadas a AF1 e AF2, por uma certa região se sobrepõem, em todas as quantidades termodinâmicas. Ao examinarmos a região com sobreposição do parâmetro de ordem (2.b), observamos que ambas curvas relacionadas a AF1 e AF2 estão com  $\phi = 0$ . Ou seja, essa região sobreposta possui todas as magnetizações locais nulas e, portanto, configura uma

fase paramagnética (PM). Consequentemente, podemos associar que nas outras quantidades termodinâmicas, no mesmo trecho de variação  $J_x/J_p$  em que as curvas AF1 e AF2 estão sobrepostas, também se referem a uma região de fase paramagnética (PM).

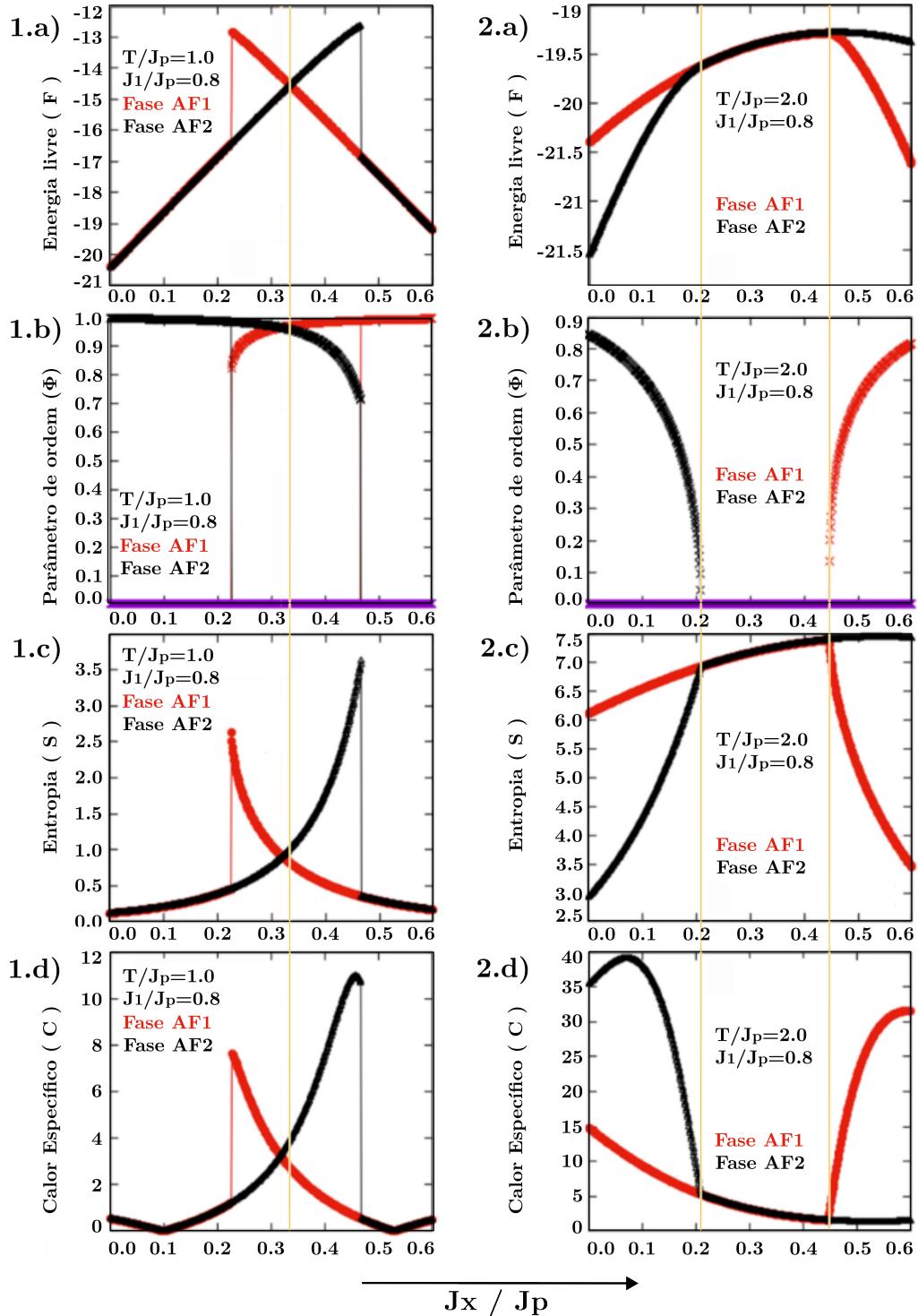
Outra questão interessante de se atentar é que ainda no caso (2), para  $T/J_p = 2.0$ , existe uma correlação entre as diferentes quantidades termodinâmicas na região em as curvas estão sobrepostas. Com isso em vista, percebemos haver uma linha amarela perpendicular ao eixo  $J_x/J_p$ , que indica uma demarcação bem semelhante em todas quantidades para os limites da região sobreposta — próximos de  $J_x/J_p = 0.2$  e  $J_x/J_p = 0.45$ .

Quanto ao caso (1), para  $T/J_p = 1.0$ , como já mencionado no início dessa seção, ocorre uma transição de primeira ordem — haja vista que há um cruzamento na energia livre (1.a). Portanto, segundo a fenomenologia de Landau, o parâmetro entre todas quantidades termodinâmicas representadas na figura (3.1) que pode localizar o ponto de transição de fase é a energia livre. As outras quantidades termodinâmicas no caso (1), para  $T/J_p = 1.0$ , podem até evidenciar um ponto com valor de  $J_x/J_p$  muito próximo do valor de  $J_x/J_p$  do ponto de transição de fase registrado no cruzamento da energia livre (1.a). Todavia, existe uma diferença entre os valores de  $J_x/J_p$  que é significativa e a medida que  $T/J_p$  aumenta, a diferença entre os valores de  $J_x/J_p$  dos pontos aumenta — há uma linha amarela perpendicular ao eixo  $J_x/J_p$ , que evidencia a diferença do valor de  $J_x/J_p$  no ponto de cruzamento da energia livre (1.a) em relação as outras quantidades termodinâmicas.

Após descrevermos as comparações entre as quantidades termodinâmicas, podemos detalhar um pouco mais cada uma individualmente. Começando pelo parâmetro de ordem (1.b), (2.b), em ambos casos (1):  $T/J_p = 1.0$  e (2):  $T/J_p = 2.0$ , podemos notar que estão representadas todas as fases ordenadas presentes nesse trabalho, incluindo a fase U2, em cor roxa, cujo parâmetro de ordem apresenta valor igual a zero em todo o espectro da variação de  $J_x/J_p$ . Ou seja, a fase U2 não é encontrada nas condições estabelecidas da figura (3.1); todavia, é encontrada para valores de  $J_1/J_p < 1/3$  — como também acontece em Albarracín, Rosales e Serra (2018).

Quanto a entropia (1.c) e o calor específico (1.d), para o caso (1),  $T/J_p = 1.0$ , possuem um comportamento semelhante, com ambos apresentando 2 picos com valores de  $J_x/J_p$  próximos de 0.23 e 0.47. Além de, novamente ambos, apresentarem um ponto de cruzamento com valor semelhante ao do parâmetro de ordem (1.b) — nesse caso, essa correlação não é significativa, como argumentado em parágrafos anteriores. Quanto ao caso (2), para  $T/J_p = 2.0$ , notamos a correlação evidenciada nos parágrafos anteriores, que visualmente é percebida pela linha amarela, indicando os limites da região onde as curvas estão sobrepostas.

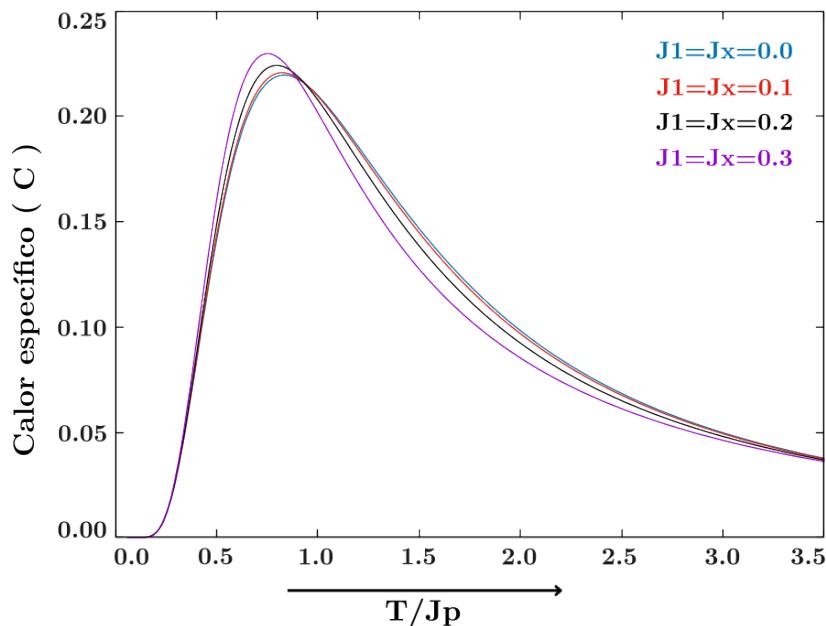
Figura 3.1 – Comparação entre: (a) energia livre, (b) parâmetro de ordem,(c) entropia e (d) calor específico. Caso (1):  $T/J_p = 1.0$ . Caso (2):  $T/J_p = 2.0$ . Ambos com  $J_1/J_p = 0.8$  e  $0.0 \leq J_x/J_p \leq 0.6$ . A curva em vermelho foi calculada com a entrada de dados referente à fase AF1; em preto, à fase AF2. No caso (1), o cruzamento da energia livre (1.a), configura uma transição de primeira ordem. No caso (2), a ausência do cruzamento na energia livre (2.a), juntamente com a mudança suave e contínua do parâmetro de ordem (2.b) caracteriza uma transição de segunda ordem. Ainda para (2), a região em que as curvas se sobrepõem, pela análise do parâmetro de ordem (2.b), configura a fase PM.



### 3.2 COMPARAÇÃO TERMODINÂMICA: CASO $J_1/J_p = J_x/J_p$

Dentro do caso  $J_1/J_p = J_x/J_p$ , é de relevância apresentar o comportamento do calor específico. Contudo, primeiramente, devemos olhar o diagrama de fases da figura (3.7), onde percebemos que há uma região "AF2 + U2" demarcada pelo máximo do calor específico. Tal região não é considerada uma fase magnética propriamente dita (e definida nesse trabalho) mas pode ser considerada um indício que perto da linha de demarcação do máximo do calor específico ocorre uma flutuação significativa na energia interna do sistema — haja vista que calculamos o calor específico pela primeira derivada da energia interna.

Figura 3.2 – Comparação do calor específico, no caso  $J_1/J_p = J_x/J_p = \{0.0, 0.1, 0.2, 0.3\}$ . Com  $J_x/J_p$  no eixo horizontal e valores do calor específico, na vertical. O máximo de cada curva está associado à demarcação da região "AF2 + U2" no diagrama de fase da figura (3.7).



Fonte: Autor.

Feito a contextualização da aplicação do máximo do calor específico, podemos nos atentar para o gráfico específico da mesma quantidade, que está registrada na figura (3.2). Notamos que há 4 curvas distintas relacionadas aos casos em que  $J_1/J_p = J_x/J_p = \{0.0, 0.1, 0.2, 0.3\}$ ; e que o gráfico se dá por uma variação de  $T/J_p$  ao longo de eixo horizontal entre 0.0 até 3.5, enquanto na vertical, há a variação dos valores correspondentes a própria quantidade termodinâmica calculada, no caso o calor específico.

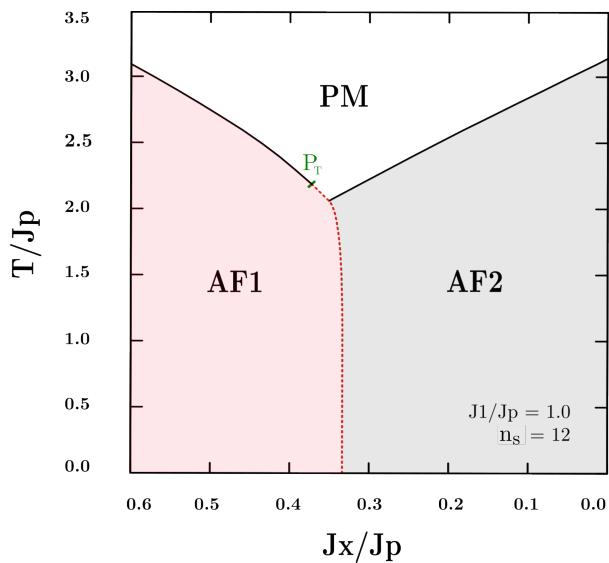
Realizando uma análise a fim de encontrar uma projeção de padrão, notamos que a medida que  $J_1/J_p = J_x/J_p$  cresce, a intensidade do máximo do calor específico aumenta. No entanto, após um valor maior que uma certa quantia de  $J_1/J_p = J_x/J_p$  específico, entre 0.4 e 0.5, o calor específico deixa de apresentar um máximo e passa a ser nulo e

constante — o que é um indício de margem limite para a região "AF2 + U2".

### 3.3 DIAGRAMAS DE FASE

Inicialmente vamos, por questões de exemplificação, apresentar o diagrama de fase para o caso  $J_1/J_p = 1.0$  com o cluster de 12 sítios.

Figura 3.3 – Diagrama de fases para  $\{0.0 \leq T/J_p \leq 3.5\}$  por  $\{0.0 \leq J_x/J_p \leq 0.6\}$  com  $n_s = 12$  sítios e  $J_1/J_p = 1.0$ . Linhas contínuas referem-se às transições de segunda ordem; enquanto as linhas tracejadas, transições de primeira ordem. O ponto  $P_T$  refere-se ao ponto tricrítico.



Fonte: Autor.

Podemos notar quase todos elementos gerais dos diagramas construídos nesse trabalho. Há a demarcação das regiões no gráfico que correspondem as fases antiferromagnéticas presentes nas condições especificadas de  $J_1/J_p$ ,  $J_x/J_p$  e  $T/J_p$  para o cálculo. Nesse caso, notamos haver as fases AF1 em vermelho, AF2 em cinza e PM como a região superior do diagrama. Também podemos visualizar os tipos de transições de fase que há no diagrama pelo tipo da linha que demarca as regiões do gráfico relacionadas as fases. Há duas formas de transição: descontínua / primeira ordem, indicada pela linha tracejada; e contínua / segunda ordem, evidenciada pela linha contínua. Note que a medida que a temperatura de ordenamento  $T/J_p$  diminui, as transições mudam de contínua para descontínua e após uma certa temperatura, o valor de  $J_x/J_p$  para transição entre as fases AF1 e AF2 é basicamente constante, com  $J_x/J_p = 1/3$  — acreditamos que uma justificativa disso está relacionada à tendência de minimização da energia do sistema e, que a partir de uma certa temperatura, a intensidade de interação relacionada à variável  $J_x/J_p$  é praticamente igual ao valor do estado fundamental, mantendo assim uma estabilidade (ou

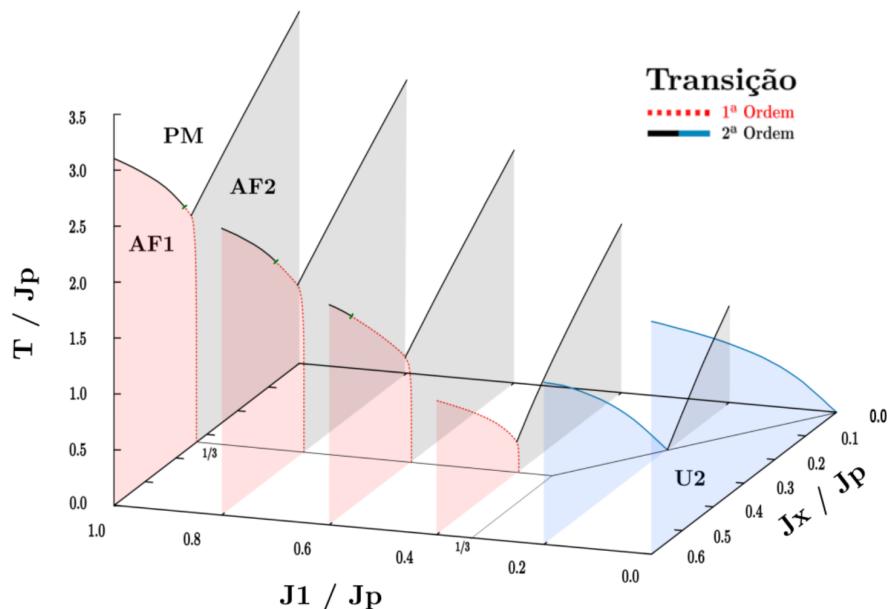
seja, seria algo semelhante à interação inter-atômica ou inter-molecular, onde existe um raio de interação estável ao redor do ponto de equilíbrio, quando analisamos o gráfico do potencial do sistema).

Outra informação de destaque que podemos reparar é o ponto ( $P_T$ ), na cor verde, que refere-se ao ponto tricrítico do sistema. Nota-se que o encontro entre as curvas de transição contínua e descontínua, pelo ramo de  $J_x/J_p > 1/3$ , entre as fases AF1 e PM, ocorre exatamente no ponto tricrítico ( $P_T$ ) — haja vista, que essa situação é uma das condições de definição do ponto tricrítico.

### 3.4 COMPARAÇÃO DE DIAGRAMAS DE FASE: CASO $n_s = 12$

Após construir vários diagramas de fases para diferentes valores fixados de  $J_1/J_p$ , onde os parâmetros de variação eram  $J_x/J_p$  e  $T/J_p$ , podemos visualizar um padrão de comportamento global das fases, que pode ser percebido pelo diagrama de fases presente na figura (3.4). Nesse caso, entendemos que evidenciando apenas os casos com  $J_1/J_p$  fixado em  $\{0.2; 0.4; 0.6; 0.8; 1.0\}$  é uma quantidade de diagramas suficiente para explicitar esse padrão.

Figura 3.4 – Diagrama de fases para o cluster de 12 sítios. Nesse caso, apresentamos diagramas 2D com  $J_1/J_p$  fixado em  $\{0.2; 0.4; 0.6; 0.8; 1.0\}$  enquanto  $J_x/J_p$  e  $T/J_p$  estão variando, respectivamente entre:  $\{0.0 \leq J_x/J_p \leq 0.6\}$  e  $\{0.0 \leq T/J_p \leq 3.5\}$ .



Fonte: Autor.

Na figura 3.4, notamos o conjunto de diagramas contendo as fases AF1 em vermelho, AF2 em cinza, U2 em azul e PM como a região superior do diagrama. Também

Valores do ponto tricrítico		
$J_1/J_p$	$J_x/J_p$	$T/J_p$
1.0	0.372	2.190
0.8	0.426	1.905
0.6	0.526	1.707
0.4	0.885	2.019
0.34	1.094	2.260

Tabela 3.1 – Valores de  $J_1/J_p$ ,  $J_x/J_p$  e  $T/J_p$  para o ponto tricrítico apresentados no diagrama 3D para o cluster com  $n_s = 12$  sítios.

podemos notar que os parâmetros de  $J_x/J_p$  e  $T/J_p$  estão variando, respectivamente, entre:  $\{0.0 \leq J_x/J_p \leq 0.6\}$  e  $\{0.0 \leq T/J_p \leq 3.5\}$ . Com isso, a base do diagrama acaba sendo uma representação do caso  $T/J_p = 0$ , onde há um "ponto de fronteira do estado fundamental"<sup>1</sup> em que  $J_1/J_p = J_x/J_p = 1/3$ .

Traçando um plano perpendicular ao eixo  $J_1/J_p$  e paralelo a  $T/J_p$  sobre o "ponto de fronteira", podemos perceber duas regiões: uma em que  $J_1/J_p > 1/3$ , onde há apenas as fases AF1, AF2 e PM. E outra em que  $J_1/J_p < 1/3$ , onde há apenas as fases U2, AF2 e PM. Ou seja, em alguma região próxima a  $J_1/J_p = 1/3$  ocorre uma mudança das fases existentes no sistema. No caso, a fase AF1 deixa de ocorrer, enquanto U2 surge.

Também é interessante notar o comportamento dos valores das coordenadas do ponto tricrítico — para isso anexamos a tabela 3.1. Podemos notar que a medida que o valor de  $J_1/J_p$  diminui, o valor de  $J_x/J_p$  aumenta. Em contrapartida, o valor de  $T/J_p$  não parece ter um padrão de correlação com  $J_1/J_p$  tão evidente, pois para valores "extremos", tanto  $J_1/J_p$  alto quanto  $J_1/J_p$  baixo,  $T/J_p$  possui valor alto, maior que 2. Consequentemente, existe um valor mínimo de  $T/J_p$  que acontece próximo de  $J_1/J_p = 0.5$  (e que não foi adicionado na tabela).

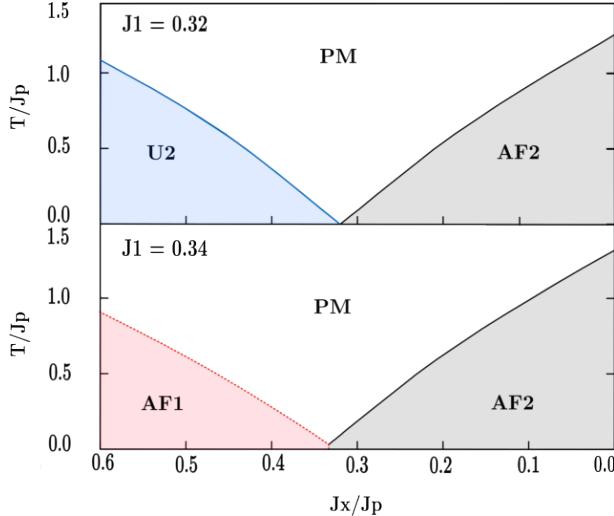
### 3.5 TRANSIÇÕES DE FASE PARA $J_1/J_p \approx 1/3$

Como podemos ver na comparação de diagramas de fase da figura (3.4), perto da região de  $J_1/J_p \approx 1/3$  há uma mudança nas fases que emergem no sistema. Com isso em vista, apresentamos 2 diagramas próximos a  $J_1/J_p = 1/3$ , na figura (3.5). O diagrama localizado mais acima, tem como valor fixado  $J_1/J_p = 0.32$ , enquanto o outro, mais abaixo, com valor fixado  $J_1/J_p = 0.34$ . Ambos são diagramas de  $T/J_p$  por  $J_x/J_p$ , na qual ocorre

---

<sup>1</sup>Esse ponto é parecido com um ponto triplo, entretanto como a transição U2-AF2 parece ser contínua, não haveria coexistência das duas fases. Por isso, uma melhor descrição de tal ponto seria: "ponto em que as fronteiras de fase do estado fundamental se encontram"

Figura 3.5 – Diagramas de fase para  $\{0.0 \leq T/J_p \leq 1.5\}$  por  $\{0.0 \leq J_x/J_p \leq 0.6\}$  com  $n_s = 12$  e  $J_1/J_p$  fixado em  $\{0.32, 0.34\}$ . Linhas contínuas representam transições de primeira ordem, enquanto tracejadas, de segunda ordem. No caso  $J_1/J_p = 0.32$  são detectadas as fases U2, AF2 e PM; enquanto, no caso  $J_1/J_p = 0.34$ , AF1, AF2 e PM — evidenciando uma mudança na emergência das fases existentes no sistema entre algum valor fixo de  $J_1/J_p = 0.32$  e  $J_1/J_p = 0.34$ .



Fonte: Autor.

a variação  $\{0.0 \leq T/J_p \leq 1.5\}$  e  $\{0.0 \leq J_x/J_p \leq 0.6\}$ . Há 2 tipos de curvas na figura, uma com linha contínua, que representa transições de segunda ordem; e outra com linha tracejada, representando transições de primeira ordem. Notamos que no caso  $J_1/J_p = 0.32$ , há apenas transições contínuas, de segunda ordem, demarcando as fases U2, AF2 e PM. Enquanto isso, o  $J_1/J_p = 0.34$  apresenta ambas formas de transição, sendo que a de primeira ordem demarca toda a fronteira entre as fases AF1 e PM, de valores altos de  $J_x/J_p$  até o ponto em que  $J_x/J_p = 1/3$ . Já a transição de segunda ordem, demarca as fronteiras entre as fases AF2 e PM e também, a curta região de fronteira entre as fases AF1 e AF2.

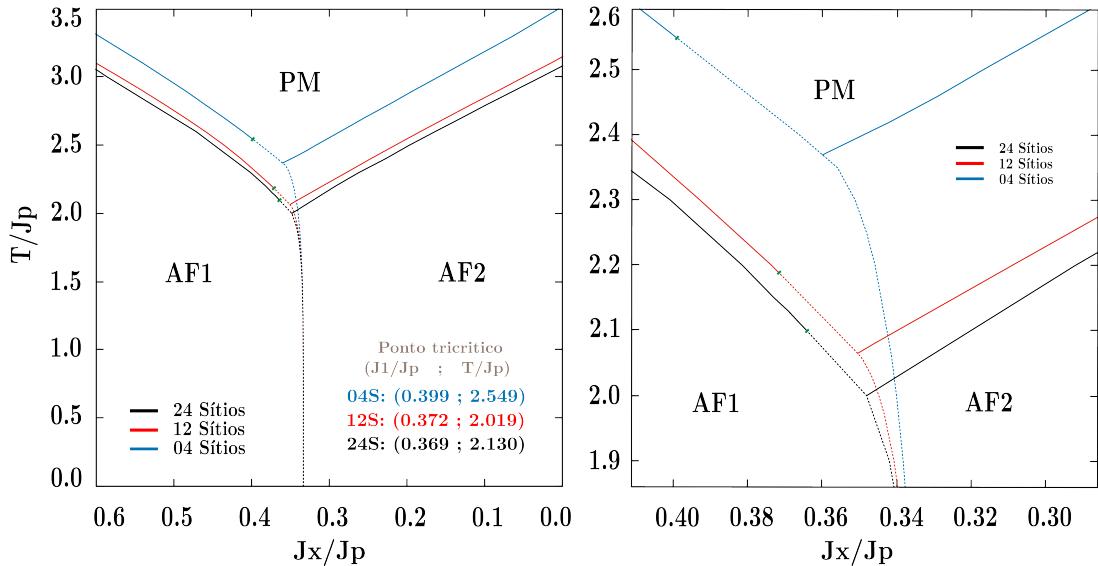
### 3.6 COMPARAÇÃO ENTRE CLUSTERS: CASO $J_1/J_p = 1.0$

Após detalhar o comportamento das fases no caso do cluster de 12 sítios, é interessante também realizar a comparação dos diagramas em tamanhos de clusters diferentes. Nesse caso, calculamos o diagrama de fase com  $J_1/J_p = 1.0$  para clusters com tamanhos  $n_s$  de: 04, 12 e 24 sítios.

Como conseguimos ver na figura (3.6), há três fases independentes do tamanho do cluster, sendo elas: AF1, AF2 e PM. Cada diagrama correspondente a um tamanho específico de cluster está com as curvas de transição de fase com uma cor determinada

sendos respectivamente, cluster de 4, 12 e 24 sítios —> azul, vermelho e preto.

Figura 3.6 – Diagrama de fases  $J_1/J_p = 1.0$ , comparando três tamanhos  $n_s$  de clusters: 04, 12 e 24 sítios. A curva em azul, refere-se ao diagrama calculado para  $n_s = 4$ ; em vermelho, refere-se a  $n_s = 12$ ; e, em preto, refere-se a  $n_s = 24$ . Todos os casos apresentam um comportamento semelhante, principalmente entre os casos de 12 e 24 sítios. Entre as fases AF1 e PM, a localização do ponto tricrítico difere um pouco em cada caso – no qual, é razoável estipular uma tendência: a medida que  $n_s$  aumenta, o valor de  $T/J_p$  diminui e  $J_x/J_p$  aumenta. Os pontos tricríticos foram destacados com um traço verde no gráfico.



Fonte: Autor.

Podemos verificar um padrão na obtenção dos diagramas em relação ao tamanho do cluster, onde se fixarmos um valor qualquer de  $J_x/J_p$  e compararmos os valores de  $T/J_p$  para cada cluster, notamos: a medida que  $n_s$  aumenta, o valor de  $T/J_p$  diminui. Todavia, a diferença de valor gerada entre os clusters vai diminuindo a medida que  $n_s$  fica grande — sugerindo uma possível convergência dos valores do diagrama após um certo  $n_s$ . Além disso, podemos notar que essa tendência geral dos diagramas se reflete também no posicionamento da coordenada do possível ponto tricrítico — como podemos ver na tabela (3.2). A medida que  $n_s$  aumenta, o valor de  $T/J_p$  diminui e  $J_x/J_p$  aumenta.

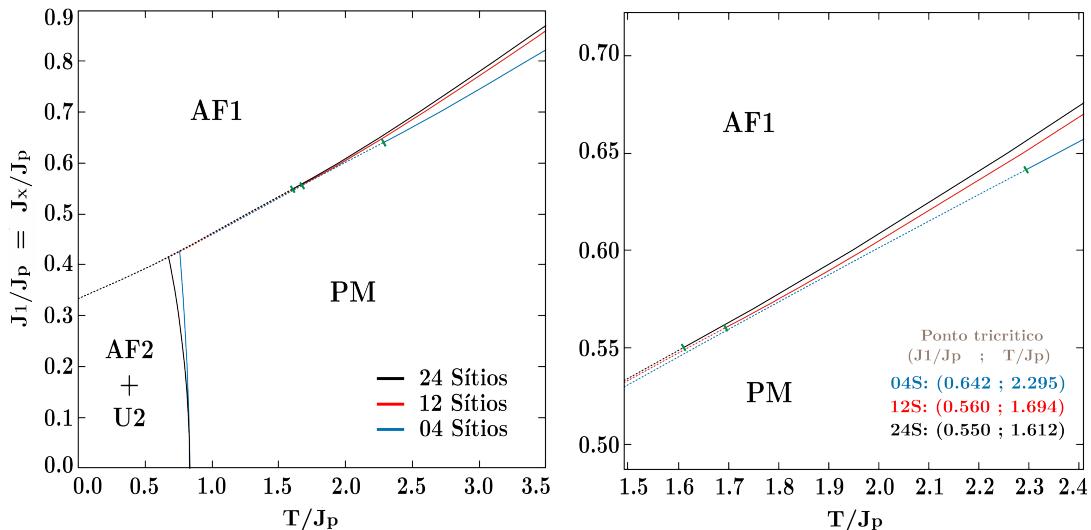
Valores do ponto tricrítico		
$J_1/J_p$	$J_x/J_p$	$T/J_p$
04S	0.399	2.549
12S	0.372	2.019
24S	0.369	2.130

Tabela 3.2 – Valores de  $J_1/J_p$ ,  $J_x/J_p$  e  $T/J_p$  para o ponto tricrítico apresentados no diagrama da figura (3.7) para o caso  $J_1/J_p = 1.0$ . Os valores "04S", "12S" e "24S" correspondem ao tamanho do cluster ( $n_s$ ) calculado. Os pontos tricríticos foram destacados com um traço verde no gráfico.

### 3.7 COMPARAÇÃO ENTRE CLUSTERS: CASO $J_1/J_p = J_x/J_p$

Além do caso para  $J_1 = 1.0$ , somos capazes também de realizar a comparação entre os diferentes tamanhos de cluster, para o caso em que os parâmetros  $J_1/J_p = J_x/J_p$ . Como conseguimos ver na figura (3.7), há duas fases independentemente do tamanho do cluster, sendo elas: AF1 e PM. Cada diagrama correspondente a um tamanho específico de cluster está com as curvas de transição de fase com uma cor determinada sendo, respectivamente, cluster de 4, 12 e 24 sítios —> azul, vermelho e preto.

Figura 3.7 – Diagrama de fases  $J_1/J_p = J_x/J_p$  comparando três tamanhos  $n_s$  de clusters: { 04; 12 e 24 sítios}. A curva em azul, refere-se ao diagrama calculado para  $n_s = 4$ ; em vermelho, refere-se a  $n_s = 12$ ; e, em preto, refere-se a  $n_s = 24$ . Todos os casos apresentam um comportamento semelhante, principalmente entre os casos de 12 e 24 sítios. A detecção da região "AF2 + U2", como já foi explicada anteriormente, foi demarcada usando o máximo do calor específico. Entre as fases AF1 e PM, a localização do ponto tricrítico difere em cada caso – no entanto, é razoável estipular uma tendência: a medida que  $n_s$  aumenta, tanto os valores de  $J_1/J_p$  e  $T/J_p$  diminuem.



Fonte: Autor.

Nesse caso, há também a região "AF2 + U2" que foi demarcada utilizando o máximo do calor específico e que, independente do tamanho do cluster, constata-se para temperaturas  $T/J_p$  e valores  $J_x/J_p$  baixos. Outra constatação é que a variação dos valores de demarcação dos máximos do calor específico não variam significativamente com o aumento do tamanho do cluster - principalmente entre os valores obtidos no cluster de 12 e 24 sítios.

Quanto ao registro das posições do possível ponto tricrítico, notamos uma tendência geral na variação do tamanho do cluster: a medida que  $n_s$  aumenta,  $T/J_p$  e  $J_x/J_p$  diminuem. E, da mesma forma que o caso  $J_1 = 1.0$ , é perceptível uma menor diferença nos resultados com a variação do tamanho do cluster a medida que  $n_s$  aumenta — onde  $T/J_p$  e  $J_x/J_p$  possuem valores muito próximos para o cluster de 12 e 24 sítios, indicando

<b>Valores do ponto tricrítico</b>		
$J_1/J_p$	$J_x/J_p$	$T/J_p$
04S	0.642	2.295
12S	0.560	1.694
24S	0.550	1.612

Tabela 3.3 – Valores de  $J_1/J_p$ ,  $J_x/J_p$  e  $T/J_p$  para o ponto tricrítico apresentados no diagrama da figura (3.7) para o caso  $J_1/J_p = J_x/J_p$ . Os valores "04S", "12S" e "24S" correspondem ao tamanho do cluster ( $n_s$ ) calculado. Os pontos tricríticos foram destacados com um traço verde no gráfico.

uma possível evidência de convergência nos valores do possível ponto tricrítico em relação aos dados encontrados nesse trabalho.

Podemos realizar uma comparação entre os dados encontrados nessa figura (3.7) com a figura (FIG.5) de Albarracín, Rosales e Serra (2018). No caso desse trabalho encontramos os valores que podem ser vistos na tabela (3.3).

Enquanto em Albarracín, Rosales e Serra (2018) é apresentado um possível ponto tricrítico na (FIG.5) que podemos estimar  $J_x/J_p \approx 0.45$  e  $T/J_p \approx 1.02$ . <sup>2</sup>

---

<sup>2</sup>Uma discussão um pouco mais aprofundada sobre as comparações desse caso com o de Albarracín, Rosales e Serra (2018) é feita nas considerações finais.

## 4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

### 4.1 CONCLUSÕES

A análise de transições de fase em sistemas magnéticos pela TCMC (teoria de campo médio com clusters) é um método muito útil para detectar pontos de transição e construir diagramas de fase de forma eficiente e com pouco custo computacional. Como podemos experienciar, cálculos para construção de diagramas nos clusters de 4 e, principalmente, de 12 sítios, além de rápidos, conseguem estimar valores muito próximos ao esperado na literatura, como podemos comparar em (ALBARRACÍN; ROSALES; SERRA, 2018) com os resultados apresentados nas figuras (3.3), (3.4), (3.6) e (3.7).

Como podemos averiguar, as figuras (3.3), (3.4) e (3.6) podem ser comparadas a figura (FIG.4) de Albarracín, Rosales e Serra (2018) para o caso  $J_1/J_p = 1.0$ ; e a figura (3.4) com a figura (FIG.2, sub-índice (a)) para o caso em que  $T/J_p = 0$ . Quanto a figura (3.7) pode ser comparada a figura (FIG.5) do mesmo artigo de referência, para o caso:  $J_1/J_p = J_x/J_p$ . As citações (FIG.4) e (FIG.5) também podem ser visualizadas na figura (1.8).

Em aspectos gerais, o comportamento qualitativo, para todos os resultados mencionados no parágrafo anterior, são semelhantes. Todavia, como uma significativa exceção, encontramos ponto tricrítico em alguns casos onde não é registrado em Albarracín, Rosales e Serra (2018), vide a figura (3.3), (3.4) ou (3.6) — que pode ser comparada a figura (FIG.4) do mesmo artigo de referência (ou figura (1.8)).

Quanto uma análise quantitativa, há uma diferença esperada de valor na escala do eixo de  $T/J_p$  — que, provavelmente, é decorrência de algumas definições e simplificações adotadas de forma diferente ao longo de ambos trabalhos. Consequentemente, acontece o mesmo para os valores de  $J_x/J_p$ . Podemos perceber tais diferenças analisando os pontos dos diagramas: (FIG-4, sub-índice (a))  $J_x/J_p = 2$  onde podemos estimar  $T/J_p \approx 1.855$ ; com a figura (3.3), para  $J_x/J_p = 2$  onde podemos estimar  $T/J_p \approx 2.3$ .

Também devemos comparar os valores quantitativos sobre o ponto tricrítico, que no caso do trabalho de Albarracín, Rosales e Serra (2018) é apresentado uma evidência apenas no resultado da figura (FIG.5). No caso, para o possível ponto tricrítico na (FIG.5) podemos estimar  $J_x/J_p \approx 0.47$  e  $T/J_p \approx 1.02$ ; enquanto para o nosso trabalho, como podemos observar na tabela (3.3):  $J_x/J_p \approx 0.55$  e  $T/J_p \approx 1.61$ , para cluster com  $n_s = 24$ .

Quanto aos objetivos que almejávamos durante a elaboração do projeto desse trabalho, podemos afirmar que conseguimos concluir positivamente tanto o principal, no que diz respeito a detecção e demarcação de um ponto tricrítico no sistema; quanto os secundários, relacionados à comparação das quantidades termodinâmicas envolvidas na obten-

ção do primeiro.

Além desses pontos, também podemos evidenciar a frustração no sistema. Um vestígio disso, é a emergência de uma região no diagrama para  $J_1/J_p = J_x/J_p$  em que não há fase ordenada para nenhuma temperatura. Isso é algo atípico em um sistema de spins interagentes e é um indício de forte frustração.

Outra questão pertinente de discussão é embasado nos critérios ao qual pressupomos para afirmar que há um ponto tricrítico (que seja um resultado geral e não somente uma peculiaridade do método utilizado).

Dado isso, podemos inicialmente alegar que: *independente dos tamanhos dos clusters e dos diferentes casos analisados nas figuras (3.4) e (3.7), há uma detecção de uma região com transição de fase contínua e outra com transição descontínua* — característica de estruturas que apresentam ponto tricrítico (*figura (3.6)*). Contudo, essa argumentação não é suficiente como prova, pois apenas demarca um indício de uma possível região com ponto tricrítico.

Após essa menção mais simplista, podemos alegar um argumento mais razoável (e talvez o único pertinente de ser feito): *os valores de detecção do ponto tricrítico são muito próximos tanto no cluster de 12 quanto o de 24 sítios — que induz uma convergência do posicionamento do ponto tricrítico próxima dos resultados obtidos*. Se calculássemos tamanhos de clusters maiores, a tendência, dado os resultados anteriores, é que a qualidade de precisão nos resultados não iriam distanciar tanto do apresentado. Entretanto, novamente, essa última alegação não pode ser alçada como fundamento de prova, haja vista que tal construção lógica pode-se resumir a apenas uma eventual indução baseada em poucos casos, diferentes, calculados. (Poderia ser questionado sobre a validade de calcular diagramas para clusters maiores, a fim de aumentar os resultados que servem de base para uma possível prova por indução... no entanto, isso não seria muito efetivo, pois o custo computacional seria exponencialmente maior, o que impossibilitaria uma pesquisa em tempo hábil).

Em contrapartida, há dois argumentos possíveis que podem induzir não haver um ponto tricrítico: primeiramente, de forma mais simplista, *a detecção dos valores do ponto tricrítico em todos os casos, foi encontrado em temperaturas significativamente altas*. Contudo, tal alegação não necessariamente é um impedimento, haja vista que podem existir, não tão raramente, sistemas com ponto tricrítico em temperaturas altas. Por último, da mesma forma que os argumentos a favor da existência do ponto tricrítico, alcamos de um argumento mais razoável: *a detecção dos valores do ponto tricrítico no caso de  $J_1/J_p \neq J_x/J_p$  foi muito próxima da localização do "ponto de fronteira"(1). E, para esse caso particular, nossos resultados indicam que a região de transições ordem-desordem descontínuas poderia desaparecer para tamanhos de cluster maiores*.

## 4.2 PERSPECTIVAS

Como possíveis formas de seguimento deste trabalho, podemos indicar: análise das transições de fase para casos com campo magnético externo não nulo; análise da magnetização e da entropia por spin em função desse mesmo campo externo — como, ambas análises, exploradas em Albarracín, Rosales e Serra (2018), todavia utilizando a TCMC. Outra linha de estudo poderia ser em relação a uma melhor demarcação e análise da existência de um ponto tripló para o sistema estudado (rede favo de mel bicamas com interação entre planos).

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

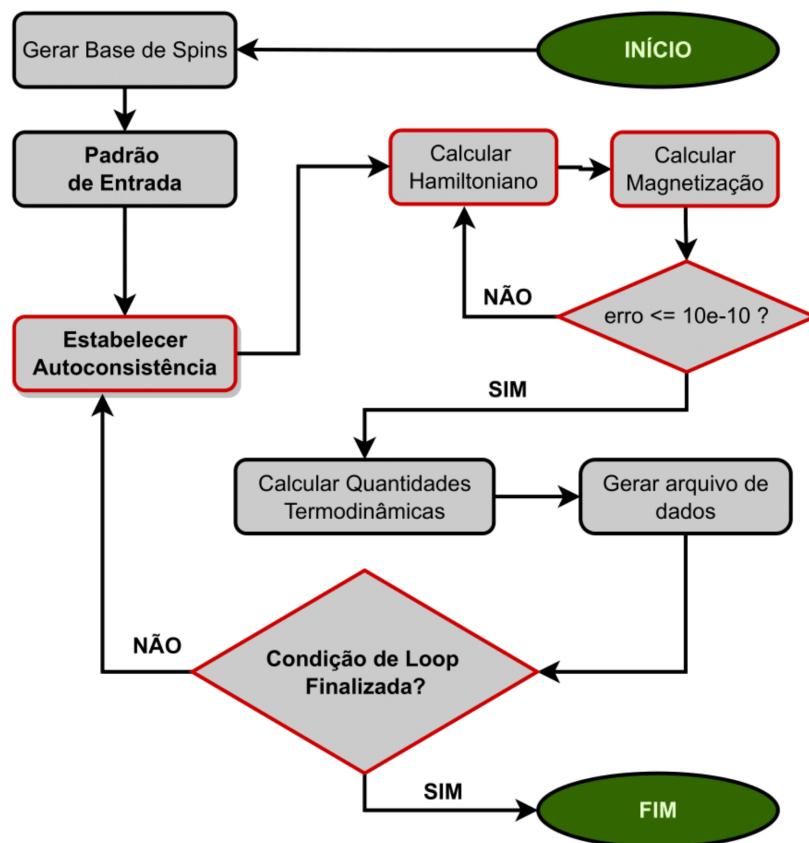
- ALBARRACÍN, F. A. G.; ROSALES, H. D. Field-induced multiple order-by-disorder state selection in an antiferromagnetic honeycomb bilayer lattice. **Physical Review B**, American Physical Society (APS), v. 93, n. 14, abr. 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevb.93.144413>>.
- ALBARRACÍN, F. A. G.; ROSALES, H. D.; SERRA, P. Phase transitions, order by disorder, and finite entropy in the ising antiferromagnetic bilayer honeycomb lattice. **Physical Review E**, American Physical Society (APS), v. 98, n. 1, jul. 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physreve.98.012139>>.
- ARNOLD, B. **The Letter Of Petrus Peregrinus On The Magnet, A.D. 1269**. [S.I.]: Sutton Press, 2008. ISBN 978-1443711302.
- ASHCROFT, N. W. **Solid State Physics**. [S.I.]: Harcourt College Edition, 1973. ISBN 0-03-083993-9.
- BASSALO, J. M. F. **A crônica da Física do Estado Sólido IV - Magnetismo**. Belem, Pará: Revista Brasileira de Ensino de Física, 1993.
- BOBÁK, A. et al. Tricritical behaviour of the frustrated ising antiferromagnet on the honeycomb lattice. **Physics Letters A**, Elsevier BV, v. 380, n. 34, p. 2693–2697, ago. 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.physleta.2016.06.019>>.
- BORNHOLDT, S.; WAGNER, F. Stability of money: phase transitions in an ising economy. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier BV, v. 316, n. 1-4, p. 453–468, dez. 2002. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/s0378-4371\(02\)01218-9](https://doi.org/10.1016/s0378-4371(02)01218-9)>.
- CHATTERJEE, S.; SACHDEV, S. Insulators and metals with topological order and discrete symmetry breaking. **Physical Review B**, American Physical Society (APS), v. 95, n. 20, maio 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevb.95.205133>>.
- CULLITY, B. D.; GRAHAM, C. D. **Introduction to Magnetic Materials**. John Wiley & Sons, Inc., 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002/9780470386323>>.
- CURIE, P. Symétrie dans les phénomènes physiques. **Journal Theoretical Physics**, 1894.
- GRIFFITH, M. A. S. **Propriedades Termodinâmicas de Sistemas Magnéticos Frustrados**. [S.I.]: UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS, 2013.
- GUGGENHEIM, E. A. The principle of corresponding states. **Journal of Chemical Physics**, v. 13, p. 253–261, 1945.
- HEISENBERG, W. Zur theorie des ferromagnetismus. **Zeitschrift fr Physik**, Springer Science and Business Media LLC, v. 49, n. 9-10, p. 619–636, set. 1928. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/bf01328601>>.
- HIRTH, F. Origin of the mariners' compass in china. **The Monist**, Oxford University Press, v. 16, n. 3, p. 321–330, 1906. ISSN 00269662. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/27899661>>.
- HUNG-THE, D. **Frustrated Spin Systems (2nd Edition)**. [S.I.]: World Scientific, 2013.

- ISING, E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. **Zeitschrift für Physik**, Springer Science and Business Media LLC, v. 31, n. 1, p. 253–258, fev. 1925. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/bf02980577>>.
- KHARCHENKO, Y. N. On the solution of one-dimensional ising models. **Journal of Applied Mathematics and Physics**, Scientific Research Publishing, Inc., v. 06, n. 05, p. 960–967, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.4236/jamp.2018.65082>>.
- LOWRIE, W. **Fundamentals of Geophysics**. Cambridge University Press, 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/cbo9780511807107>>.
- MATTIS, D. C. **The Theory of Magnetism I**. Springer Berlin Heidelberg, 1981. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-3-642-83238-3>>.
- NISS, M. History of the lenz-ising model 1920?1950: From ferromagnetic to cooperative phenomena. **Archive for History of Exact Sciences**, Springer Science and Business Media LLC, v. 59, n. 3, p. 267–318, out. 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s00407-004-0088-3>>.
- ONSAGER, L. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. **Physical Review**, American Physical Society (APS), v. 65, n. 3-4, p. 117–149, fev. 1944. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrev.65.117>>.
- PEIERLS, R. On ising's model of ferromagnetism. **Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society**, Cambridge University Press (CUP), v. 32, n. 3, p. 477–481, out. 1936. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/s0305004100019174>>.
- PODOLSKY, D. et al. SO(4) theory of antiferromagnetism and superconductivity in bechgaard salts. **Physical Review Letters**, American Physical Society (APS), v. 93, n. 24, dez. 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevlett.93.246402>>.
- REN, Y.-Z.; TONG, N.-H.; XIE, X.-C. Cluster mean-field theory study of j1-j2heisenberg model on a square lattice. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 26, n. 11, p. 115601, mar. 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0953-8984/26/11/115601>>.
- SALINAS, S. **Introdução à física estatística Salinas, Sílvio**. [S.I.]: Edusp, 2005. ISBN 9788531403866.
- SHULL, C. G.; STRAUSER, W. A.; WOLLAN, E. O. Neutron diffraction by paramagnetic and antiferromagnetic substances. **Physical Review**, American Physical Society (APS), v. 83, n. 2, p. 333–345, jul. 1951. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrev.83.333>>.
- STANLEY, E. Introduction to phase transitions and critical phenomena. by h. eugene stanley, oxford university press, oxford, 1987. **International Journal of Quantum Chemistry**, Wiley, v. 35, n. 4, p. 583–584, abr. 1989. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002/qua.560350412>>.
- TKACIK, G. **Ising models for networks of real neurons**. Cornell University - ArXiv, 2006. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/q-bio/0611072v1>>.
- WEISS, P. L'hypothèse du champ moléculaire et la propriété ferromagnétique. **J. Phys. Theor. Appl.**, v. 6, n. 1, p. 661–690, 1907. Disponível em: <<https://hal.archives-ouvertes.fr/jpa-00241247>>.
- YOSIDA, K. **Theory of Magnetism**. Springer Berlin Heidelberg, 1996. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-3-662-03297-8>>.

## APÊNDICE A – METODOLOGIA PARTE COMPUTACIONAL

Figura A.1 – Representação esquemática do processo computacional do modelo aplicado no presente trabalho. O cálculo do **erro** dentro da autoconsistência é feito da seguinte forma:  $\text{erro} = |m_{\text{atual}} - m_{\text{anterior}}|$ , onde  $m$  está relacionado aos valores de magnetização local; enquanto a condição de parada do looping depende do padrão de entrada. Por exemplo, se estivermos analisando um diagrama entre  $J_x/J_p$  por  $T/J_p$ , então a **condição de parada** da autoconsistência pode ser quando  $T = 0$  para um padrão de entrada da fase PM; ou  $T = T_{\max}$  quando o padrão de entrada for AF1, AF2 ou U2. Contudo, também podemos variar o  $J_x/J_p$  para encontrar pontos de transição e, nesse caso, a **condição de parada** seria  $J_x = 0$  para entrada AF2; e para AF1 ou U2, seria  $J_x = J_{x_{\max}}$ . Quanto a etapa "gerar base de spins", refere-se à criação de uma matriz que contém todas as  $2^{n_s}$  configurações possíveis de spins no modelo — quanto maior o número de sítios  $n_s$  do cluster base da rede, maior a matriz base de spins e, consequentemente, maior será o custo de tempo computacional para realizar cálculos no modelo.

### Algoritmo - TCMC



Fonte: Autor.