



Serviço Público Federal
Ministério da Educação
Fundação Universidade Federal de Mato Grosso do Sul



PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS DOS MATERIAIS

**Efeitos de Desordem em um Sistema
Geometricamente Frustrado**

Willian Carvalho da Silva

Campo Grande - MS

28-02-2020

INSTITUTO DE FÍSICA- INFI

Cidade Universitária|Unidade 5|

Fone (67) 3345 7485

79070-900 | Campo Grande | MS



Serviço Público Federal
Ministério da Educação
Fundação Universidade Federal de Mato Grosso do Sul



PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS DOS MATERIAIS

**Efeitos de Desordem em um Sistema
Geometricamente Frustrado**

Willian Carvalho da Silva

Orientador: Prof. Dr. Fábio Mallmann Zimmer

Dissertação apresentada à Universidade de Mato Grosso sul - UFMS - Instituto de Física, para obtenção do título de mestre em Ciências dos Materiais.

Campo Grande - MS

28-02-2020

INSTITUTO DE FÍSICA- INFI

Cidade Universitária|Unidade 5|

Fone (67) 3345 7485

79070-900 | Campo Grande | MS

Em memória de minha irmã Karina Carvalho da Silva.

Agradecimentos

Agradeço a CAPES por ter custeado meu trabalho, pois sendo beneficiário de bolsa CAPES foi possível garantir minha permanência no Mestrado com dedicação exclusiva.

Agradeço ao Rodrigo Fioravante, técnico do laboratório de modelagem computacional por ter auxiliado na instalação de softwares de acesso livre e por ter contribuído no desenvolvimento dos códigos para obtenção dos resultados numéricos.

Agradeço ao Caio Reis pelo auxílio no uso de softwares de edição de imagens para produção de gráficos e imagens de boa qualidade.

Agradeço a minha namorada Rafella Cristina pelo apoio e incentivo durante o curso.

Aos meus amigos Julian Zanon, Patrynie Garcia, Pablo Paixão, e Dayene Nascimento, pelo companheirismo que me proporcionaram durante o mestrado.

Agradeço também a Andreia Cristina, Daniella Cristina, Graziella Cristina pelo incentivo em aprimorar minha formação acadêmica.

Ao Prof. Dr. Reginaldo Naves Reis pelo incentivo ao ingresso na carreira acadêmica, desde o ensino médio.

Ao Prof. Dr. Fabio Mallmann Zimmer, que por muitas vezes não mediu esforços para contribuir com minha formação enquanto cientista e professor, agradeço pelo zelo com a pesquisa e pela paciência em guiar meu trabalho.

A todos os professores que contribuíram de alguma forma com minha carreira acadêmica e científica.

Agradeço a todos pela confiança e pelo incentivo.

"Todo Poder ao Povo Preto."

Autor Desconhecido

Resumo

A proposta deste trabalho é estudar a relação entre desordem e frustração geométrica. Para isto adotamos um modelo que considera uma rede “checkerboard” com interações antiferromagnéticas entre spins primeiros e segundos vizinhos, além de interações desordenadas apenas entre spins primeiros vizinhos. Utilizamos a técnica de “Cluster Mean Field” para abordar analiticamente o modelo adotado. Nessa técnica, a rede é dividida em clusters idênticos de tamanho finito, com as interações intraclusters calculadas exatamente (diagonalização exata). Já as interações interclusters (entre os spins da fronteira de diferentes clusters) são aproximadas por campos efetivos, determinados de forma auto-consistente no processo de minimização da energia livre em relação aos parâmetros variacionais. É importante ressaltar que as interações desordenadas intercluster são abordadas com auxílio do método das réplicas, juntamente com uma abordagem variacional para teoria do campo médio com clusters. Obtidos os resultados numéricos, analisamos inicialmente os efeitos da frustração geométrica no sistema com desordem desprezível, onde revelou-se uma competição entre as fases Antiferromagnética e Superantiferromagnética, onde o sistema alcançou máxima frustração geométrica quando $J_2/J_1 = 1.0$. Para intensidades $J_2/J_1 < 1.0$ ($J_2/J_1 > 1.0$) a fase antiferromagnética (Superantiferromagnética) mostrou ser favorecida em temperaturas baixas. Em altas temperaturas o sistema foi identificado na fase paramagnética. Em seguida introduzimos a desordem no sistema e buscamos identificar a influência da frustração geométrica no aparecimento da fase Vidro de Spin em baixos níveis de desordem. De fato, quando há competição entre as interações antiferromagnéticas com a desordem é evidente o aparecimento da fase Vidro de Spin em níveis menores de desordem do que quando $J_2/J_1 = 0.0$. A fase Vidro de Spin foi alcançada nos níveis mais baixos de desordem, quando o sistema estava sob ação de forte frustração geométrica ($J_2/J_1 = 1.0$), assim a mesma mostrou ser um potencializador da ação da desordem.

Palavras-chave: Sistemas desordenados, Vidro de Spin, Frustração Geométrica e Antiferromagnetismo.

Abstract

The purpose of this work is to study the relationship between disorder and geometric frustration. For this we adopted a model that considers a checkerboard lattice with antiferromagnetic interactions between first and second neighboring spins, in addition to disordered interactions only between first neighboring spins. We used the Cluster Mean Field to treat model analytically. In this technique, the lattice is divided into identical clusters of finite size, with intracluster interactions calculated exactly (exact diagonalization). Intercluster interactions (between the boundary spins of different clusters) are approximated by effective fields, determined in a self-consistent way in the process of minimizing the free energy in relation to variational parameters. It is important to point out that disordered intercluster interactions are approached within the replica method, together with a variational approach to mean field theory with clusters. Having obtained the numerical results, we initially analyzed the effects of geometric frustration in the system with negligible disorder, where a competition is revealed between the Antiferromagnetic and Superantiferromagnetic phases, with the system reaching the maximum geometric frustration when $J_2/J_1 = 1.0$. For intensities $J_2/J_1 < 1.0$ ($J_2/J_1 > 1.0$) the antiferromagnetic phase (Superantiferromagnetic) proved to be favored at low temperatures. At high temperatures the system was identified in the paramagnetic phase. When we consider disorder in the system, we identify the influence of geometric frustration on the appearance of the Spin Glass phase at low levels of disorder. In fact, when there is competition between antiferromagnetic interactions with the disorder it is evident that the Spin Glass phase appears at lower levels of disorder than when $J_2/J_1 = 0.0$. The Spin Glass phase was reached at the lowest levels of disorder, when the system was under strong geometric frustration ($J_2/J_1 = 1.0$), thus, it proved to be an enhancer of the action of the disorder.

Keywords: Cluttered Systems, Spin Glass, Geometric Frustration e antiferromagnetism.

Sumário

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Introdução | 15 |
| 1.1 | Objetivos Gerais | 19 |
| 1.1.1 | Objetivos Específicos | 20 |
| 1.2 | Proposta de Trabalho | 20 |
| 1.3 | Organização da dissertação | 22 |
| 2 | Conceitos Fundamentais | 23 |
| 2.1 | Fases Magnéticas Convencionais | 23 |
| 2.1.1 | Ferromagnetismo | 24 |
| 2.1.2 | Antiferromagnetismo | 26 |
| 2.2 | Frustração | 28 |
| 2.3 | Fase Vidro de Spin | 34 |
| 3 | Estudo Teórico de Sistemas Magnéticos | 39 |
| 3.1 | Tratamento Estatístico | 40 |
| 3.1.1 | Modelo de Ising | 42 |
| 3.1.2 | Aproximação de Campo Médio | 43 |
| 3.2 | Modelos para Sistemas Magnéticos Desordenados | 43 |
| 3.2.1 | O modelo de Sherrington-Kirkpatrick | 43 |
| 3.2.2 | O modelo de Sherrington-Kirkpatrick com clusters | 46 |
| 3.2.3 | Uma Abordagem Variacional para a Teoria do Campo Médio com Clusters | 47 |
| 4 | Modelo Adotado | 53 |
| 4.1 | Modelo | 54 |
| 4.2 | Abordagem Variacional para a Teoria do Campo Médio com Clusters | 59 |
| 4.3 | Solução com Simetria de Réplicas | 61 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 4.4 | Procedimento Numérico | 64 |
| 5 | Resultados e Discussões | 67 |
| 5.1 | Resultados para Desordem Desprezível | 67 |
| 5.2 | Resultados com Desordem nas Interações | 71 |
| 5.3 | Suscetibilidade Magnética | 87 |
| 6 | Considerações Finais | 91 |

Lista de Figuras

| | | |
|-----|---|----|
| 1.1 | A figuras (a) ilustra a rede com estrutura triangular, onde cada sítio é compartilhado por 6 plaquetas triangulares e cada aresta é compartilhada por duas plaquetas triangulares. A figura (b) ilustra a rede kagomé, onde cada sítio é compartilhado por duas plaquetas triangulares e nenhuma aresta das plaquetas é compartilhada. Na figura (c) é ilustrado a rede tridimensional denominada pi-rocloro de tetraedros empilhados que compartilham cantos. Estas redes exibem frustração geométrica, quando considera-se interações AF entre os momentos magnéticos localizados nos sítios de cada plaqueta triangular (Tetraedro). | 16 |
| 1.2 | Ilustração esquemática da rede “checkerboard”. As linhas pretas e contínuas indicam as interações entre spins primeiros vizinhos e as linhas tracejadas e vermelhas representam as interações entre spins segundos vizinhos. | 21 |
| 2.1 | Descrição esquemática das fases ferromagnética (a), antiferromagnética (b) e paramagnética (c). As setas indicam o momento magnético de spin. | 24 |
| 2.2 | Análise da magnetização dos materiais ferromagnéticos Fe e Fe_3O_4 [27]. | 25 |
| 2.3 | Análise da suscetibilidade magnética em função da temperatura [27]. | 26 |
| 2.4 | Diagramas de fase de um ferromagneto. A figura a) ilustra a linha de coexistência para $T \leq T_c$ e $H = 0$, onde a magnetização é energeticamente equivalente em qualquer direção. A figura c) é ilustrado o comportamento da magnetização em função da temperatura para os estados energeticamente equivalente. A figura d) ilustra o comportamento da magnetização em função de um campo externo. E na figura b) ilustra o comportamento da magnetização em função de um campo externo e da temperatura simultaneamente [28]. | 27 |
| 2.5 | Análise da suscetibilidade magnética do antiferromagneto Cromo [27]. | 28 |

- 2.6 Representação esquemática de uma plaqueta triangular com interações AF. De acordo com as interações adotadas o spin do lado direito pertencente a base da plaqueta triangular não consegue atender simultaneamente as interações com os outros dois spin pertencentes a mesma plaqueta triangular, já que para cada interação o spin da base do lado direito deveria ter uma orientação diferente e como as duas situações são igualmente prováveis, tem-se a rede frustrada geometricamente [5]. 29
- 2.7 Representação esquemática de uma plaqueta quadrada com três interações AF e uma interação FM, conforme é apresentado na figura. Perceba que o spin do topo do lado direito não consegue atender simultaneamente as interações AF e FM as quais é submetido, pois para cada situação temos uma orientação diferente que este spin pode assumir e como cada interação é igualmente provável, a plaqueta torna-se frustrada, cuja frustração é denominada frustração gerada a partir da desordem. Adaptada de [5]. 29
- 2.8 Descrição esquemática de sistemas que contém ciclos de interações frustrados. As linha sólidas representam as interações AF e as linhas tracejadas representam as interações FM. Os círculos pretos (brancos) representam spins de Ising que podem assumir o valor -1 ($+1$). A figura a) ilustra uma rede retangular, a qual é dividida em duas plaquetas quadradas $1 - 2 - 5 - 4$ e $2 - 3 - 6 - 5$ respectivamente, onde a plaqueta $1 - 2 - 5 - 4$ possui três interações AF entre spins primeiros vizinhos e uma interação FM entre spins primeiros vizinhos, já a plaqueta $2 - 3 - 6 - 5$ possui duas interações AF entre spins primeiros vizinhos e duas interações FM entre spins primeiros vizinhos. A figura b) ilustra uma plaqueta triangular com apenas interações AF entre spins primeiros vizinhos. A figura c) ilustra as configurações possíveis para os spins da plaqueta quadrada frustrada no estado de menor energia ($E_0 = 2J_0$). Já a figura d) ilustra as configurações possíveis para a plaqueta triangular frustrada no estado de menor energia ($E_0 = J_0$). Adaptada de [15]. 30

| | | |
|------|---|----|
| 2.9 | Análise do inverso da suscetibilidade magnética em função da temperatura para um sistema magnético AF não frustrado (a) e um sistema magnético com interações AF frustrado (b). Note que θ_{CW} é denominada temperatura de Curie Weiss e T_N é a temperatura que indica o instante da transição de fases AF para PM (Ou vice versa). A temperatura de Curie é obtida extrapolando a curva que representa a fase PM [5]. | 32 |
| 2.10 | Plaqueta quadrada com interações AF entre primeiros e segundos vizinhos [33]. . | 34 |
| 2.11 | Representação esquemática da fase VS. as setas indicam os momentos magnéticos congelados abaixo de um temperatura T_f [5]. | 35 |
| 2.12 | Suscetibilidade χ em função da temperatura T do $Cu - 0,94\%Mn$ medida nas frequências: $\square, 1, 22kHz$; $\circ, 234kHz$; $\times, 10, 4Hz$ e $\triangle, 2, 6Hz$ [34]. | 36 |
| 2.13 | Magnetização M em função da temperatura T , para a liga $AgMn (0,26\%)$ [34]. | 37 |
| 2.14 | Susceptibilidade χ em função da temperatura T para o composto $Ba_3TiRu_2O_9 (0,26\%)$ [9]. | 37 |
| 2.15 | Gráfico do calor específico C em função da temperatura T em função da temperatura para o composto $CuMn$ com $2,79\%$ de Mn [4]. | 38 |
| 3.1 | Calor específico em função da temperatura com interações AF intracluster. Linha sólida representa um cluster de $n_s = 3$ (3 spins em cada clusters) e a linha tracejada representa um cluster contendo $n_s = 6$ (6 spins em cada cluster) [36]. . | 46 |
| 3.2 | Calor específico em função da temperatura com interações AF intracluster. Linha sólida representa um cluster de $n_s = 3$ (3 spins em cada clusters) e a linha tracejada representa um cluster contendo $n_s = 6$ (6 spins em cada cluster) [36]. . | 47 |
| 3.3 | Ilustração esquemática da rede quadrada, dividida em clusters de $n_\sigma = 12$ spins, preservando as interações entre spins primeiros [24]. | 51 |
| 4.1 | Representação esquemática da rede Pirocloro em $3D$ e da rede Checkerboard em $2D$. As linhas sólidas em negrito representam as interações (J), enquanto que as linhas finas representam as interações (J'). | 54 |
| 4.2 | Ilustração esquemática da rede Checkerboard dividida em N_{cl} clusters, com $n_\sigma = 4$ spins em cada cluster. Os clusters estão contornados com linhas contínuas e pretas. | 55 |

| | | |
|-----|---|----|
| 4.3 | Representação esquemática da rede “checkerboard” dividida em clusters com 4 spins. Os círculos brancos (círculos pretos) representam os spins de Ising que assume o valor -1 (1). As linhas contínuas em negrito representam as interações intracluster e as setas tracejadas indicam os campos efetivos atuantes sobre os spins da fronteira do cluster central. Para efeito de representação assumimos que o sistema se comporta como AF, com os spins 1 e 3 (2 e 4) possuindo mesma orientação. | 63 |
| 5.1 | Descrição esquemática das fases antiferromagnética e superantiferromagnética. As setas indicam o momento magnético de spin. | 67 |
| 5.2 | Magnetizações m_{AF} e m_{SAF} em função da temperatura $T/ J_1 $ para diferentes valores de $r = J_2/J_1$ | 69 |
| 5.3 | Diagrama de fase para rede “checkerboard” sem desordem e com campo externo nulo. | 69 |
| 5.4 | Magnetização em função de $J_2/ J_1 $, com $T/ J_1 = 0.5$ | 70 |
| 5.5 | Energia livre por spin versus $J_2/ J_1 $, com $T/ J_1 = 0.5$ | 70 |
| 5.6 | Comportamento dos parâmetros de ordem e campos efetivos considerando apenas interações AF entre os spins primeiros vizinhos ($ J_1 = 1$ com $r = 0.0$) em diferentes níveis de desordem. O gráfico (a) ilustra os campos efetivos (m_1, m_2, m_3 e m_4) em função da temperatura ($T/ J_1 $), quando $r = 0.0$ e $J/ J_1 = 1.0$. A figura (b) ilustra o gráfico da magnetização m_{AF} e do parâmetro de ordem VS q em função da temperatura para desordem igual a $J/ J_1 = 1.0$. A figura (c) ilustra os parâmetros de ordem q e m_{AF} em função da temperatura para desordem igual a $J/ J_1 = 3.0$. A figura (d) ilustra o comportamento da magnetização m_{AF} e do parâmetro de ordem q em função da desordem $J/ J_1 $, mantendo constante a temperatura em $T = 2.5$ | 72 |
| 5.7 | Diagrama de fase para a rede “checkerboard”: $T/ J_1 $ versus $J/ J_1 $, com $r = J_2/J_1 = 0.0$ | 74 |

| | | |
|------|---|----|
| 5.8 | <p>Na figura (a) é ilustrado o comportamento dos campos efetivos (m_1, m_2, m_3 e m_4) em função da temperatura (T/ J_1) para a fase AF, adotando $r = 0.5$ e $J/ J_1 = 1.0$. Na figura (b) ilustramos o gráfico dos parâmetros de ordem m_{AF} e q em função da temperatura (T/ J_1), fixando a desordem em $J/ J_1 = 1.0$, no regime em que $r = 0.5$. A figura (c) ilustra o gráfico dos parâmetros de ordem q, m_{AF} e m_{SAF} em função da temperatura (T/ J_1) para uma desordem de $J/ J_1 = 3.0$, no regime em que $r = 0.5$ e neste caso $m_{AF} = m_{SAF} = 0$ para qualquer valor de temperatura. Já na figura (d) ilustramos o comportamento das magnetização m_{AF} e do parâmetro de ordem q em função da desordem J/ J_1, mantendo constante a temperatura em $T/ J_1 = 1.5$ e considerando $r = 0.5$. Note que nas figuras (b), (c) e (d) temos $m_{SAF} = 0$.</p> | 75 |
| 5.9 | <p>Diagrama de fase: T/ J_1 versus J/ J_1, com $r = J_2/J_1 = 0.5$.</p> | 76 |
| 5.10 | <p>Nestes gráficos é avaliado o comportamento do sistema para o caso em que $r = 1.5$. O gráfico (a) ilustra os campos efetivos (m_1, m_2, m_3 e m_4) em função da temperatura (T/ J_1) para a fase SAF, com $J/ J_1 = 1.0$. As figuras (b) e (c) ilustram os gráficos das magnetizações (m_{SAF} e m_{AF}) e do parâmetro de ordem q em função da temperatura (T/ J_1) para intensidades de desordem valendo $J/ J_1 = 1.0$ e $J/ J_1 = 3.0$ respectivamente. Neste último caso tem-se $m_{AF} = m_{SAF} = 0$ para qualquer valor de temperatura. A figura (d) ilustra o comportamento da magnetização m_{SAF} e do parâmetro de ordem q em função da desordem J/ J_1, mantendo constante a temperatura em $T/ J_1 = 1.5$. Observe que nas figuras (b), (c) e (d) temos $m_{AF} = 0$.</p> | 78 |
| 5.11 | <p>Diagrama de fase: T/ J_1 versus J/ J_1, com $r = 1.5$.</p> | 79 |

- 5.12 Na figura (a) é exibido o gráfico dos campos efetivos (m_1, m_2, m_3 e m_4) versus a temperatura ($T/|J_1|$), quando $r = 2.0$ e $J/|J_1| = 1.0$. Na figura (b) exibimos o gráfico dos parâmetros de ordem m_{SAF} , m_{AF} e q em função da temperatura ($T/|J_1|$) para uma desordem fixa $J/|J_1| = 1.0$, onde $r = 2.0$. Na figura (c) são analisados a dependência com a temperatura dos mesmos parâmetros de ordem analisados na figura (b), porém para uma desordem fixa $J/|J_1| = 3.0$, observe que nesta situação temos $m_{AF} = m_{SAF} = 0$ para qualquer valor de temperatura. Na figura (d) apresentamos o comportamento dos parâmetros de ordem (m_{SAF} , m_{AF} e q) em função da desordem $J/|J_1|$, para uma temperatura fixa $T/|J_1| = 1.5$, ainda no regime em que $r = 2.0$. Note que m_{AF} é nula nos gráficos (b), (c) e (d). 80
- 5.13 Diagrama de fase para a rede “checkerboard”: $T/|J_1|$ versus $J/|J_1|$, com $r = J_2/J_1 = 2.0$ 81
- 5.14 Comportamento dos parâmetros de ordem e dos campos efetivos quando $r = 1.0$. A figura (a) ilustra o comportamento dos campos efetivos (m_1, m_2, m_3 e m_4) em função da temperatura ($T/|J_1|$) para a fase SAF, quando $J/|J_1| = 1.0$. A figura (b) ilustra o gráfico das magnetizações (m_{SAF} e m_{AF}) e do parâmetro de ordem q em função da temperatura ($T/|J_1|$) para desordem igual a $J/|J_1| = 1.0$. A figura (c) ilustra o gráfico dos parâmetros de ordem q , m_{AF} e m_{SAF} em função da temperatura ($T/|J_1|$) para desordem valendo $J/|J_1| = 3.0$ e neste caso $m_{AF} = m_{SAF} = 0$ para qualquer valor de temperatura. A figura (d) ilustra o comportamento da magnetização m_{SAF} e do parâmetro de ordem q em função da desordem $J/|J_1|$, mantendo constante a temperatura em $T/|J_1| = 1.0$. Note que m_{AF} é nulo nas figuras (b), (c) e (d). 82
- 5.15 Diagrama de fase: $T/|J_1|$ versus $J/|J_1|$, com $r = J_2/J_1 = 1.0$ 83
- 5.16 Diagrama de fase $T/|J_1|$ versus $J/|J_1|$, para diversos níveis de frustração geométrica: $r = 0.0, 0.5, 1.0, 1.5$ e 2.0 . As linhas sólidas são para delimitar as transições de fases quando $r = 1$. As ordens AF e SAF são encontradas em $J/|J_1| \rightarrow 0$ para $r < 1$ e $r \geq 1$, respectivamente. A legenda no canto superior direito indica o correspondente parâmetro de frustração geométrica com o respectivo diagrama de fase. 83

| | | |
|------|--|----|
| 5.17 | Representação esquemática da rede “checkerboard” no regime SAF em baixas temperaturas, onde a desordem possui magnitude próxima do parâmetro de frustração geométrica. | 84 |
| 5.18 | As figuras (a), (b) e (c) ilustram o comportamento dos campos efetivos (m_1 , m_2 , m_3 e m_4) em função da temperatura ($T/ J_1 $) para a fase SAF, quando a desordem vale $J = 1.0$, $J = 2.0$ e $J = 2.20$ respectivamente, em ambos os gráficos o parâmetro de frustração geométrica assume o valor $r = 2.0$. A figura (d) ilustra o comportamento dos campos efetivos em função da desordem ($J/ J_1 $) para uma temperatura fixa de $T/ J_1 = 0.5$ | 86 |
| 5.19 | Inverso da suscetibilidade magnética ($1/\chi$) versus temperatura ($T/ J_1 $) para diversos níveis de frustração geométrica $r = 0.0, 0.5, 1.0$ e 2.0 , com desordem desprezível ($J/ J_1 = 0.0$). A curva sólida representa o comportamento do inverso da suscetibilidade magnética em função da temperatura, enquanto que a linha tracejada é o ajuste linear realizado para a curva sólida no trecho em que o sistema encontra-se na fase PM. A temperatura T_N é temperatura da transição de fase AF/SAF para PM (ou vice-versa). A constante θ_{CW} é obtida ao realizar o ajuste linear, determinando o ponto de encontro do ajuste linear com o eixo horizontal ($T/ J_1 $). | 88 |
| 5.20 | Inverso da suscetibilidade magnética ($1/\chi$) versus Temperatura ($T/ J_1 $) para diversos níveis de frustração geométrica $r = 0.0, 0.5, 1.0$ e 2.0 , com uma desordem fixa em $J/ J_1 = 1.0$. A curva sólida representa o comportamento do inverso da suscetibilidade magnética em função da temperatura, enquanto que a linha tracejada é o ajuste linear realizado para a curva sólida no trecho em que o sistema encontra-se na fase PM. A temperatura T_N é temperatura de transição de fase AF/SAF para PM (ou vice-versa). A constante θ_{CW} é obtida ao realizar o ajuste linear, determinando o ponto de encontro do ajuste linear com o eixo horizontal ($T/ J_1 $). | 89 |
| 5.21 | Suscetibilidade magnética (χ) versus Temperatura ($T/ J_1 $) com $r = 1.0$ e $J/ J_1 = 3.0$. A temperatura T_f marca a transição de fase VS para PM (ou vice-versa). | 90 |

Capítulo 1

Introdução

Fenômenos magnéticos são observados desde a antiguidade, porém somente com o entendimento em nível atômico das propriedades magnéticas é que houve a exploração desses de maneira muito mais eficaz, tendo impacto direto no desenvolvimento de inúmeras tecnologias [1]. Atualmente, um interesse particular tem sido dado ao estudo das propriedades dos sistemas de spins fortemente interagentes, que são extremamente relevantes para diversas áreas de pesquisa, como em matéria condensada, sistemas complexos e informação quântica[2]. Nessa classe de problemas, a competição das interações, assim como a desordem, podem levar à fenômenos que ainda necessitam de melhor compreensão tanto do ponto de vista experimental quanto teórico [3].

Por exemplo, a presença de desordem em sistemas magnéticos pode levar ao aparecimento da fase Vidro de Spin (VS). Essa fase magnética não convencional é caracterizada pelo congelamento dos momentos magnéticos em direções aleatórias, ao invés de um tipo padrão uniforme e periódico que estamos acostumados a encontrar em magnetos convencionais, como nas ordens ferromagnética (FM) e antiferromagnética (AF)[4]. Para a fase VS ocorrer, dois ingredientes são fundamentais: desordem e frustração. A frustração refere-se a competição entre as diferentes interações, de modo que não há uma única configuração de spins favorecida energeticamente, gerando uma alta degenerescência. Essas interações, no caso do VS, devem ser ao menos parcialmente aleatórias [4].

A frustração também pode ter origem em outra fonte, como é o caso da frustração oriunda da geometria da rede, a frustração geométrica. Esse tipo de frustração também refere-se a impossibilidade do sistema atender todas as interações entre os momentos magnéticos (spins). Geralmente a frustração geométrica surge quando interações AF são aliadas a determinadas

geometrias de rede. São exemplos de redes altamente frustradas as: Rede kagomé, triangular e Pirocloro [5]. As redes kagomé e triangular são exemplos bidimensionais de redes frustradas quando considera-se interações AF entre seus spins primeiros vizinhos. A rede triangular é composta por plaquetas triangulares que compartilham os vértices e suas arestas, isto é cada vértice é compartilhado por seis triângulos e cada aresta por dois triângulos conforme pode ser visualizado na figura 1.1 (a). A rede kagomé também possui plaquetas triangulares em sua estrutura, porém somente os vértices são compartilhados por plaquetas triangulares diferentes, onde cada vértice é compartilhado por dois triângulos formando a estrutura ilustrada na figura 1.1 (b). A rede pirocloro é um exemplo tridimensional de rede frustrada, quando considera-se interações AF entre os momentos magnéticos que compõe sua rede. A rede pirocloro pode ser pensada em termos de momentos magnéticos que decoram uma rede tridimensional de tetraedros que compartilham cantos, conforme é ilustrado na figura 1.1 (c), onde a rede pirocloro forma uma estrutura de tetraedros empilhados.

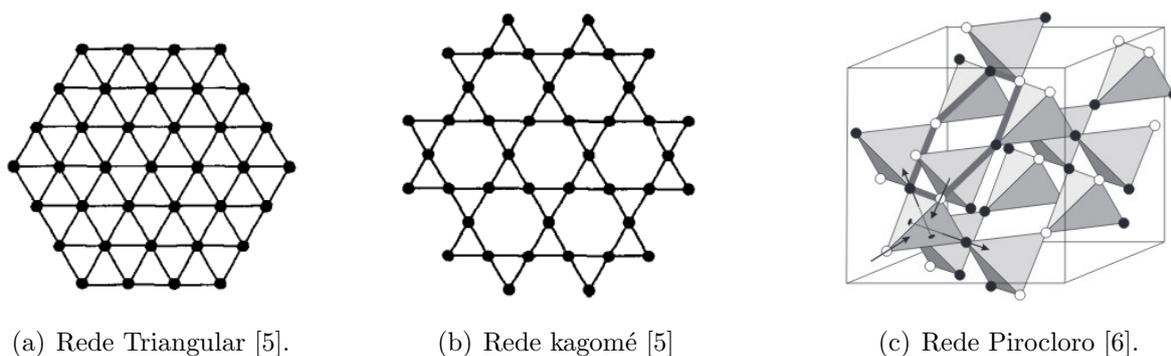


Figura 1.1: A figuras (a) ilustra a rede com estrutura triangular, onde cada sítio é compartilhado por 6 plaquetas triangulares e cada aresta é compartilhada por duas plaquetas triangulares. A figura (b) ilustra a rede kagomé, onde cada sítio é compartilhado por duas plaquetas triangulares e nenhuma aresta das plaquetas é compartilhada. Na figura (c) é ilustrado a rede tridimensional denominada pirocloro de tetraedros empilhados que compartilham cantos. Estas redes exibem frustração geométrica, quando considera-se interações AF entre os momentos magnéticos localizados nos sítios de cada plaqueta triangular (Tetraedro).

É importante ressaltar que a frustração geométrica reduz a temperatura crítica (de ordenamento) ou até mesmo impede o surgimento de ordem de longo alcance. Assim, materiais fortemente frustrados geometricamente permanecem desordenados em baixas temperaturas, apresentando entropia finita. Essa propriedade sugere que eles são candidatos para uso em refrigeradores adiabáticos de desmagnetização [7]. Em outras palavras, uma potencial aplicação tecnológica para sistemas geometricamente frustrados seria no processo de refrigeração magnética

via efeito magnetocalórico¹. Além disso, tem sido demonstrado que materiais geometricamente frustrados podem exceder a taxa de resfriamento de um paramagneto ideal por mais de uma ordem de grandeza, evidenciando mais ainda a vantagem de se utilizar um material que apresente forte frustração geométrica no processo de refrigeração magnética [8].

Por outro lado a desordem é algo inerente a sistemas físicos e os seus efeitos em sistemas geometricamente frustrados ainda carece de melhor compreensão. Sabe-se que pequenas intensidades de desordem não levaria ao aparecimento da fase VS em sistemas convencionais [5]. No entanto, vários sistemas físicos com frustração geométrica têm mostrado a fase VS em baixos níveis de desordem tais como $Ba_3TiRu_2O_9$, $Y_2Mo_2O_7$ e $Co_3Mg(OH)_6Cl_2$ [9, 10, 11]. Para uma desordem estimada de 5% se observou a fase VS no pirocloro $Y_2Mo_2O_7$ [10]. Deste modo, nossa proposta é investigar qual o papel da desordem em sistemas com frustração geométrica. A motivação desta pesquisa reside no seguinte questionamento: Por que sistemas com frustração geométrica, mesmo sob presença de baixo nível de desordem, podem apresentar a fase VS? Neste sentido um dos propósitos deste trabalho é ao menos direcionar o caminho para a resposta deste questionamento. A importância da busca por uma melhor compreensão da relação entre desordem e frustração geométrica, não se limita apenas em responder este questionamento. Pois, como já foi dito antes, sistemas com frustração geométrica poderiam ser usados no processo de refrigeração magnética (via efeito magneto calórico), no entanto a frustração geométrica pode favorecer a fase VS mesmo em baixo nível de desordem. Logo, compreender a relação entre desordem e frustração geométrica é relevante tanto do ponto de vista teórico como tecnológico.

Do ponto de vista teórico, sistemas magnéticos são descritos por modelos, que de certo modo buscam traduzir para uma linguagem matemática o comportamento do sistema. Os modelos que descrevem sistemas magnéticos têm sido úteis para elucidar e estudar diversos fenômenos coletivos observados na natureza, não se limitando apenas a aplicações e contribuições a física, mas também em outros campos, como ciência da computação, matemática e biologia [4]. Por exemplo, muitos conceitos e procedimentos estatísticos usados na descrição de sistemas magnéticos, em especial os desordenados, têm sido estendidos a outras áreas. Vale ressaltar que descrever um sistema de muitos corpos de forma a obter os resultados exatos nem sempre é possível devido a enorme quantidade de corpos que o sistema compõe, mesmo que utilizemos a computação para acelerar o processo de cálculo, ainda haverá uma limitação nos

¹O efeito magnetocalórico consiste no aquecimento ou resfriamento da matéria num processo adiabático em resposta a variações do campo magnético externo.

cálculos computacionais tanto em velocidade, quanto em capacidade de realizar os cálculos. Ou seja, em muitos casos mesmo que seja implementado o cálculo computacional para determinar alguma quantidade ou grandeza física a qual possa contribuir para descrição de sistemas de muitos corpos, haverá um custo computacional que muitas vezes pode ser elevado e inviável. Devido a escassez de modelos com solução exata, em particular quando envolve desordem, tem-se como alternativa para descrição de sistemas magnéticos com desordem utilizar métodos aproximativos, como por exemplo, campo médio ou métodos melhorados de campo médio, como a técnica de “cluster mean field” [5].

Uma abordagem que explora de maneira muito eficiente a frustração geométrica foi tratada no modelo $J_1 - J_2$. Nesse modelo são considerados interações AF entre primeiros vizinhos e segundos vizinhos numa rede quadrada. Quando há apenas as interações J_1 entre primeiros vizinhos, não ocorre frustração geométrica e o sistema apresenta a fase AF em temperaturas baixas. No entanto, quando a interação de troca J_2 entre spins segundos vizinhos não é mais desprezível, a rede pode ficar frustrada [12]. Nesse caso há uma competição entre as interações de primeiro e segundos vizinhos. Quando as interações J_2 são dominantes uma fase Superantiferromagnética (SAF)² surge, onde formam-se linhas ou colunas de spins antialinhadas. Uma das vantagens deste modelo é que permite a frustração geométrica, além de ter um parâmetro capaz para controlar a intensidade da frustração geométrica (razão entre interações J_1 e J_2).

Modelos que consideram frustração geométrica e desordem simultaneamente ainda são escassos. Alguns exemplos dessa abordagem são os propostos nas referências [13, 14, 15, 16, 17] que usaram clusters. Nesses considerou-se que as interações de longo alcance interclusters seriam desordenadas, logo a desordem estaria presente nas interações entre os momentos magnéticos dos clusters e não entre spins de diferentes clusters. A frustração nestas abordagens surge de interações AF aliadas a geometria da rede de modo que os clusters possuem uma geometria frustrada e são tratados exatamente. As interações desordenadas entre os clusters são tratadas a nível de campo médio. Nas abordagens citadas acima verificou-se o aparecimento da fase VS mesmo em baixos níveis de desordem e a justificativa para tal efeito é que os clusters de spins atuam como unidades que potencializam as interações desordenadas [16]. Outro modelo que possibilitou analisar os efeitos da desordem e frustração geométrica numa rede quadrada é desenvolvido em detalhes na referência [17], neste considera-se clusters quadrados (com 4 spins cada clusters localizados nos vértices de cada quadrado), onde as interações desordenadas

²O estado fundamental desta fase apresenta uma estrutura de linhas ou (colunas) de spins ordenados ferromagneticamente, cuja orientação de cada linha (ou coluna) alternam-se ao longo de toda rede

existem entre os clusters, enquanto que nas intracluster são consideradas interações AF entre os spins primeiros (J_1) e segundos (J_2) vizinhos. Assim é possível controlar a magnitude da frustração ajustando o parâmetro de controle $r = J_2/J_1$ que indica a magnitude do conflito de interações de primeiros e segundos vizinhos, deste modo encontrou-se para qualquer nível de desordem a fase VS, quando a frustração fosse máxima. Mas neste as interações AF consideradas foram de curto alcance (intracluster). Uma das desvantagens dessas abordagens é assumir a formação de clusters, com interações desordenadas somente entre momentos magnéticos de clusters, ignorando as interações desordenadas que podem ocorrer também entre os spins da rede e não somente entre clusters.

Já nas abordagens realizadas recentemente nos trabalhos de Yokota [10, 18, 19], considera-se interações desordenadas entre spins aliadas a interações AF em redes triangulares. Sabe-se que redes triangulares com interações AF nos conduzem a um sistema geometricamente frustrado e no caso da rede triangular empilhada, devido a frustração geométrica (FG) da rede encontrou-se a fase VS em menor nível de desordem do que quando é considerado interações FM na mesma rede [18]. Resultados semelhantes foram obtidos nas referências [10, 19], onde considerou-se redes com estruturas de tetraedros e triângulos com interações AF. Nestas abordagens não é possível controlar a magnitude da frustração geométrica, e este aspecto se revela como uma debilidade da abordagem, tornando a metodologia adotada nas referências [10, 18, 19] passível de melhora. Nessa perspectiva, é intensificado ainda mais a importância de se buscar novos modelos para descrever sistemas geometricamente frustrados com desordem. Vale destacar que nestas últimas abordagens apresentadas não há um tratamento com clusters propostos para explicar o surgimento da fase VS com cluster.

1.1 Objetivos Gerais

A finalidade deste trabalho é analisar a relação entre desordem e frustração geométrica do ponto de vista do estudo de um modelo teórico em uma rede “checkerboard” com interações desordenadas. Com isso, pretendemos elucidar efeitos da presença de desordem em sistemas com frustração geométrica.

1.1.1 Objetivos Específicos

1. Conhecer a caracterização experimental dos vidros de spins e estudar do ponto de vista teórico sistemas magnéticos desordenados com essa fase.
2. Estudar sistemas geometricamente frustrados e como considerar efeitos de desordem nesses.
3. Estudar métodos aproximativos capazes de considerar simultaneamente desordem e frustração geométrica.
4. Propor um modelo que considere frustração geométrica e desordem nas interações, que possa ser estudado por uma abordagem variacional de campo médio com clusters.
5. Construir os diagramas de fases para diferentes valores de temperatura, desordem e intensidade de frustração geométrica.

1.2 Proposta de Trabalho

Neste trabalho apresentamos um modelo para estudar a relação entre desordem e frustração geométrica adotando a rede “checkerboard”, também conhecida como rede do tipo tabuleiro de xadrez. Esta é uma rede com estrutura quadrada, com interações entre spins primeiros e segundos vizinhos. A figura 1.2 ilustra a rede “checkerboard”, perceba que em cada sítio da rede há um spin de Ising³, assim as linhas contínuas pretas representam interações entre spins primeiros vizinhos, as linhas tracejadas vermelhas representam as interações entre spins segundos vizinhos.

A escolha de explorar a rede “checkerboard” é por esta ser considerada o caso análogo bidimensional da rede pirocloro ilustrada na figura 1.1 (c). Tendo em vista que existe uma grande quantidade de materiais que exibem esta estrutura de rede, e como há uma grande complexidade de abordar a rede pirocloro em $3D$ é conveniente tratar o problema em duas dimensões ($2D$) [20]. Essa rede reproduz as interações que ocorrem na rede pirocloro, onde as interações entre spins segundos vizinhos surgem do processo de “achatamento” dos tetraedros que compõe uma rede pirocloro [21]. Alguns trabalhos que exploram modelos de spins têm usado a rede “checkerboard” para estudo de forma simplificada dos efeitos da frustração em

³Chamamos de spin de Ising a variável de spin associada a cada sítio da rede que pode assumir os valores +1 ou -1.

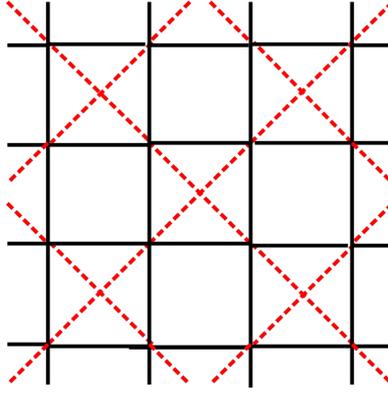


Figura 1.2: Ilustração esquemática da rede “checkerboard”. As linhas pretas e contínuas indicam as interações entre spins primeiros vizinhos e as linhas tracejadas e vermelhas representam as interações entre spins segundos vizinhos.

compostos piroclóricos. É interessante destacar que os resultados não têm revelado modificações significativas ao se considerar o análogo bidimensional da rede pirocloro, ao invés de utilizar a própria rede pirocloro [20, 21, 22].

Nossa proposta reside em considerar interações AF entre primeiro e segundos vizinhos na rede “checkerboard” e interações desordenadas apenas entre os spins primeiros vizinhos. As interações desordenadas são representadas por variáveis aleatórias independentes, que seguem uma distribuição gaussiana.

A finalidade é determinar energia livre por spin, já que a partir desta podemos encontrar toda informação termodinâmica do sistema. Observe que para determinar a energia livre por spin é necessário realizar uma média sobre as configurações associadas as interações desordenadas, já que existe uma infinidade de configurações possíveis. Note que o foco é reduzir um problema de muitos corpos para um problema efetivo com um número finito de sítios [15]. A dificuldade neste tipo de problema é determinar a média sobre as desordens, para contornar isto é usado o método das réplicas (Este método será explicado em detalhes na seção 3.2.1). Juntamente com o método das réplicas utilizamos a técnica de “Cluster Mean Field” para tratar analiticamente as interações desordenadas. A técnica de “Cluster Mean field” apresenta baixo custo computacional, principalmente em problemas que envolvem sistemas desordenados, e tem-se mostrado que os resultados determinados para temperaturas críticas são na maioria das vezes mais precisos em relação a outras técnicas que visam também tratar sistemas desordenados [23]. Vale ressaltar que quando nos referimos a resultados mais precisos, estamos comparando os resultados teóricos com os experimentais, logo quanto mais próximo o resultado teórico do experimental, mais preciso é o resultado teórico. Para tratar as interações

desordenadas seguimos um processo análogo ao descrito na referência [24], onde considera-se a desordem presente entre os spins primeiros vizinhos. Porém neste não é considerada frustração geométrica, apenas interações desordenadas entre spins primeiros vizinhos.

A solução com simetria de réplicas é considerada para obter soluções auto-consistentes da magnetização (m) e do parâmetro de ordem vidro de spin (q). Ambos, m e q surgem das aproximações utilizadas que visam desacoplar as interações interclusters. Por fim, para resolução das equações auto-consistentes, implementamos um código em Fortran 95 e no mesmo utilizamos o método de Monte Carlo para cálculo das integrais gaussianas relacionadas com as interações desordenadas que surgem em nosso problema. A partir dos resultados obtidos para os parâmetros m e q , obtemos a energia livre por spin do sistema e conseqüentemente, podemos determinar toda informação termodinâmica do sistema.

1.3 Organização da dissertação

Esta dissertação esta estruturada da seguinte maneira:

1. No capítulo 2 é feito uma breve descrição das fases magnéticas convencionais, como são caracterizadas e quais são os efeito da frustração, em particular a frustração geométrica, sobre esses sistemas e também é apresentado a caracterização da fase Vidro de Spin.
2. No capítulo 3 são apresentados os principais modelos teóricos para sistemas desordenados usados para descrever os a fase vidro de spin, tais como o modelo de Edwards e Anderson, o modelo SK, a abordagem de *Soukolis e Levin*, a abordagem de *Baviera R.; Pasquini M.*; e *Serva M.*
3. No capítulo 4 apresentamos o modelo que é o objeto de estudo desta dissertação, seu tratamento analítico e numérico;
4. No capítulo 5 são apresentados e discutidos os resultados obtidos numericamente para diferentes valores dos parâmetros de controle;
5. No capítulo 6 é feita a conclusão do trabalho.

Capítulo 2

Conceitos Fundamentais

Este capítulo tem por objetivo apresentar características gerais de sistemas magnéticos, bem como as principais fases encontradas. Pretendemos também descrever como essas fases magnéticas são caracterizadas e quais são os efeitos da frustração, em particular a frustração geométrica, sobre esses sistemas.

2.1 Fases Magnéticas Convencionais

As propriedades magnéticas dos materiais são reflexo do comportamento de seus momentos magnéticos. Nos sólidos, do ponto de vista microscópico, os momentos magnéticos têm origem basicamente nos elétrons e podem ser de duas fontes distintas: movimento orbital e spin dos elétrons. Coletivamente, esses momentos podem indicar o comportamento magnético do material. Isto é, a partir da interação entre os momentos magnéticos podemos definir diferentes fases magnéticas que os materiais obedecem. Dentre as principais fases magnéticas convencionais que abordaremos nesta seção estão a fase FM, AF e paramagnética (PM). Aqui apresentamos as distinções entre as fases e os parâmetros de ordem usados para caracterizar cada fase.

As fases magnéticas podem ser compreendidas considerando um modelo no qual os momentos magnéticos (spins) estão dispostos em sítios de uma rede cristalina de um sólido. A orientação coletiva dos momentos magnéticos que compõe a rede cristalina pode indicar o comportamento magnético do material.

A interação entre os momentos magnéticos que compõe a rede é diretamente proporcional a um parâmetro J denominado de interação de troca. A interação de troca tem origem Coulombiana, que surge devido à interação elétron-elétron causada pela sobreposição das funções

de onda dos átomos que compõem a rede cristalina [25]. Em outras palavras a interação de troca surge como consequência do princípio de exclusão de Pauli, pois, se considerarmos que dois elétrons possuem spins alinhados antiparalelamente (paralelamente), logo podem ocupar o mesmo orbital (devem ocupar orbitais diferentes) e isto traz como consequência a sobreposição das funções de ondas associadas a estes dois elétrons, intensificando (diminuindo) a repulsão eletrostática entre os dois elétrons [25]. Deste modo o tipo de ordenamento que os spins de uma rede possuem está intimamente ligado ao valor de J .

2.1.1 Ferromagnetismo

No estado ferromagnético, as interações entre os momento magnéticos favorecem o alinhamento paralelo deles, levando a uma ordem de longo alcance. Esse estado pode ocorrer em baixas temperaturas, onde os momentos magnéticos congelam em uma única direção e mesmo sentido, conforme é ilustrado na figura 2.1 (a).

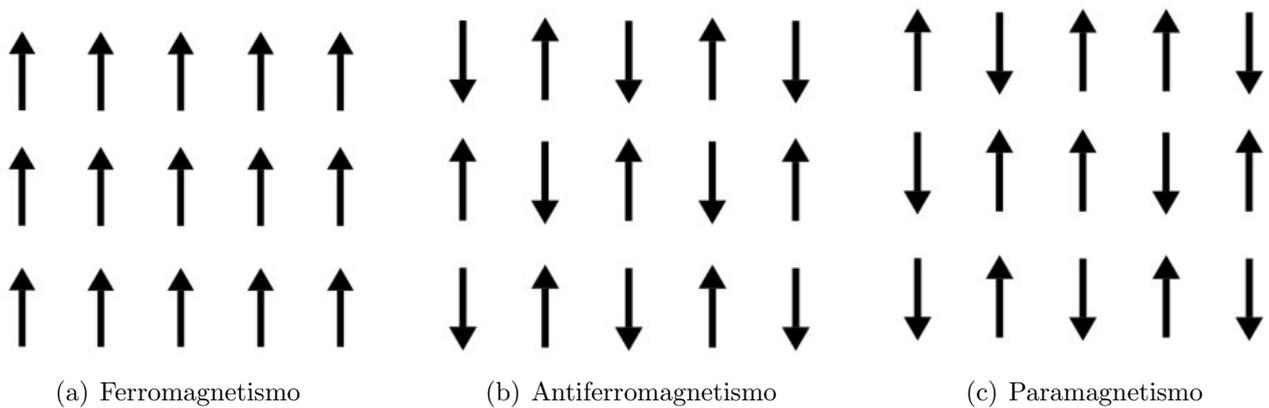


Figura 2.1: Descrição esquemática das fases ferromagnética (a), antiferromagnética (b) e paramagnética (c). As setas indicam o momento magnético de spin.

A fase FM pode ser caracterizada pelo parâmetro de ordem magnetização m , que é uma grandeza física macroscópica definida pela soma dos momentos magnéticos associados a cada spin [26].

Como ilustração, a figura 2.2 exibe o gráfico da magnetização espontânea de dois materiais ferromagnéticos: Fe e Fe_3O_4 . Observe que no regime de altas temperaturas, esses materiais não possuem magnetização espontânea $m = 0$, indicando que os spins apontam em direções aleatórias arbitrárias, dando origem a um estado desordenado denominado paramagnético (ver figura 2.1 c)). Já abaixo de uma certa temperatura denominada temperatura de Curie T_c , os momentos magnéticos apresentam um ordenamento, se alinhando na mesma direção e sentido,

que é caracterizado por $m \neq 0$. A temperatura T_c indica a temperatura de transição para a fase ferromagnética. Além disso, para o estado ordenado (FM), mesmo sem presença de campo magnético atuando no material ferromagnético temos uma magnetização não-nula ($m \neq 0$).

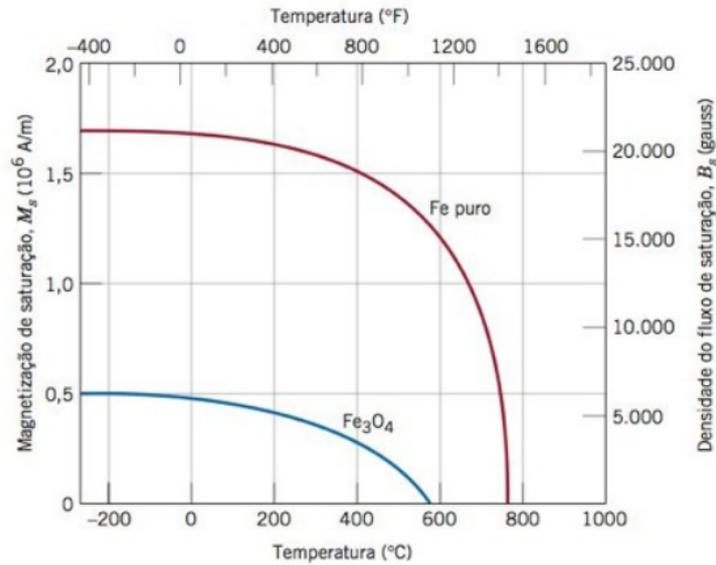


Figura 2.2: Análise da magnetização dos materiais ferromagnéticos Fe e Fe_3O_4 [27].

Outra grandeza termodinâmica relevante para caracterização das fases magnéticas é a suscetibilidade magnética. Esta é uma medida quantitativa da capacidade que um material possui de magnetizar-se sob a ação de um campo externo. A figura 2.3 ilustra o comportamento típico da suscetibilidade magnética (χ) de um ferromagneto. Ela mostra a dependência de χ com a temperatura, onde $T/T_c = 1$ indica quando ocorre a transição de fase FM para PM. Perceba que para $T < T_c$ a suscetibilidade é positiva e crescente com a temperatura, no entanto para $T > T_c$ a suscetibilidade passa a ser decrescente com a temperatura. Sistemas FM quando submetidos a altas temperaturas apresentam ausência de ordenamento. Assim, um material ferromagneto submetido a altas temperaturas perde a magnetização espontânea e a passa a ter características de um PM, por isso a suscetibilidade diminui drasticamente acima de T_c . É importante ressaltar que χ apresenta uma divergência na temperatura T_c .

Para efeito de melhor visualização a respeito das transições de fase observemos a figura 2.4, que ilustra o diagrama de fase para um ferromagneto, que é obtido submetendo um material ferromagnético a um campo externo ou a uma variação de temperatura. Note que a figura 2.4 a) apresenta o gráfico do campo magnético versus a temperatura, onde para $H = 0$ e $T \leq T_c$ temos uma linha de coexistência e isto indica que a magnetização é energeticamente equivalente em qualquer direção. Já o gráfico c) em 2.4 ilustra o comportamento da magnetização em função

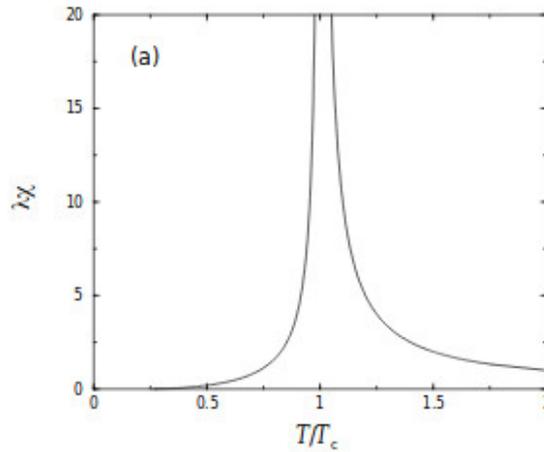


Figura 2.3: Análise da suscetibilidade magnética em função da temperatura [27].

da temperatura, perceba que a partir da temperatura T_c o material deixar de exibir suas características de ferromagneto, passando a se comportar como paramagnético conforme já foi discutido. Note ainda que na figura 2.4 em c) é exibido duas curvas de magnetização, onde a primeira exibe valores positivos abaixo de T_c , enquanto a outra exibe valores negativos para a magnetização abaixo de T_c , são exibidos duas curvas pois na região abaixo de T_c temos direções para magnetização energeticamente equivalentes. Na figura d) ilustramos o comportamento da magnetização quando há campo externo, ou seja é avaliado a magnetização em função do campo externo não nulo. Observe que na figura 2.4 c) é exibido três curvas que revelam como é a dependência da magnetização em função de um campo externo para três regiões de temperatura: Para temperaturas abaixo de T_c , quando a temperatura assume o valor T_c e para temperaturas acima de T_c . Já o gráfico b) ilustra o diagrama de fase que é construído a partir da junção dos três gráficos a), c) e d), onde o gráfico resume o comportamento de um ferromagneto quanto a magnetização dependente do campo magnético externo e da temperatura.

2.1.2 Antiferromagnetismo

No estado antiferromagnético, as interações entre os momento magnéticos favorecem o alinhamento antiparalelo dos spins que são primeiros vizinhos. Ou seja, o alinhamento dos spins são em direções opostas aos seus primeiros vizinhos. A figura 2.1 b) apresenta uma possível configuração para o ordenamento dos momentos magnéticos na fase AF.

Devido ao alinhamento antiparalelo dos momento magnético no estado antiferromagnético temos a ausência de magnetização espontânea ($m = 0$), o que torna a magnetização um

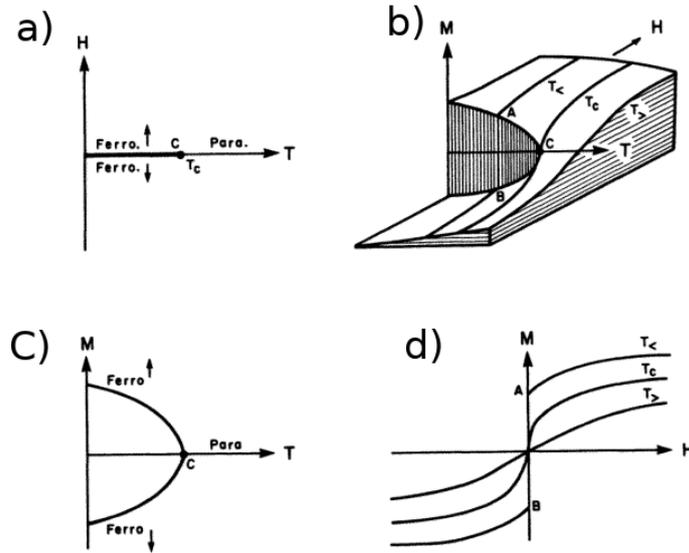


Figura 2.4: Diagramas de fase de um ferromagneto. A figura a) ilustra a linha de coexistência para $T \leq T_c$ e $H = 0$, onde a magnetização é energeticamente equivalente em qualquer direção. A figura c) é ilustrado o comportamento da magnetização em função da temperatura para os estados energeticamente equivalente. A figura d) ilustra o comportamento da magnetização em função de um campo externo. E na figura b) ilustra o comportamento da magnetização em função de um campo externo e da temperatura simultaneamente [28].

parâmetro de ordem inadequado para a caracterização desta fase. Para contornar esse problema e ter um parâmetro de ordem que caracteriza a fase AF, utilizamos um artifício matemático. Dividimos os spins da rede antiferromagnética em duas sub-redes, nas quais podemos identificar cada sub-rede de spins alinhada em uma mesma direção e sentido. Esta divisão dos spins do sistema em sub-redes interpenetradas permite definir um parâmetro de ordem não-nulo na fase AF, que pode ser dado pela diferença entre as magnetizações das sub-redes.

Na seção anterior vimos que materiais ferromagnéticos acima da temperatura de Curie (T_c) deixam de ser ferromagnético e passam a ser paramagnético. De modo análogo, materiais antiferromagnéticos submetidos a temperaturas acima da temperatura de Néel (T_N), deixam de exibir o comportamento característico de antiferromagnéticos, sendo afetado pela temperatura e se tornar um paramagnético.

A figura 2.5 possibilita a análise do comportamento da suscetibilidade magnética do antiferromagneto Cromo, onde T_N indica quando ocorre a transição de fase do antiferromagnetismo para o paramagnetismo. Diferente da transição de fase FM para PM a transição AF para PM mostra que existe uma temperatura T_N em que as curvas AF e PM coincidem. A constante θ determina a intensidade das interações entre os momentos de dipolo. Além disso, a constante θ é negativa para materiais que sofrem a transição do estado PM para o estado AF . É importante

ressaltar que a constante θ não deve ser confundida com a temperatura de Néel (T_N).

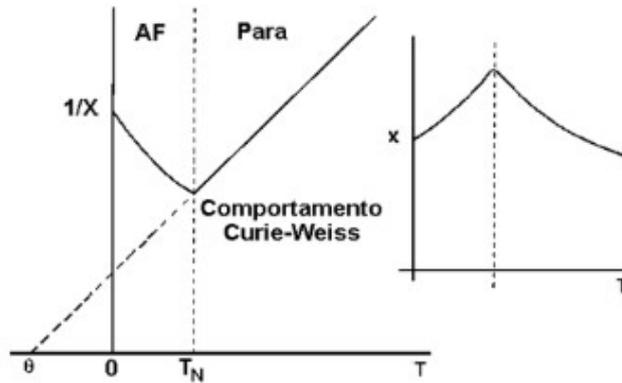


Figura 2.5: Análise da suscetibilidade magnética do antiferromagneto Cromo [27].

2.2 Frustração

A frustração no magnetismo refere-se a um cenário competitivo, em que interações de troca concorrentes levam os momentos magnéticos a uma situação conflitante [29], impossibilitando que o sistema magnético atenda todas as interações entre os momentos magnéticos de uma rede simultaneamente. Isso pode conduzir o sistema a um estado fundamental multidegenerado, apresentando vários mínimos de energia [30].

Os tipos de frustração que trataremos nesta seção são: Frustração Geométrica (Oriunda da geometria da rede) e frustração gerada a partir da desordem.

Para ilustrar o conceito de frustração a figura 2.6 mostra uma plaqueta triangular com interações antiferromagnéticas entre os spins. Nessa figura, percebemos que não é possível satisfazer as três interações ao mesmo tempo, pois um dos spins da plaqueta não conseguirá atender simultaneamente as duas interações com os outros spins. Por exemplo, na figura 2.6 o spin da direita da plaqueta triangular não obedece as duas interações de seus vizinhos mais próximos simultaneamente. Na interação com spin da base da plaqueta triangular do lado esquerdo, o spin da direita deveria ter orientação vertical para cima. No entanto, na interação com o spin do topo da plaqueta triangular, o spin da direita deveria apontar para baixo. Como as duas situações são igualmente prováveis temos o que chamamos de frustração. Nesse caso, a frustração vem da geometria da rede (triangular) com interações AF, sendo chamada de frustração geométrica.

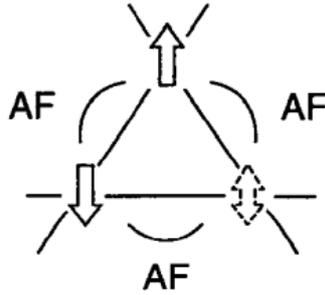


Figura 2.6: Representação esquemática de uma plaqueta triangular com interações AF. De acordo com as interações adotadas o spin do lado direito pertencente a base da plaqueta triangular não consegue atender simultaneamente as interações com os outros dois spin pertencentes a mesma plaqueta triangular, já que para cada interação o spin da base do lado direito deveria ter uma orientação diferente e como as duas situações são igualmente prováveis, tem-se a rede frustrada geometricamente [5].

Na figura 2.7 apresentamos uma plaqueta quadrada de uma rede, onde os spins de Ising estão dispostos. Nessa plaqueta, interações FM e AF foram escolhidas de modo aleatório, de maneira que três interações são AF e uma FM. Nesse caso, percebe-se que não é possível satisfazer todas as interações simultaneamente. Ou seja, o spin do topo do lado direito não consegue atender ao mesmo tempo as interações AF e FM as quais é submetido, pois para cada situação temos uma orientação diferente que este spin pode assumir e como cada interação é igualmente provável, a plaqueta torna-se frustrada, cuja frustração é denominada frustração gerada a partir da desordem.

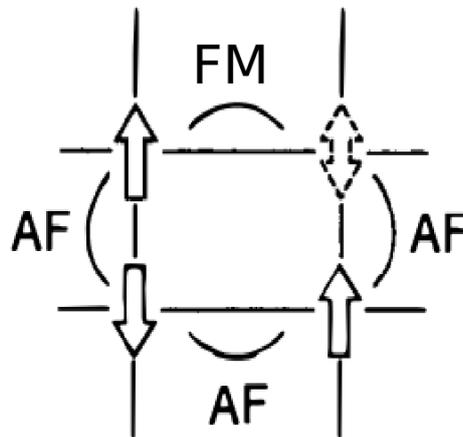


Figura 2.7: Representação esquemática de uma plaqueta quadrada com três interações AF e uma interação FM, conforme é apresentado na figura. Perceba que o spin do topo do lado direito não consegue atender simultaneamente as interações AF e FM as quais é submetido, pois para cada situação temos uma orientação diferente que este spin pode assumir e como cada interação é igualmente provável, a plaqueta torna-se frustrada, cuja frustração é denominada frustração gerada a partir da desordem. Adaptada de [5].

Para formalizarmos o conceito de frustração com maior rigor, adotamos a seguinte linha de raciocínio. Em um ciclo fechado dizemos que um sistema é frustrado quando o sinal do produto dos acoplamentos em torno de uma plaqueta numa rede é negativo, onde as ligações podem tomar os valores das interações de troca iguais a $J_{FM} = J_0$ para interações ferromagnéticas ou $J_{AF} = -J_0$ para interações antiferromagnéticas, com $J_0 > 0$ [31]. E isto quer dizer que não há configuração dos spins que satisfaçam todas as ligações simultaneamente. De outra forma, um ciclo é dito frustrado se:

$$\phi = \prod_{(i,j)} J_{i,j} < 0, \quad (2.1)$$

onde $J_{i,j}$ são as interações de troca entre os spins que são primeiros vizinhos, os quais pertencem a um ciclo fechado.

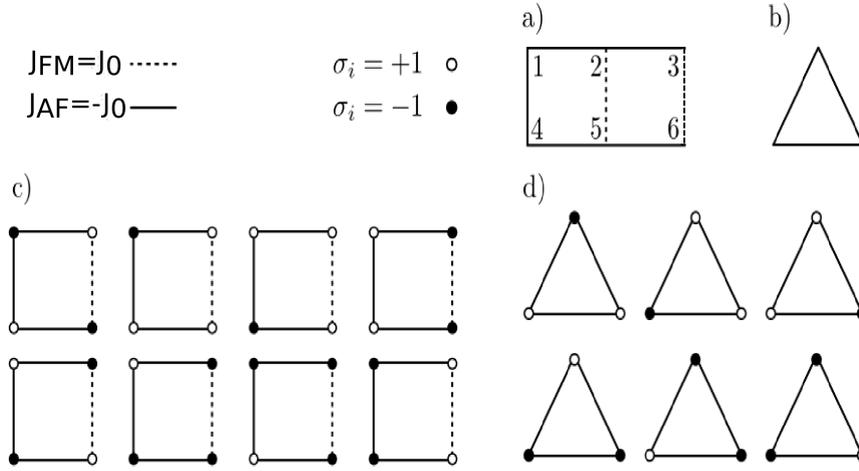


Figura 2.8: Descrição esquemática de sistemas que contém ciclos de interações frustrados. As linhas sólidas representam as interações AF e as linhas tracejadas representam as interações FM. Os círculos pretos (brancos) representam spins de Ising que podem assumir o valor -1 ($+1$). A figura a) ilustra uma rede retangular, a qual é dividida em duas plaquetas quadradas 1–2–5–4 e 2–3–6–5 respectivamente, onde a plaqueta 1–2–5–4 possui três interações AF entre spins primeiros vizinhos e uma interação FM entre spins primeiros vizinhos, já a plaqueta 2–3–6–5 possui duas interações AF entre spins primeiros vizinhos e duas interações FM entre spins primeiros vizinhos. A figura b) ilustra uma plaqueta triangular com apenas interações AF entre spins primeiros vizinhos. A figura c) ilustra as configurações possíveis para os spins da plaqueta quadrada frustrada no estado de menor energia ($E_0 = 2J_0$). Já a figura d) ilustra as configurações possíveis para a plaqueta triangular frustrada no estado de menor energia ($E_0 = J_0$). Adaptada de [15].

Na figura 2.8 ilustramos alguns ciclos frustrados. As linhas sólidas indicam as interações AF e as linhas tracejadas indicam as interações FM. Os círculos branco e preto representam os spin de Ising iguais a 1 e -1 respectivamente. Em 2.8 a) temos uma rede retangular 1-2-3-4-5-6,

a qual dividimos em dois ciclos 1-2-5-4 e 2-3-6-5. Note que o ciclo 1-2-5-4 é frustrado já que:

$$\phi = \prod_{(i,j)} J_{(i,j)} = J_{1,2}J_{2,5}J_{5,4}J_{4,1} = (-J_0)J_0(-J_0)(-J_0) = -J_0^4 < 0 \quad (2.2)$$

onde $J_0 > 0$. Agora o ciclo 2-3-5-6 ilustra um ciclo não frustrado, pois:

$$\phi = \prod_{(i,j)} J_{(i,j)} = J_{2,3}J_{3,6}J_{6,5}J_{5,2} = (-J_0)J_0(-J_0)J_0 = J_0^4 > 0. \quad (2.3)$$

Em 2.8 b) temos uma plaqueta triangular frustrada, pois pela equação 2.1 temos que

$$\phi = \prod_{(i,j)} J_{(i,j)} = J_{AF}J_{AF}J_{AF} = (-J_0)(-J_0)(-J_0) = -J_0^3 < 0. \quad (2.4)$$

As figuras 2.8 c) e d) ilustram as configurações possíveis das plaquetas 1-2-5-4 e da plaqueta triangular de forma a satisfazer a condição de menor autovalor de energia acessível do sistema. Para os 16 (9) estados distintos acessíveis para a plaqueta 1-2-5-4 (triangular), temos apenas oito (seis) estados distintos possíveis para a plaqueta 1-2-5-4 (triangular) com valor mínimo de energia de $E_0 = -2J_0$ ($E_0 = -J_0$). Isso ilustra a alta degenerescência gerada na presença de frustração.

As redes kagomé e pirocloro são outros exemplos de redes altamente frustradas, com interações AF. Sistemas com alta frustração geométrica, favorecem a degenerescência de um sistema magnético. As figuras 1.1 b) e c) ilustram a estrutura de rede kagomé e pirocloro. Nestas redes as interações antiferromagnéticas entre primeiros vizinhos tornam-se frustradas, não sendo possível atender todas as interações simultaneamente.

Pirocloros cúbicos podem ser pensados em termos de momentos magnéticos que decoram uma rede tridimensional de tetraedros que compartilham cantos. Em geral, as redes cristalinas que suportam a frustração geométrica podem ser vistas como sendo constituídas por triângulos de borda ou de compartilhamento de cantos, em duas dimensões ou tetraedros de divisão de cantos ou de arestas em três dimensões [32]. É claro que todos os materiais reais são tridimensionais, portanto, os magnetos geometricamente frustrados, baseados na rede triangular ou na divisão de cantos devem ser feitos de um empilhamento tridimensional dessas redes bidimensionais [32].

Ao resfriarmos os materiais magnéticos convencionais, estes perdem parte considerável de

sua entropia na região próxima de $T_N \sim |\theta_{CW}|$, onde θ_{CW} é denominada temperatura de Weiss. Para melhor compreensão dos efeitos da frustração em um sistema magnético é conveniente quantificar a frustração, para isto utilizamos o fator de frustração f dado por $f = \frac{|\theta_{CW}|}{T_N}$ [5]. Deste modo, quanto maior o fator f , mais frustrado o sistema. A figura 2.9 exhibe o comportamento do inverso da suscetibilidade magnética para dois materiais com interações AF ao longo de sua rede, um sem frustração (Rede quadrada com interações AF) e outro com frustração oriunda da geometria da rede com interações AF numa rede kagomé [5]. Note que para o sis-

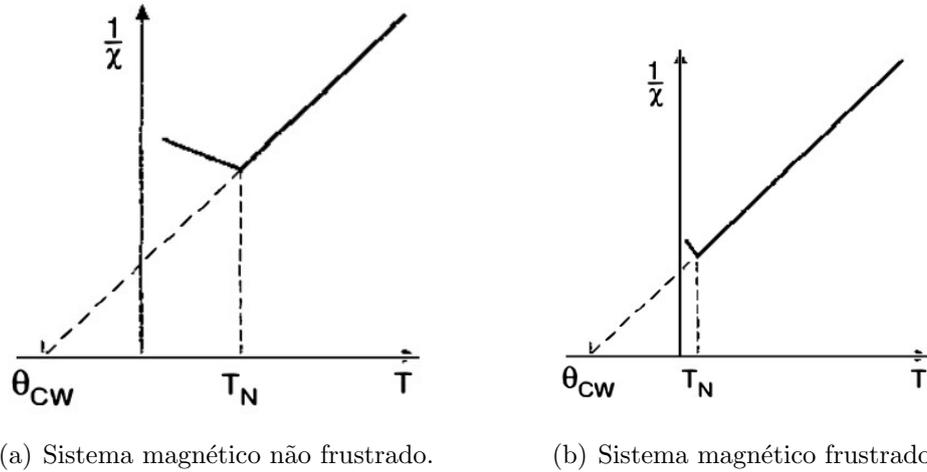


Figura 2.9: Análise do inverso da suscetibilidade magnética em função da temperatura para um sistema magnético AF não frustrado (a) e um sistema magnético com interações AF frustrado (b). Note que θ_{CW} é denominada temperatura de Curie Weiss e T_N é a temperatura que indica o instante da transição de fases AF para PM (Ou vice versa). A temperatura de Curie é obtida extrapolando a curva que representa a fase PM [5].

tema AF não frustrado temos que $T_N \sim |\theta_{CW}|$, isto é $f \cong 1$. No entanto para a rede frustrada AF temos que T_N é inferior a $|\theta_{CW}|$ e neste caso $f \gg 1$. A frustração pode conduzir o sistema magnético para temperaturas críticas mais baixas e do ponto de vista microscópico a frustração também pode suprimir a ordem magnética de longo alcance [6].

A compreensão do conceito de frustração torna-se mais relevante quando percebe-se que a frustração introduzida por desordem é um dos ingredientes para a fase Vidro de Spin (VS), onde esta possui um comportamento bem distinto das fases magnéticas convencionais. Como veremos na próxima seção para obtermos a fase VS deve haver competição entre as diferentes interações entre os momentos, no sentido de que nenhuma configuração única dos spins é exclusivamente favorecida por todas as interações, e essas interações devem ser pelo menos parcialmente aleatórias [4]. Isso sugere que o estado VS é diferente das formas convencionais de ordem e por isso existe uma necessidade de novas abordagens para descrevê-lo [4]. Na próxima

seção e no próximo capítulo abordaremos com maiores detalhes os aspectos experimentais e teóricos envolvendo a fase vidro de spin.

Em sistemas altamente degenerados, a fase VS pode aparecer mesmo para pequenas quantidades de desordem. A fase VS é observada no pirocloro $Y_2Mo_2O_7$ para o qual a desordem é estimada ser da ordem de 5% [10]. Observe ainda que esta rede pirocloro devido a geometria de sua rede possui também frustração geométrica, considerando as interações AF entre os spins primeiros vizinhos.

Para tratar um problema com frustração geométrica, podemos considerar a rede pirocloro com interações AF ou plaquetas triangulares com interações AF, conforme já foi discutido. Porém nestas redes não é possível controlar a magnitude da frustração. Um exemplo de rede bidimensional que é possível controlar a intensidade de frustração geométrica é a rede quadrada com interações AF, entre spins primeiros e segundos vizinhos. E como já foi discutido, podemos analisar os efeitos da frustração geométrica na rede Pirocloro, através da análise de seu caso análogo bidimensional, a rede “checkerboard”. Esta última é uma rede quadrada com interações entre spins primeiros e segundos vizinhos. Nesta rede podemos explorar efeitos de máxima frustração, quando a interações entre spins primeiros e segundos vizinhos possuem mesma magnitude. Observe a figura 2.10 que ilustra interações AF entre primeiros e segundos vizinhos numa plaqueta quadrada. Perceba que ao considerar apenas as interações J_1 entre primeiros vizinhos as mesmas são satisfeitas simultaneamente, porém quando a interação de troca J_2 entre spins segundos vizinho não é desprezível a rede fica frustrada. Pois, de acordo com as interações de primeiros vizinhos, o spin do topo da plaqueta do lado direito deveria apontar para baixo, porém de acordo com interação com o spin do lado esquerdo inferior, o spin do topo do lado direito deveria apontar para cima, assim o sistema magnético fica impossibilitado de atender todas as interações entre os momentos magnéticos simultaneamente.

A vantagem de abordar a rede Checkerboard, com interações AF entre primeiros e segundos vizinhos é que podemos inserir e retirar a frustração, além de controlar a magnitude da frustração. Quando desejarmos um sistema sem frustração, basta considerar $J_2 = 0$, ou caso desejemos que as interações privilegiadas sejam as interações entre os spins primeiros vizinhos consideramos $\frac{J_2}{J_1} < 1$, caso contrário consideramos $\frac{J_2}{J_1} > 1$. O estado fundamental é ordenado quando $\frac{J_2}{J_1} < 1.0$, onde os spins ficam alinhados antiparalelamente, isto é, as linhas e colunas da plaqueta quadrada interagem antiferromagneticamente. Assim, considerar $\frac{J_2}{J_1} < 1.0$ é analisar a situação em que há interações entre os spins primeiros vizinhos e interações entre os spins

segundos vizinhos, porém as interações entre os spins primeiros vizinhos são mais intensas e por isso os spins permanecem alinhados antiferromagneticamente. Quando $\frac{J_2}{J_1} = 1$ o sistema é altamente degenerado [12], pois neste caso as interações entre spins primeiros vizinhos possuem mesma intensidade que as interações entre spins segundos vizinhos, logo, o sistema fica em conflito nesta situação, já que não há uma orientação privilegiada para os spins. Assim, vemos que a frustração na plaqueta quadrada é resultado da competição entre as interações de primeiros e segundos vizinhos.

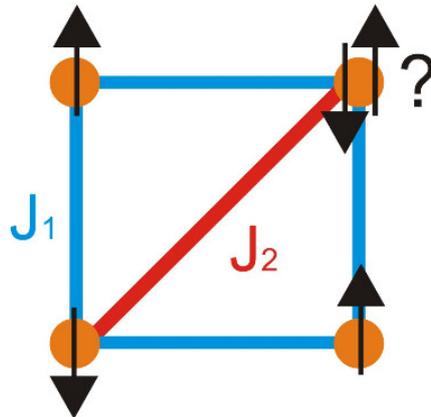


Figura 2.10: Plaqueta quadrada com interações AF entre primeiros e segundos vizinhos [33].

Devido a vantagem de se estudar sistemas magnéticos que possibilitem controlar a frustração apresentaremos um modelo no final deste capítulo que descreve um sistema magnético nessas condições e que também apresenta desordem.

2.3 Fase Vidro de Spin

A fase Vidro de Spin (VS) é caracterizada pelo congelamento aleatório dos momentos magnéticos abaixo de uma temperatura T_f [4]. Na figura 2.11 pode ser observada uma possível configuração deste congelamento aleatório dos momentos magnéticos na fase VS.

A fase VS pode ocorrer em sistemas magnéticos desordenados quando há uma combinação de desordem e frustração, ou seja, quando a desordem leva à frustração. Isto quer dizer que a fase VS requer frustração e desordem. Mais especificamente, a frustração tem sua origem relacionada às interações entre os diferentes momentos magnéticos de uma rede, alternando aleatoriamente interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas, e não havendo possibilidade de uma única configuração ser favorecida para obter o estado de menor energia, originando-se assim a frustração [4].

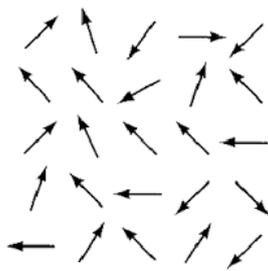


Figura 2.11: Representação esquemática da fase VS. as setas indicam os momentos magnéticos congelados abaixo de um temperatura T_f [5].

Deste modo a fase VS é identificada em uma coleção de spins (ou seja, momentos magnéticos), quando os mesmos possuem uma desordem congelada no estado de baixa temperatura, ao invés do tipo padrão uniforme ou periódico que estamos acostumados a encontrar em magnetos convencionais, como ferromagnético e antiferromagnético [34]. Para explicitar ainda mais o comportamento VS, faremos um comparativo entre as fases convencionais e a fase VS. Na fase paramagnética os spins não obedecem uma invariância temporal, isto é, a fase paramagnética também apresenta momentos magnéticos em direções aleatórias, porém, se fosse possível tirar fotografias em instantes diferentes de tempo da fase paramagnética, obteríamos imagens distintas, e os spins ainda estariam em direções aleatórias. Já na fase VS, a mesma obedece uma invariância temporal e novamente se fosse possível registrar fotografias em instantes de tempo diferentes, obteríamos imagens idênticas e os spins ainda estariam em direções aleatórias. Além disso, a fase vidro de spin não apresenta ordem de longo-alcance, e isto é também uma das diferenças entre as fases ferromagnética ou antiferromagnética para a fase VS.

Experimentalmente a fase VS apresenta algumas distinções das fases convencionais, uma destas características é constatada no gráfico da suscetibilidade magnética χ em função da temperatura, como mostra a figura 2.12 que exhibe a curva de χ com um pico agudo. Além disso, conforme diminuimos a frequência do campo aplicado este pico pode ser deslocado para temperaturas ainda mais baixas, ou seja, existe uma dependência da localização da cúspide com a frequência ω do campo aplicado. Materiais antiferromagnetos, também exibem um pico agudo no gráfico da suscetibilidade magnética em função da temperatura, porém a localização do pico para materiais AF não dependem da frequência do campo aplicado. Isto é, o pico não é deslocado quando ocorre variação da frequência do campo aplicado em materiais AF. Pela análise do detalhe do gráfico 2.12 de um sistema com comportamento VS, percebe-se que a localização da cúspide na suscetibilidade em função da temperatura depende da frequência

¹A medida da suscetibilidade feita indutivamente, utilizando campos alternados

do campo aplicado. Na condição de frequências baixas ($\omega \rightarrow 0$), esse cuspide é usada para localizar a temperatura T_f . Vale observar que o deslocamento da cuspide para variações de frequências esta estritamente relacionado com a alta degenerescência que um sistema possui quando encontra-se num regime frustrado [4].

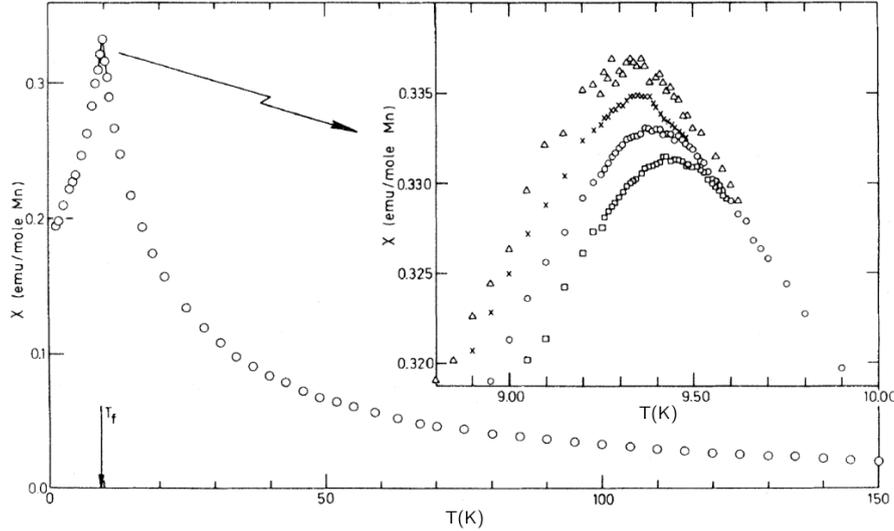


Figura 2.12: Suscetibilidade χ em função da temperatura T do $Cu - 0,94\%Mn$ medida nas frequências: \square , $1,22kHz$; \circ , $2,34kHz$; \times , $10,4Hz$ e \triangle , $2,6Hz$ [34].

Outro efeito observado na fase VS é a irreversibilidade da magnetização, este efeito é ilustrado na figura 2.13, a qual mostra a magnetização em função da temperatura para a liga $AgMn$ (0,26%) [34]. A figura ilustra duas maneiras distintas de resfriar a liga $AgMn$. A primeira maneira, a liga pode ser resfriada a campo nulo, etapa indicada pelo caminho $1 \rightarrow 2$, onde a liga inicialmente em uma temperatura $T > T_f$ tem a sua temperatura reduzida a $T \ll T_f$, em seguida é aplicado um campo dc^2 relativamente baixo, essa etapa indicada pelo caminho $2 \rightarrow 3$, e então a temperatura é elevada, completando o ciclo ZFC³ $3 \rightarrow 4 \rightarrow 5$. Agora, se reduzirmos novamente a temperatura mantendo um campo externo o caminho seguido é $5 \rightarrow 4 \rightarrow 6$ (FC)⁴ e se aumentarmos novamente a temperatura o caminho percorrido é $6 \rightarrow 4 \rightarrow 5$. Note que a etapa $3 \rightarrow 4$ é irreversível, sendo impossível resfriar o sistema segundo pelo caminho $4 \rightarrow 3$, ou seja a partir do ponto 4, ela segue imediatamente o caminho $4 \rightarrow 6$.

Esta irreversibilidade também pode ser analisada na susceptibilidade magnética no estado VS apresentada na figura 2.14, que exhibe a dependência da susceptibilidade do material $Ba_3TiRu_2O_9$

²Campo magnético estático

³Sigla inglesa para “zero field cooled”

⁴Sigla inglesa para “field cooled”

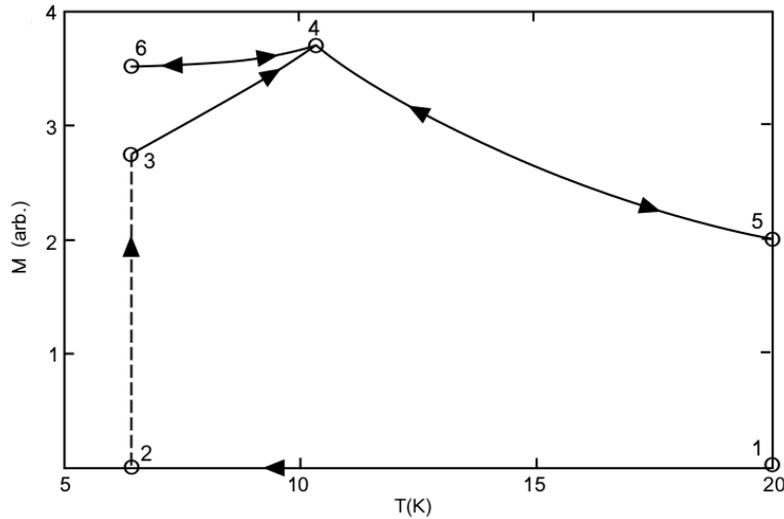


Figura 2.13: Magnetização M em função da temperatura T , para a liga $AgMn$ (0,26%) [34].

com a temperatura, para um campo dc aplicado. No detalhe da figura 2.14 são apresentadas dois processos de obtenção da susceptibilidade: num processo ZFC com um campo magnético externo muito pequeno de $\ll 0,05Oe$ e outro FC com campo aplicado de $H = 30Oe$. Note que o processo ZFC é irreversível, já que o mesmo processo não pode ser repetido quando é aplicado um campo externo mais intenso e o processo FC é reversível [9].

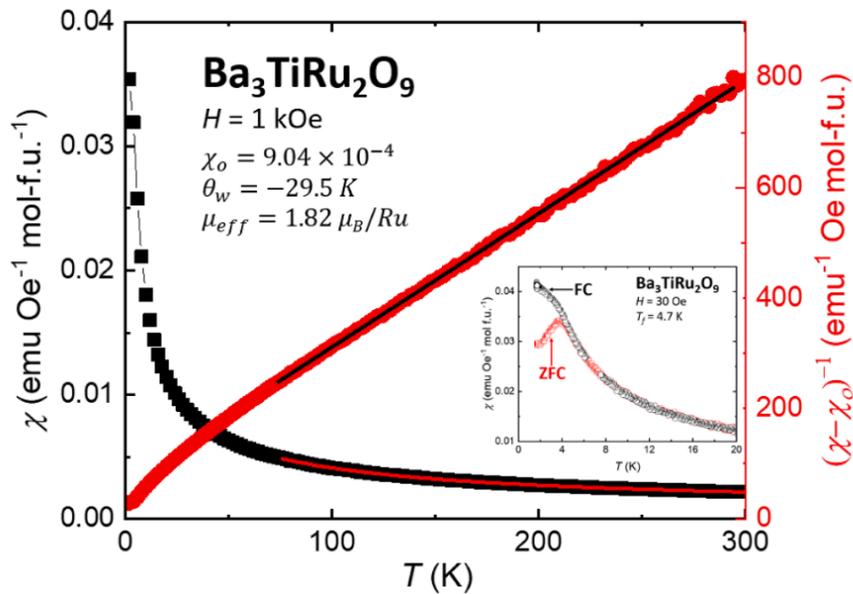


Figura 2.14: Susceptibilidade χ em função da temperatura T para o composto $Ba_3TiRu_2O_9$ (0,26%) [9].

Outra quantidade termodinâmica que distingue a fase VS das fases convencionais é o calor específico, pois no gráfico do calor específico em função da temperatura, o mesmo apresenta um máximo arredondado acima da temperatura de congelamento T_f . Para ilustrar o compor-

tamento do calor específico para a fase VS, apresentamos a figura 2.15 que mostra o gráfico do calor específico em função da temperatura para o material $CuMn$. Também é possível, observar que, o aumento do campo magnético externo implica no aumento a largura do máximo arredondado.

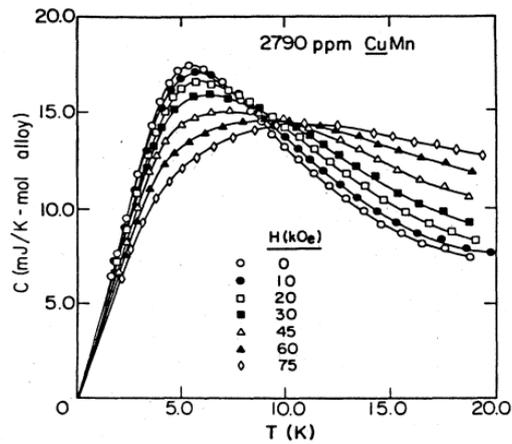


Figura 2.15: Gráfico do calor específico C em função da temperatura T em função da temperatura para o composto $CuMn$ com 2,79% de Mn [4].

Capítulo 3

Estudo Teórico de Sistemas Magnéticos

Têm sido propostos modelos que visam uma melhor compreensão da fase Vidro de Spin desde as primeiras descobertas experimentais do comportamento não convencional dessa fase VS. Um modelo considerado um dos mais relevantes na literatura foi proposto por Edwards e Anderson [15]. Nesse, ao invés de considerar a aleatoriedade nas posições dos momentos magnéticos, é considerado a aleatoriedade nas interações de troca de spins localizados nos sítios de uma rede regular [4]. Apesar do modelo de Edwards e Anderson apresentar uma nova interpretação para descrição da fase VS, adotando réplicas, foi somente em 1975 que Sherrington e Kirkpatrick (SK) apresentaram uma versão solúvel deste modelo, para isto consideraram interações desordenadas de alcance infinito entre os momentos magnéticos [35]. Porém, o resultado obtido no modelo SK apresentou algumas inconsistências, tais como entropia negativa, que se deve ao uso da aproximação com simetria de réplicas [4]. O modelo proposto por Edwards e Anderson continua sem solução analítica até hoje, e mesmo simulações computacionais para este modelo mostraram-se ineficientes, apresentando vários problemas na realização dos cálculos numéricos, tais como tratar todas as interações existentes na rede [4]. Deste modo percebe-se que mesmo o modelo SK apresentando algumas inconsistências de acordo com os resultados experimentais, este merece destaque e teve grande relevância, pois propôs uma versão de campo médio para o modelo de Edwards e Anderson, na qual a interação entre primeiros vizinhos é estendida para uma interação de alcance infinito, evidentemente escalada adequadamente com o tamanho do sistema de tal modo que possa ser garantido o limite termodinâmico [4, 35]. Uma abordagem com clusters de spins foi adotado para descrever sistemas com VS [36]. Esse considera interações desordenadas somente entre momentos magnéticos de clusters ao invés de todos os spins da rede interagirem entre si desordenadamente como foi proposto inicialmente no modelo

SK [36]. Esta nova abordagem sugerida por Soukolis possibilitou uma melhora dos resultados teóricos, por exemplo apresentou um resultado mais satisfatório para o calor específico. Além disso a abordagem com clusters tem sido aprimorada e melhorada em trabalhos recentes [14, 16, 24, 29] com a intenção de estudar a relação entre frustração geométrica e VS.

Neste capítulo discutimos alguns modelos e abordagens teóricas para descrição de sistemas magnéticos. Iniciamos nossa discussão, destacando como a mecânica estatística estabelece uma conexão com a termodinâmica, e como se obtém as informações do sistema, tais como suscetibilidade magnética, magnetização e calor específico.

Também apresentamos de forma sucinta o modelo de Ising, um dos mais simples para descrição de sistemas magnéticos convencionais, mas não trivial. Por fim, apresentamos uma breve descrição dos modelos teóricos para sistemas desordenados e discutimos uma abordagem que inclui em seu tratamento a frustração geométrica.

3.1 Tratamento Estatístico

A compreensão de fenômenos em escala macroscópica exige de certo modo um vislumbre do mundo microscópico. Neste sentido, a Mecânica Estatística se concentra em obter as informações termodinâmicas de sistemas com grande número de partículas. Para isto se faz necessário uma conexão entre a Termodinâmica e a Mecânica Estatística. Esta conexão acontece através dos valores médios dos observáveis¹.

Os observáveis são determinados a partir da função de distribuição de Boltzmann dada por $\exp(-\beta H_i)$, onde H_i é a energia do estado i , $\beta = \frac{1}{k_b T}$, k_b é a constante de Boltzmann, e T é temperatura. Deste modo a soma sobre os estados do sistema nos leva a função de partição canônica² $Z = Tr \exp\{-\beta H\}$.

Obtendo a função de partição do sistema, é possível determinar a energia livre de Gibbs (3.1) e a energia livre de Gibbs por partícula (3.2)

$$G = -\frac{1}{\beta} \ln Z \quad (3.1)$$

e

$$g = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{G}{N} = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{N\beta} \ln Z. \quad (3.2)$$

¹Grandezas mensuráveis experimentalmente

²do Alemão Zustandssumme

A partir da energia livre por spin é possível encontrar todas as demais grandezas termodinâmicas usadas para caracterizar as fases magnéticas.

Por exemplo, o estudo da ordem ferromagnética e obtenção da magnetização espontânea pode ser feita por meio das ferramentas apresentadas acima. Numa perspectiva microscópica, a magnetização pode ser obtida por:

$$m = \langle \sigma_i \rangle = \frac{\text{Tr} \sigma_i e^{-\beta H}}{NZ} \quad (3.3)$$

onde H é a energia do sistema e σ_i é o momento magnético do spin no sítio i da rede. Assim a magnetização do sistema é o valor médio dos momentos magnéticos dos N spins localizados nos sítios da rede. Observe ainda que $\text{Tr} \cdots e^{-\beta H} / Z$ representa a média térmica.

Além disso, a partir da energia livre de Gibbs magnética também é possível obter a magnetização:

$$m = - \left(\frac{\partial g}{\partial h} \right)_T \Big|_{h=0}, \quad (3.4)$$

onde h um campo magnético externo aplicado na direção que se busca obter a magnetização. A suscetibilidade magnética pode então ser derivada da expressão

$$\chi = - \left(\frac{\partial^2 g}{\partial h^2} \right)_T = \left(\frac{\partial m}{\partial h} \right)_T \Big|_{h=0} \quad (3.5)$$

Quando a fase antiferromagnética é considerada, a magnetização deixa de ser importante e surge o parâmetro de ordem magnetização “staggered” (magnetização das sub-redes), definida por:

$$m_s = m_\alpha - m_\gamma = \frac{2}{NZ} [\text{Tr} (\sigma_i^\alpha e^{-\beta H}) - \text{Tr} (\sigma_j^\gamma e^{-\beta H})], \quad (3.6)$$

onde σ_i^α e σ_j^γ são os spins do sítios i e j das sub-redes α e γ respectivamente.

É importante apontar que existem poucos modelos com solução analítica exata, que permitem a obtenção da função de partição, energia livre e demais grandezas termodinâmicas sem realizar nenhuma aproximação. A grande maioria dos modelos estudados ainda não possuem uma solução analítica exata, para os quais adotamos abordagens aproximativas. Assim, alguns problemas em mecânica estatística se resumem em adotar um modelo, em especial neste trabalho um modelo para sistemas magnéticos desordenados, em seguida obter a energia livre por spin usando uma abordagem aproximativa: método variacional ou teoria do campo médio. Para as aproximações consideradas neste trabalho é levado em conta o custo computacional

que cada aproximação pode exigir.

3.1.1 Modelo de Ising

Um dos modelos mais simples, mas não trivial, que permite a descrição do comportamento de sistemas magnéticos é o modelo de Ising [37], onde o hamiltoniano é dado por

$$H = -J_0 \sum_{(i,j)}^N \sigma_i \sigma_j - h \sum_i^N \sigma_i. \quad (3.7)$$

σ_i é uma variável de spin que pode assumir os valores ± 1 , nos sítios $i = 1, 2, \dots, N$ de uma rede em d dimensões, h é um campo externo que atua na direção preferencial de alinhamento dos spins. Se $J_0 > 0$ ($J_0 < 0$) o alinhamento favorecido é o FM (AF). O índice (i, j) no primeiro somatório no hamiltoniano (3.7) indica que a soma é realizada sobre os pares de sítios vizinhos mais próximos.

Resolver o modelo de Ising, significa obter a função de partição canônica e a partir desta determinar a energia livre por spin, da qual é possível determinar as demais informações termodinâmicas do sistema, tais como suscetibilidade, magnetização e calor específico.

A solução exata do modelo de Ising em uma dimensão foi obtida em 1925, mas acabou revelando resultados insatisfatórios, tais como a magnetização nula para $h = 0$, implicando que o modelo não explica a fase FM [37]. Assim a solução unidimensional não produz nenhuma magnetização espontânea e portanto não apresenta nenhum tipo de transição de fase e por isso a solução para o modelo de Ising unidimensional mostrou-se decepcionante.

Já em duas dimensões, uma solução exata foi produzida em 1944 pelo matemático Lars Onsager [37]. A solução foi para o modelo de Ising bidimensional numa rede quadrada, com interações entre primeiros vizinhos e na ausência de campo externo. Devido a simplicidade do modelo de Ising, o mesmo apresenta uma grande gama de aplicações em tratamentos estatísticos, sendo considerado um dos modelos precursores e mais relevantes no estudo de sistemas magnéticos [37].

Muitas teorias foram desenvolvidas e aprimoradas com a finalidade de implementar alguns métodos aproximativos que possibilitassem obter as soluções para o modelo de Ising e devido a simplicidade do modelo, o mesmo é um ótimo candidato para testar a eficiência dos métodos aproximativos adotados. Deste modo, métodos aproximativos foram estendidos e melhorados para sistemas magnéticos desordenados e sistemas com frustração geométrica.

3.1.2 Aproximação de Campo Médio

A teoria de campo médio (TCM) visa tratar problemas de muitos corpos interagentes, obtendo o comportamento de sistemas com um número grande de partículas. A TCM também aborda modelos estocásticos de alta complexidade. Na TCM, temos como finalidade reduzir um problema de muitos corpos para de um único corpo. Ou seja, em TCM é comum realizar aproximações, reduzindo um problema de muitos corpos tornando o problema solúvel [37].

Entre as vantagens que podemos citar sobre a TCM temos a simplicidade de sua descrição matemática e suas boas previsões em primeira aproximação de diagramas de fases [38].

3.2 Modelos para Sistemas Magnéticos Desordenados

Nesta seção apresentamos algumas das principais abordagens teóricas utilizadas para descrição da fase VS em sistemas magnéticos desordenados. Inicialmente discutimos de forma breve e sucinta a abordagem de Edwards e Anderson. Depois mostramos como Sherrington e Kirkpatrick tornaram a teoria de Edwards e Anderson analiticamente solúvel numa abordagem da campo médio, assumindo interações desordenadas de longo-alcance entre os spins de Ising [35]. Também apresentamos uma abordagem com clusters, proposta por Soukoulis e Levin, evidenciando a melhora dos resultados teóricos do calor específico em comparação com os resultados obtidos no modelo SK. E, nesta seção apresentamos uma abordagem variacional para a Teoria do Campo Médio com Clusters em dimensões finitas [24].

3.2.1 O modelo de Sherrington-Kirkpatrick

Na busca pela compreensão do comportamento magnético VS, Edwards e Anderson em 1975 propuseram um modelo, onde consideraram a aleatoriedade nas interações de troca entre os spins que compõe uma rede regular, em lugar de considerar a aleatoriedade na posição dos spins [39]. O modelo de Edwards e Anderson é dado pelo hamiltoniano

$$H = - \sum_{(i,j)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (3.8)$$

onde (i, j) indica que a soma é realizada sobre os pares de sítios primeiros vizinhos i e j da rede regular. Logo, o modelo considera apenas interações de curto alcance. As interações de troca J_{ij} são variáveis aleatórias independentes, que seguem uma distribuição de probabilidade

gaussiana dada por:

$$P(J_{ij}) = \left(\frac{1}{2\pi J^2} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{1}{2J^2} (J_{ij} - J_0)^2 \right]. \quad (3.9)$$

Este modelo além de introduzir a desordem e propor um modelo de curto alcance, também foi o primeiro a escrever em termos de parâmetros de ordem o problema da fase VS. Uma das dificuldades que esta abordagem apresenta é no cálculo da média sobre as desordens J_{ij} e para contornar este problema, Edwards e Anderson utilizaram o método das réplicas (3.15) que será explicitado ainda nesta subseção.

Na fase VS a magnetização é nula, já que não há regularidade na configuração dos spins, e na busca por um parâmetro conveniente para caracterizar a fase VS Edwards e Anderson propõe o parâmetro dado por

$$q = \langle \langle \sigma_i \rangle_T^2 \rangle_{J_{ij}}, \quad (3.10)$$

onde $\langle \dots \rangle_T$ representa uma média térmica e $\langle \dots \rangle_{J_{ij}}$ representa uma média configuracional definida por $\langle \dots \rangle_{J_{ij}} = \int dJ_{ij} P(J_{ij}) \dots$. Assim, quando $m = 0$ e $q \neq 0$ indicará o surgimento do ordenamento VS, caracterizando o congelamento aleatório dos spins.

Para melhor compreensão do significado físico deste parâmetro, vale lembrar que na fase VS as configurações dos spins na rede são invariantes no tempo t . Ou seja, se possível obter fotos de instantes de tempos distintos, os spins apresentariam configurações fortemente correlacionadas.

No modelo Sherrington-Kirkpatrick também chamado de modelo SK, consideramos um sistema com N spins de Ising, onde as interações são de alcance infinito. O Hamiltoniano do modelo SK é dado por

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i, \quad (3.11)$$

onde h é um campo externo. As interações de troca J_{ij} são representadas por variáveis aleatórias independentes, que também seguem uma distribuição de probabilidade gaussiana dada por:

$$P(J_{ij}) = \left(\frac{N}{2\pi J^2} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{N}{2J^2} \left(J_{ij} - \frac{J_0}{N} \right)^2 \right]. \quad (3.12)$$

Comparando as equações (3.9) e (3.12), podemos verificar que na distribuição gaussiana (3.12) a média (J_0) e a variância (J^2) são divididas pelo número de sítios N , pois o modelo (3.11) considera interações de troca entre todos os pares de sítios.

Como já foi discutido no capítulo anterior a desordem e a frustração são ingredientes fun-

damentais para a fase VS. A presença de desordem e frustração são garantidas através das variáveis aleatórias J_{ij} e pela distribuição de probabilidades de J_{ij} respectivamente, esta última pode assumir valores tanto positivos quanto negativos [4].

Podemos determinar a energia livre G para uma dada configuração de desordem $\{J_{ij}\}$, com a seguinte expressão:

$$G(\{J_{ij}\}) = -\frac{1}{\beta} \ln Z(\{J_{ij}\}), \quad (3.13)$$

onde $Z(\{J_{ij}\}) = \text{Tr} e^{-\beta H(\{J_{ij}\})}$ é a função de partição, $\beta = \frac{1}{k_b T}$ e k_b é a constante de Boltzmann. Como existem infinitas configurações possíveis de $\{J_{ij}\}$, realizamos uma média sobre as configurações associadas à interação de troca $\{J_{ij}\}$, afim de determinar a energia livre média. Ou seja, estimamos a energia livre para todas as configurações possíveis e em seguida determinamos a média das energias livres. Assim, a energia livre média por spin é dada por:

$$g = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \overline{G(\{J_{ij}\})} = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \overline{\ln Z(\{J_{ij}\})}, \quad (3.14)$$

onde a barra sobrescrita ($\overline{\cdot}$) denota a média sobre as desordens $\{J_{ij}\}$.

Para contornar o problema de cálculo da média sobre as desordens e poder obter a energia livre média por spin (expressão (3.14)), utilizamos o método das réplicas, onde este consiste na seguinte identidade:

$$\overline{\ln Z} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\overline{Z^n} - 1}{n} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\ln \overline{Z^n}}{n}, \quad (3.15)$$

sendo n o número de réplicas idênticas e não interagentes do sistema e Z está associada a função de partição replicada dada por:

$$Z^n = \prod_{a=1}^n Z_a = Z_1 Z_2 \dots Z_n = \text{Tr}_a \exp \left\{ -\beta \sum_{a=1}^n H_a \right\}. \quad (3.16)$$

onde a é o índice de réplica e H_a é o Hamiltoniano com subíndice de réplica na variável de spin σ .

A utilização de réplicas permitiu o cálculo da média configuracional, possibilitando obter a energia livre por spin g no modelo SK. Em resumo, a adoção do método das réplicas permitiu abordar um problema desordenado de muitos corpos interagentes através de um problema efetivo de um único corpo com réplicas interagentes. Apesar do modelo SK ser um dos pioneiros na descrição da fase VS e ter permitido a obtenção de algumas propriedades da fase VS, o mesmo apresenta uma solução instável dentro da fase VS na sua solução mais simples: solução com

simetria de réplicas.

3.2.2 O modelo de Sherrington-Kirkpatrick com clusters

Soukoulis e Levin, 1978, propuseram uma abordagem com clusters³ [36] baseado no modelo SK.

Nesta abordagem com clusters o hamiltoniano é dado por:

$$H = - \sum_{\nu < \lambda} J_{\nu\lambda} S_\nu S_\lambda - \sum_{\nu} \sum_{i < j} J_{ij}^0 \sigma_{i\nu} \sigma_{j\nu}, \quad (3.17)$$

onde $S_\nu = \sum_i \sigma_{i\nu}$ é o momento magnético total do cluster ν e $J_{\nu\lambda}$ segue uma distribuição gaussiana, dada por

$$P(J_{\nu\lambda}) = \left(\frac{1}{2\pi J^2} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{J_{\nu\lambda}^2}{2J^2} \right] \quad (3.18)$$

O primeiro termo do hamiltoniano em (3.17) descreve as interações desordenadas interclusters, enquanto que o segundo termo descreve as interações ordenadas intracluster. Neste modelo os clusters são considerados idênticos em tamanho e forma, contendo n_s spins cada.

Para determinar a energia livre usando a abordagem de Soukoulis e Levin, utilizamos um procedimento matemático análogo ao usado no modelo SK canônico, incluindo o uso de réplicas. Os resultados obtidos mostram a formação de um máximo arredondado no calor específico quando as interações intracluster são antiferromagnéticas, conforme pode ser visualizado na figura 3.1.

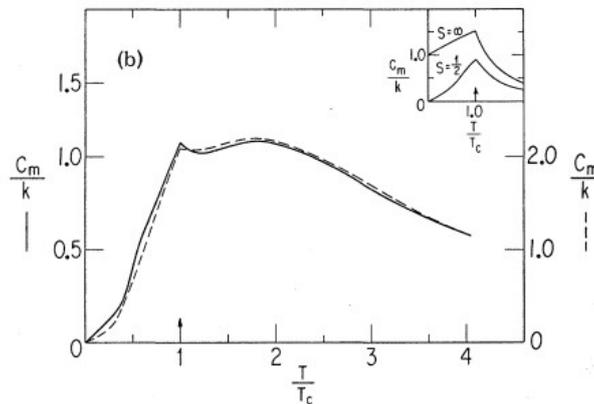


Figura 3.1: Calor específico em função da temperatura com interações AF intracluster. Linha sólida representa um cluster de $n_s = 3$ (3 spins em cada clusters) e a linha tracejada representa um cluster contendo $n_s = 6$ (6 spins em cada cluster) [36].

³São conjuntos ou aglomerados de spins, quando há uma concentração de momentos magnéticos

No detalhe da figura 3.1 pode ser verificado o comportamento do calor específico usando a teoria de campo médio do modelo SK. Note que conforme o tamanho dos clusters (n_s) aumentam o comportamento do calor específico torna-se mais sutil. Ou seja, esta abordagem com clusters para o modelo SK trouxe uma melhora significativa nos resultados teóricos para o calor específico. Além disso esta abordagem com cluster não afetou os resultados obtidos anteriormente para a suscetibilidade magnética no modelo SK, conforme pode ser visualizado na figura 3.2. No detalhe da figura 3.2 pode ser verificado o comportamento da suscetibilidade magnética obtido pelo modelo SK. É importante destacar que apesar da abordagem descrita nesta seção mostrar uma melhora dos resultados teóricos usando esta abordagem com clusters, o modelo não considera interações AF e FM de curto alcance entre clusters, se limitando a interações ordenadas (AF ou FM) apenas para spins pertencentes no mesmo cluster.

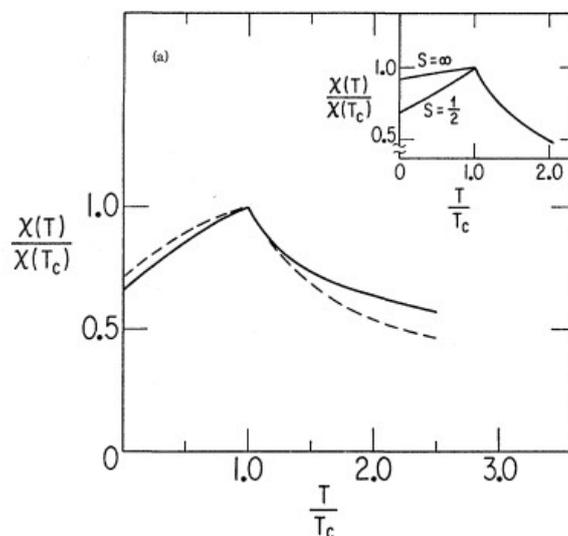


Figura 3.2: Calor específico em função da temperatura com interações AF intracluster. Linha sólida representa um cluster de $n_s = 3$ (3 spins em cada clusters) e a linha tracejada representa um cluster contendo $n_s = 6$ (6 spins em cada cluster) [36].

3.2.3 Uma Abordagem Variacional para a Teoria do Campo Médio com Clusters

A abordagem que apresentamos nesta seção está baseada na referência [24]. Nesta abordagem consideramos um modelo com spins de Ising, descrito pelo hamiltoniano:

$$H = -\frac{1}{\sqrt{2d}} \sum_{(i,j)}^N J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (3.19)$$

onde, $\sigma_i = \pm 1$ é o spin do sítio i , N é o número de spins da rede, d é dimensão da rede e o índice (...) no somatório representa a soma sobre primeiros vizinhos, com interação de troca J_{ij} , que pode ser FM, AF e/ou desordenada.

Nesta abordagem é levado em consideração a dimensão finita da rede, buscando por uma alternativa que melhore os resultados obtidos pela TCM. Para tal, dividimos a rede com N spins em N_{cl} clusters idênticos com n_σ spins cada, tal que $N = N_{cl}n_\sigma$ (ver Fig. 3.3). O hamiltoniano do sistema dividido em clusters pode então ser escrito da seguinte forma:

$$H = -\frac{1}{\sqrt{2d}} \sum_{(i_\nu, j_\nu)} J_{ij}^\nu \sigma_{i_\nu} \sigma_{j_\nu} - \frac{1}{\sqrt{2d}} \sum_{(i_\nu, j_\lambda)'} J_{ij}^{\nu\lambda} \sigma_{i_\nu} \sigma_{j_\lambda}, \quad (3.20)$$

onde o primeiro e o segundo termo deste hamiltoniano representam as interações entre spins primeiros vizinhos intracluster e intercluster, respectivamente.

Portanto, levando em consideração a divisão da rede em clusters, as interações ficaram separadas em intracluster e intercluster. A ideia é calcular do modo aproximativo as interações intercluster, enquanto que as interações intraclusters são avaliadas exatamente. Com isso, a dinâmica intracluster é totalmente preservada, melhorando o nível da aproximação quando comparado com o campo média usual. Assim, de modo geral, a aproximação de campo médio é adotada para as interações intercluster, permitindo a obtenção de um problema efetivo de um único cluster de tamanho finito que pode ser resolvido via diagonalização exata.

Por exemplo, para interações de troca FM ou AF ($J_{ij} = J_0$), podemos aproximar as interações interclusters por campos efetivos: $\sum_{(i_\nu, j_\lambda)} \sigma_{i_\nu} \sigma_{j_\lambda} \approx \sum_{i_\nu} m_{i_\nu} \sigma_{i_\nu}$, onde o campo médio m_{i_ν} deve ser calculado auto-consistentemente. Perceba que nesta última aproximação estamos substituindo as interações interclusters, pela ação de campos efetivos sobre cada spin pertencente a fronteira do cluster. Ou seja, a rede é dividida em N_{cl} clusters idênticos e escrevemos: $\sum_{\nu < \lambda} \sum_{(i_\nu, j_\lambda)} \sigma_{i_\nu} \sigma_{j_\lambda} \approx \sum_{\nu}^{N_{cl}} \sum_{i_\nu} m_{i_\nu} \sigma_{i_\nu} = N_{cl} \sum_{i_\nu} m_{i_\nu} \sigma_{i_\nu}$ e deste modo percebemos que de fato a aproximação de campo médio possibilita reduzir um problema de muitos corpos para um problema efetivo de um único cluster com tamanho finito.

Quando as interações de troca são desordenadas, o problema requer uma abordagem envolvendo o método das réplicas. Esse caso é detalhado a seguir.

Desordem e Teoria de Campo Médio com Clusters

Consideramos que as interações J_{ij} do modelo (3.20) são representadas por variáveis aleatórias independentes, dadas por uma distribuição gaussiana:

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{J_{ij}^2}{2}}. \quad (3.21)$$

Para obter as quantidade termodinâmicas, devemos considerar as diferentes possibilidades para a distribuição das interações J_{ij} . Para isso, usamos novamente o truque das réplicas, porém só no cálculo da média configuracional intercluster. Assim, a energia livre média pode ser expressa por

$$g_d = - \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta N n} \overline{\ln Z_{\nu\lambda}^n(\{J_{ij}\})}. \quad (3.22)$$

Na Eq. (3.22), realiza-se a média sobre as desordens interclusters, obtendo $\overline{Z_{\nu\lambda}^n}$. Em seguida, obtém-se a energia livre g_d , calculando a média sobre as desordens intracluster (cálculo sem réplicas). De modo explícito,

$$\begin{aligned} \overline{Z_{\nu\lambda}^n} &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{(i,j)} dJ_{ij}^{\nu\lambda} P(\{J_{ij}^{\nu\lambda}\}) Z_{\nu\lambda}^n \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{(i,j)} \frac{dJ_{ij}^{\nu\lambda}}{\sqrt{2\pi}} \text{Tr}_a \exp \left\{ -\frac{(J_{ij}^{\nu\lambda})^2}{2} + \frac{\beta}{\sqrt{2d}} \sum_a \left(\sum_{(i\nu,j\nu)} J_{ij}^{\nu} \sigma_{i\nu}^a \sigma_{j\nu}^a + \sum_{(i\nu,j\lambda)'} J_{ij}^{\nu\lambda} \sigma_{i\nu}^a \sigma_{j\lambda}^a \right) \right\}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Denotaremos por n_σ , n_b e n_J o número de spins de cada cluster, o número de spins na fronteira de cada cluster, o número de interações intracluster entre primeiros vizinhos respectivamente. Sendo $N = N_{cl} n_\sigma$ o número de spins da rede, as seguintes igualdades são válidas

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{(i)'} 1 = \frac{n_b}{n_\sigma} N, \\ \sum_{(i\nu,j\nu)} 1 = \frac{n_J}{n_\sigma} N, \\ \sum_{(i\nu,j\lambda)'} = \left(d - \frac{n_J}{n_\sigma} \right) N, \end{array} \right. \quad (3.24)$$

O cálculo das integrais gaussianas pode ser realizado completando quadrados, resultando

em

$$\overline{Z_{\nu\lambda}^n} = \exp \left[\frac{1}{4} \beta^2 N n \left(1 - \frac{n_J}{dn_\sigma} \right) \right] Tr \exp \{ -\beta H^{(n)} \}, \quad (3.25)$$

onde

$$H^{(n)} = -\frac{1}{\sqrt{2d}} \sum_{(i\nu, j\nu)} \sum_{a=1}^n J_{ij}^\nu \sigma_{i\nu}^a \sigma_{j\nu}^a - \frac{\beta}{2d} \sum_{(i\nu, j\lambda)'} \sum_{a < b} \sigma_{i\nu}^a \sigma_{i\nu}^b \sigma_{j\lambda}^a \sigma_{j\lambda}^b. \quad (3.26)$$

H^n é denominado hamiltoniano do sistema original. Neste momento vamos introduzir o hamiltoniano $\tilde{H}^{(n)}$ do sistema de referência, ao invés de utilizar o hamiltoniano do sistema original. Este modelo de aproximação é usado com a finalidade de substituir a interação entre termos que pertencem a clusters distintos, por interações intracluster ou para obtermos um problema de spins localizados nos sítios i e j da fronteira de diferentes clusters. Observe que o segundo termo do hamiltoniano original representa as interações entre spins de diferentes clusters, neste caso o objetivo inicial é realizar uma aproximação que permita substituir este termo por uma expressão que contenha uma soma sobre os spins localizados na fronteira de um cluster, em lugar de uma soma sobre spins de diferentes clusters. Ou seja, a proposta com o hamiltoniano de referência é iniciar o processo desacoplamento das interações intercluster apresentadas no sistema original.

Para exemplificar o que chamamos de sistema original e sistema de referência, considere como exemplo de sistema original uma rede quadrada bidimensional com interações entre spins primeiros vizinhos. Neste caso, um possível sistema de referência que podemos adotar é apresentado na figura 3.3. Observe que o sistema de referência da rede cristalina é dividido em clusters, onde cada cluster contém $n_\sigma = 12$ spins. Note que no sistema de referência considerado, temos 4 spins indicados com bolas pretas que são interiores ao cluster adotado, estes não interagem com spins pertencentes a clusters vizinhos. Também temos 8 spins na fronteira de cada cluster, os quais estão indicados por bolas brancas, estes interagem com spins pertencentes a clusters vizinhos. As linhas contínuas e tracejadas representam as interações intraclusters e interclusters respectivamente.

Para obtenção de $\tilde{H}^{(n)}$, os termos de $H^{(n)}$ relacionados às interações intracluster permanecem inalterados, enquanto que o segundo termo de $H^{(n)}$ relacionado as interações desordenadas é modificado utilizando as substituição

$$\sigma_{i\nu}^a \sigma_{j\lambda}^a \sigma_{i\nu}^b \sigma_{j\lambda}^b \longrightarrow q^{ab} \{ \sigma_{i\nu}^a \sigma_{i\nu}^b + \sigma_{j\lambda}^a \sigma_{j\lambda}^b \}, \quad (3.27)$$

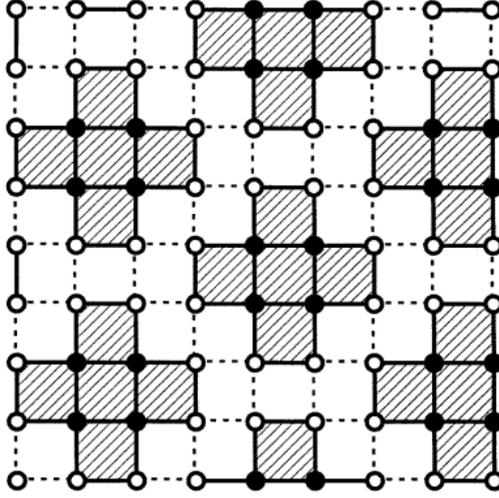


Figura 3.3: Ilustração esquemática da rede quadrada, dividida em clusters de $n_\sigma = 12$ spins, preservando as interações entre spins primeiros [24].

onde $\{q^{ab}\}$ é um conjunto de parâmetros variacionais do problema. Os parâmetros q^{ab} estão associados a ordem VS, análogo ao parâmetro de ordem VS do modelo SK.

Observe que executando esta substituição recaímos em um problema de spins localizados nos sítios i e j da fronteira de diferentes clusters. Ou seja, observe no segundo termo do hamiltoniano original que o mesmo representa as interações entre spins de diferentes clusters, neste caso pretendemos desacoplar estas interações intercluster e para isto realizamos esta aproximação que permite substituir este termo por uma expressão que contenha uma soma sobre os spins localizados na fronteira de um cluster, em lugar de uma soma sobre spins de diferentes clusters. Assim, nesta aproximação os spins da fronteira de diferentes clusters não interagem entre si e a soma dos hamiltonianos de cada cluster ($\Omega_{clust}^{(n)}$) resulta no hamiltoniano total $\tilde{H}^{(n)}$ do sistema de referência e portanto com a substituição (3.27) em $H^{(n)}$, obtemos

$$\tilde{H}^{(n)} = \sum_{clust} \Omega_{clust}^{(n)} \quad (3.28)$$

onde

$$\Omega_{clust}^{(n)} = -\frac{1}{\sqrt{2d}} \sum_{(i_\nu, j_\lambda)} \sum_{a=1}^n J_{ij}^\nu \sigma_{i_\nu}^a \sigma_{j_\nu}^a - \frac{\beta}{n_b} \left(n_\sigma - \frac{n_J}{d} \right) \sum_{a < b} \sum_{(i)} q^{ab} \sigma_{i_\nu}^a \sigma_{i_\nu}^b. \quad (3.29)$$

O cálculo detalhado para obtenção de $\Omega_{clust}^{(n)}$ pode ser consultado no apêndice B. Observe que o primeiro termo desta última expressão se referem as interações intraclusters entre os spins que são primeiros vizinhos, enquanto que o segundo termo se refere aos spins localizados na fronteira de um único cluster. É importante lembrar que $\Omega_{clust}^{(n)}$ é o hamiltoniano de um único

cluster e o hamiltoniano do sistema de referência é $\tilde{H}^{(n)}$.

Seguindo os procedimentos adotados no apêndice C estimamos o limite superior da energia livre por cluster do sistema original indicada por \tilde{g}_d .

Agora considerando a aproximação de simetria de réplicas, onde assumimos $q^{ab} = q$, para todo ab temos que

$$\sum_{a<b} (q^{ab})^2 = \frac{1}{2}n(n-1)q^2, \quad (3.30)$$

assim obtém-se a energia livre por cluster de acordo com a expressão:

$$\tilde{g}_d = \frac{-\beta}{4} \left(1 - \frac{n_J}{dn_\sigma}\right) + \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left[\frac{\beta}{2} \left(1 - \frac{n_J}{dn_\sigma}\right) \frac{1}{2}n(n-1)q^2 - \frac{1}{\beta n_\sigma} \overline{\ln Tr \{e^{-\beta\Omega^{(n)}}\}} \right] \quad (3.31)$$

Observando o hamiltoniano de um único cluster $\Omega^{(n)}$, percebemos que ainda existem interações entre réplicas distintas e para contornar este problema, utilizamos a igualdade

$$\sum_{a<b} \sigma_i^a \sigma_i^b = -\frac{1}{2} \sum_a (\sigma_i^a)^2 + \frac{1}{2} \left(\sum_a \sigma_i^a \right)^2. \quad (3.32)$$

e testando o método para uma rede bidimensional ($d = 2$) com interações entre primeiros vizinhos, dividida em clusters com 4 sítios, ou seja, estamos considerando o cluster sendo uma plaqueta quadrada com quatro sítios, de modo que $n_\sigma = n_b = n_J = 4$. A partir de (3.32), usando o procedimento de linearização dos termos quadráticos, juntamente com a transformação de Hubbard-Stratonovich seguida de algumas manipulações algébricas, obtemos:

$$\tilde{g}_d = \frac{-\beta}{8} (1 - q)^2 - \frac{1}{4\beta} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{(i,j)}^4 DJ_{ij} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{(i)}^4 Dz_i \ln \{Tr \exp\{-\beta H_{eff}\}\}, \quad (3.33)$$

onde, $DJ_{ij} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} dJ_{ij} \exp\left\{\frac{-J_{ij}^2}{2}\right\}$, $Dz_i = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} dz_i \exp\left\{\frac{-z_i^2}{2}\right\}$ e

$$H_{eff} = -\frac{1}{2} \sum_{(i,j)}^4 J_{ij}^\nu \sigma_i \sigma_j - \left(\frac{q}{2}\right)^{1/2} \sum_{(i)}^4 \sigma_i z_i. \quad (3.34)$$

Ainda podemos reescrever a energia livre por spin como:

$$\tilde{g}_d = \frac{-\beta}{8} (1 - q)^2 - \frac{1}{4\beta} \overline{\ln Tr \{-\beta H_{eff}\}}^{z_i, J_{ij}}. \quad (3.35)$$

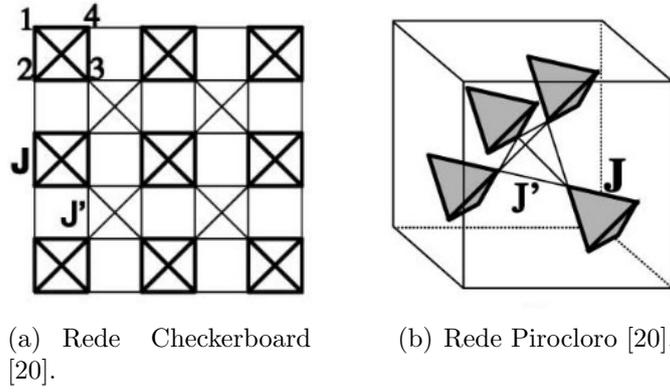
onde q é tal que extremiza a equação energia livre.

Capítulo 4

Modelo Adotado

Neste capítulo temos como finalidade apresentar o modelo adotado e uma abordagem variacional para a teoria de campo médio com clusters para estudo de um sistema geometricamente frustrado (Rede “checkerboard”) em presença de desordem. A figura 1.2 ilustra a rede “checkerboard”, também conhecida como rede do tipo tabuleiro de xadrez. Essa é uma rede quadrada, com interações entre spins primeiros e segundos vizinhos. Observe em 1.2 que as interações de spins primeiros vizinhos estão indicadas com linhas pretas e contínuas, enquanto que as interações entre spins segundos vizinhos estão indicadas por linhas tracejadas vermelhas.

A rede Pirocloro cúbica é constituída de tetraedros que compartilham cantos e assumindo interações AF entre spins primeiros vizinhos, a rede torna-se frustrada. Logo, a geometria da rede pirocloro aliada a interações AF nos conduz a um sistema altamente Frustrado [5]. Porém, devido a complexidade de tratar as interações da rede pirocloro, escolhemos explorar a rede checkerboard, pois esta é considerada como o análogo $2D$ da rede pirocloro [20]. A figura 4.1 ilustra como é feito a equivalência das interações da rede Pirocloro com as interações na Rede Checkerboard. Ou seja, as linhas sólidas em negrito (Interações J) e as linhas finas (Interações J') nos orientam como é realizada a equivalência entre as interações da rede Pirocloro com as interações na rede Checkerboard.



(a) Rede Checkerboard [20].

(b) Rede Pirocloro [20].

Figura 4.1: Representação esquemática da rede Pirocloro em $3D$ e da rede Checkerboard em $2D$. As linhas sólidas em negrito representam as interações (J), enquanto que as linhas finas representam as interações (J').

4.1 Modelo

Iniciamos a abordagem considerando um modelo com spins de Ising na rede “checkerboard”, com interações desordenadas:

$$H = - \sum_{(i,j)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_{(i,j)} J_1 \sigma_i \sigma_j - \sum_{((i,j))} J_2 \sigma_i \sigma_j, \quad (4.1)$$

onde o primeiro termo do hamiltoniano refere-se as interações desordenadas, enquanto que o segundo e terceiro termo indicam as interações ordenadas entre spins primeiros e segundos vizinhos, respectivamente. Note ainda que os índices nos somatórios (i, j) e $((i, j))$ indicam que a soma é realizada sobre spins primeiros e segundos vizinhos respectivamente.

Esse modelo não tem solução analítica exata e, além disso, o custo computacional é elevado quando são consideradas interações desordenadas e frustradas. Uma alternativa é utilizar a técnica de “Cluster Mean Field”, para isto primeiro dividimos a rede “checkerboard” de N spins em N_{cl} clusters idênticos, com $n_\sigma = 4$ spins em cada cluster, conforme é ilustrado na figura 4.2. Assim, temos que $N_{cl} = \frac{N}{n_\sigma}$ e $n_\sigma = n_b = n_J = 4$, onde n_b indica o número de spins na fronteira de cada cluster e n_J indica o número de interações de spins primeiros vizinhos intracluster. Observe ainda em 4.2 que o número de interações de spins segundos vizinhos intracluster e intercluster é $n_F = 2$ e $n_K = 4$ respectivamente. Observe também (na figura 4.2) que as linhas pretas representam as interações intracluster de spins primeiros vizinhos, as linhas contínuas de cor verde representam as interações entre spins primeiros vizinhos que pertencem a fronteira de diferentes clusters, as linhas tracejadas vermelhas indicam as interações intracluster

entre spins primeiros vizinhos e as linhas tracejadas de cor azul representam as interações entre spins segundos vizinhos que pertencem a fronteira de diferentes clusters.

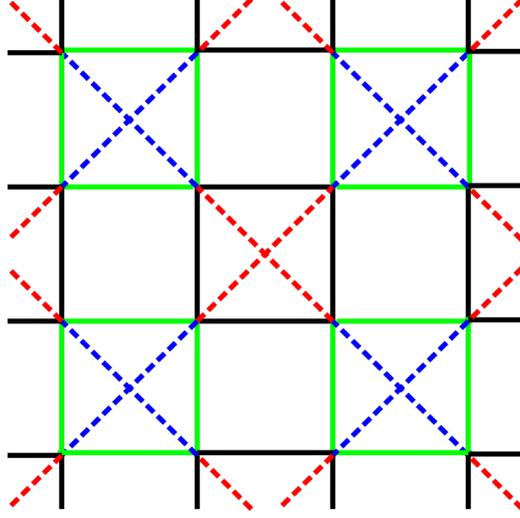


Figura 4.2: Ilustração esquemática da rede Checkerboard dividida em N_{cl} clusters, com $n_\sigma = 4$ spins em cada cluster. Os clusters estão contornados com linhas contínuas e pretas.

Para prosseguir na resolução do modelo adotado, devemos considerar também as seguintes igualdades:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{(i)} 1 = \frac{n_b}{n_\sigma} N = \frac{4}{4} N = N, \quad (4.2) \\ \sum_{(i_\nu, j_\nu)} 1 = \frac{n_J}{n_\sigma} N = \frac{4}{4} N = N, \quad (4.3) \\ \sum_{(i_\nu, j_\lambda)} 1 = \left(d - \frac{n_J}{n_\sigma} \right) N = \left(2 - \frac{4}{4} \right) N = N, \quad (4.4) \\ \sum_{((i_\nu, j_\lambda))} 1 = \sum_{(i)} 1 = N. \quad (4.5) \end{array} \right.$$

Os somatórios em (4.2), (4.3) e (4.4) indicam o número total de spins na fronteira dos N_{cl} clusters da rede checkerboard, o número de interações de primeiros vizinhos intracusters dos N_{cl} clusters da rede checkerboard, o número de interações de spins da rede que são primeiros vizinhos que pertencem a clusters distintos respectivamente. O primeiro somatório em (4.5) indica o número de interações interclusters entre spins segundos vizinhos e a igualdade dos somatórios em (4.5) mostra ainda que o número de interações de spins segundos vizinhos de clusters distintos é igual ao número total de spins na fronteira. Isto porque quando as interações referem-se as interações entre spins segundos vizinhos, estamos considerando que cada spin na fronteira de cada cluster é interagente com apenas um spin segundo vizinho, conforme a figura

4.2 ilustra.

Deste modo dividimos os termos do hamiltoniano (4.1) em duas partes, uma que descreve as interações intracluster e outra que descreve as interações intercluster:

$$H = H_{intra} + H_{inter}. \quad (4.6)$$

Deve ser salientado que mesmo dividindo a rede em clusters, as interações consideradas em (4.1) devem ser preservadas. Isto é, as interações desordenadas entre spins primeiros vizinhos e interação ordenadas entre spins primeiros e segundos vizinhos continuam existindo. Deste modo, com a divisão da rede em clusters, as interações existiram entre os spins de mesmo clusters e entre spins de clusters distintos. Assim, podemos reescrever H como:

$$H = - \underbrace{\sum_{(i\nu, j\nu)} J_{ij}^\nu \sigma_{i\nu} \sigma_{j\nu}}_{H_{intra}} - \underbrace{\sum_{(i\nu, j\lambda)} J_{ij}^{\nu\lambda} \sigma_{i\nu} \sigma_{j\lambda}}_{H_{inter}}, \quad (4.7)$$

onde $\sigma_{i\nu} = \pm 1$ é o spin localizado no sítio i do cluster ν , $J_{ij}^\nu = J_1^\nu + J_2^\nu + \delta J_{ij}^\nu$ e $J_{ij}^{\nu\lambda} = J_1^{\nu\lambda} + J_2^{\nu\lambda} + \delta J_{ij}^{\nu\lambda}$. Sabendo que J_1^ν e J_2^ν representam as interações de troca ordenadas (FM ou AF) intracluster entre primeiros vizinhos e segundos vizinhos respectivamente. Enquanto que δJ_{ij}^ν representam as interações desordenadas entre primeiros vizinhos intraclusters. Analogamente $J_1^{\nu\lambda}$ e $J_2^{\nu\lambda}$ representam as interações de troca ordenadas (FM ou AF) intercluster entre primeiros vizinhos e segundos vizinhos respectivamente e $\delta J_{ij}^{\nu\lambda}$ representa as interações desordenadas entre primeiros vizinhos interclusters. Observe que no primeiro (segundo) somatório em (4.7) foi omitido o somatório sobre os clusters, isto é, a soma sobre os clusters foi considerada de forma implícita por simplicidade nos cálculos, já que os mesmos não modificam os resultados finais. Assim o somatório sobre todos os clusters é uma forma de considerar todos os spins da rede os quais dividimos em clusters (N_{cl}), porém é importante destacar que a soma sobre todos os clusters foi considerada de forma implícita em nosso modelo.

Trataremos primeiro as interações interclusters, calculando essas de modo aproximativo, enquanto que as interações intraclusters são avaliadas exatamente e calculadas somente na etapa final. Assim, podemos reescrever parte do hamiltoniano contendo as interações interclusters (4.7)

da seguinte maneira:

$$H_{inter} = - \sum_{(i_\nu, j_\lambda)} J_1^{\nu\lambda} \sigma_{i_\nu} \sigma_{j_\lambda} - \sum_{((i_\nu, j_\lambda))} J_2^{\nu\lambda} \sigma_{i_\nu} \sigma_{j_\lambda} - \sum_{(i_\nu, j_\lambda)} \delta J_{ij}^{\nu\lambda} \sigma_{i_\nu} \sigma_{j_\lambda}, \quad (4.8)$$

onde os índices nos somatórios (i_ν, j_λ) e $((i_\nu, j_\lambda))$ indicam que a soma é realizada sobre spins primeiros e segundos vizinhos pertencentes a clusters diferentes, ν e λ , respectivamente. As interações desordenadas $\delta J_{ij}^{\nu\lambda}$ são representadas por variáveis aleatórias independentes, que seguem uma distribuição de probabilidade gaussiana dada por:

$$P(\delta J_{ij}^{\nu\lambda}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\delta J_{ij}^{\nu\lambda})^2}{2}}. \quad (4.9)$$

Nosso propósito inicial é determinar a energia livre por spin, dada em (3.2), já que a partir desta é possível encontrar toda informação termodinâmica do sistema. Mas, devido a infinidade de configurações possíveis para as interações desordenadas $\{\delta J_{ij}^\nu, \delta J_{ij}^{\nu\lambda}\}$, temos uma energia livre dependente dessas variáveis aleatórias:

$$g(\{\delta J_{ij}^\nu, \delta J_{ij}^{\nu\lambda}\}) = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z(\{\delta J_{ij}^\nu\}, \{\delta J_{ij}^{\nu\lambda}\}). \quad (4.10)$$

Assim, utilizamos a média configuracional para determinar a energia livre média g , realizando uma média sobre a desordem. Daí obtemos

$$g = \overline{g(\{\delta J_{ij}^\nu, \delta J_{ij}^{\nu\lambda}\})} = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \overline{\ln Z(\{\delta J_{ij}^\nu\}, \{\delta J_{ij}^{\nu\lambda}\})}, \quad (4.11)$$

note que a barra sobrescrita ($\overline{\dots}$) denota a média configuracional. Usamos novamente o truque das réplicas, porém só no cálculo da média configuracional intercluster. Daí, podemos escrever:

$$g = - \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\overline{\ln \overline{Z_{\nu\lambda}^n}}}{\beta N n}. \quad (4.12)$$

As interações desordenadas intraclusters serão tratadas mais adiante por diagonalização exata. Deste modo em (4.12) utilizamos o método das réplicas (3.15) e a função de partição replicada (3.16) para tratar as interações desordenadas interclusters e assim determinar $\overline{Z_{\nu\lambda}^n}$. Em seguida, obtém-se a energia livre por spin, calculando a média sobre as desordens intracluster, vale ressaltar que neste momento o cálculo é efetuado sem o uso de réplicas. A segunda barra sobrescrita acima de $\ln \overline{Z_{\nu\lambda}^n}$ indica uma média sobre as desordens intraclusters.

Logo, para obter a energia livre por spin faz-se necessário inicialmente realizar a média sobre as desordens interclusters $\overline{Z_{\nu\lambda}^n}$. Assim

$$\begin{aligned}\overline{Z_{\nu\lambda}^n} &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{(i\nu, j\lambda)} d(\delta J_{ij}^{\nu\lambda}) P(\{\delta J_{ij}^{\nu\lambda}\}) Z_{\nu\lambda}^n \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{(i\nu, j\lambda)} D(\delta J_{ij}^{\nu\lambda}) Tr \exp\left[-\beta \sum_{a=1}^n \left\{ H_{intra}^a - \frac{1}{2} \sum_{(i\nu, j\lambda)} J_1^{\nu\lambda} \sigma_{i\nu}^a \sigma_{j\lambda}^a - \frac{1}{2} \sum_{((i\nu, j\lambda))} J_2^{\nu\lambda} \sigma_{i\nu}^a \sigma_{j\lambda}^a + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{2} \sum_{(i\nu, j\lambda)} \delta J_{ij}^{\nu\lambda} \sigma_{i\nu}^a \sigma_{j\lambda}^a \right\} \right],\end{aligned}\quad (4.13)$$

onde a representa o índice de réplica e $D(\delta J_{ij}^{\nu\lambda}) = \frac{d(\delta J_{ij}^{\nu\lambda})}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(\delta J_{ij}^{\nu\lambda})^2}{2}\right]$.

O fator $1/2$ indica que as interações entre spins de clusters distintos são contadas duas vezes. Para o cálculo das integrais gaussianas de $\overline{Z_{\nu\lambda}^n}$, usamos a identidade $\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp[-a(x-x_0)^2 + bx] = \left(\frac{\pi}{a}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{b^2}{4a} + bx_0\right]$ e escrevemos

$$\begin{aligned}\overline{Z_{\nu\lambda}^n} &= Tr_a \exp \left[-\beta \sum_{a=1}^n \left\{ H_{intra}^a - \frac{1}{2} \sum_{(i\nu, j\lambda)} J_1^{\nu\lambda} \sigma_{i\nu}^a \sigma_{j\lambda}^a - \frac{1}{2} \sum_{((i\nu, j\lambda))} J_2^{\nu\lambda} \sigma_{i\nu}^a \sigma_{j\lambda}^a \right\} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\beta^2}{8} \sum_{a,b} \sum_{(i\nu, j\lambda)} \sigma_{i\nu}^a \sigma_{j\lambda}^a \sigma_{i\nu}^b \sigma_{j\lambda}^b \right],\end{aligned}\quad (4.14)$$

onde obtemos um problema com réplicas interagentes. Separando as réplicas idênticas, tomando $a < b$ no ultimo somatório da expressão anterior e usando as igualdades (4.2), (4.4) e (4.5) obtemos:

$$\begin{aligned}\overline{Z_{\nu\lambda}^n} &= \exp \left\{ \frac{\beta^2 N n}{8} \left[1 - \frac{n_J}{dn_\sigma} \right] d \right\} Tr_a \exp \left[-\beta \sum_{a=1}^n \left\{ H_{intra}^a - \frac{1}{2} \sum_{(i\nu, j\lambda)} J_1^{\nu\lambda} \sigma_{i\nu}^a \sigma_{j\lambda}^a \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{2} \sum_{((i\nu, j\lambda))} J_2^{\nu\lambda} \sigma_{i\nu}^a \sigma_{j\lambda}^a \right\} + \frac{\beta^2}{4} \sum_{(i\nu, j\lambda)} \sum_{a < b} \sigma_{i\nu}^a \sigma_{j\lambda}^a \sigma_{i\nu}^b \sigma_{j\lambda}^b \right].\end{aligned}\quad (4.15)$$

Como foi discutido no início do capítulo para rede Checkerboard temos $n_\sigma = n_J = n_b = 4$ e $d = 2$. Logo, podemos escrever

$$\overline{Z_{\nu\lambda}^n} = \exp \left\{ \frac{\beta^2 N n}{8} \right\} Tr_a \exp \left[-\beta H^{(n)} \right], \quad (4.16)$$

onde $H^{(n)}$ é o hamiltoniano do sistema original dado por

$$H^{(n)} = \sum_{a=1}^n \left\{ H_{intra}^a - \frac{1}{2} \sum_{(i_\nu, j_\lambda)} J_1^{\nu\lambda} \sigma_{i_\nu}^a \sigma_{j_\lambda}^a - \frac{1}{2} \sum_{((i_\nu, j_\lambda))} J_2^{\nu\lambda} \sigma_{i_\nu}^a \sigma_{j_\lambda}^a \right\} - \frac{\beta}{4} \sum_{(i_\nu, j_\lambda)} \sum_{a < b} \sigma_{i_\nu}^a \sigma_{j_\lambda}^a \sigma_{i_\nu}^b \sigma_{j_\lambda}^b. \quad (4.17)$$

Nesta última expressão ainda temos um problema com interações entre spins de diferentes clusters, para desacoplar estas interações no segundo, terceiro e quarto termos do hamiltoniano $H^{(n)}$, vamos adotar uma abordagem variacional para teoria do campo médio com cluster, análogo ao que foi discutido no modelo de Baviera e et al. E assim prosseguimos no processo para determinar $\overline{Z_{\nu\lambda}^n}$,

4.2 Abordagem Variacional para a Teoria do Campo Médio com Clusters

Neste ponto, convém escolhermos um sistema de referência que seja possível tratar analiticamente. Para isto escolhemos um sistema de referência dividido em N_{cl} clusters de spins, cujo hamiltoniano é dado por

$$\tilde{H}^{(n)} = \sum_{clust} \Omega_{clust}^{(n)}. \quad (4.18)$$

O hamiltoniano $\tilde{H}^{(n)}$ é obtido a partir de $H^{(n)}$. Os termos de $H^{(n)}$ relacionados as interações intracusters permanecem inalterados. Já para os termos relacionados as interações entre spins de diferentes clusters realizamos as seguintes substituições:

$$\sigma_{i_\nu}^a \sigma_{j_\lambda}^a \sigma_{i_\nu}^b \sigma_{j_\lambda}^b \longrightarrow q^{ab} \{ \sigma_{i_\nu}^a \sigma_{i_\nu}^b + \sigma_{j_\lambda}^a \sigma_{j_\lambda}^b \} \quad (4.19)$$

$$\sigma_{i_\nu}^a \sigma_{j_\lambda}^a \longrightarrow \sigma_{i_\nu}^a m_{j_\lambda}^a + m_{i_\nu}^a \sigma_{j_\lambda}^a \text{ para } (i_\nu, j_\lambda) \text{ primeiros vizinhos} \quad (4.20)$$

$$\sigma_{i_\nu}^a \sigma_{j_\lambda}^a \longrightarrow \sigma_{i_\nu}^a \mu_{j_\lambda}^a + \mu_{i_\nu}^a \sigma_{j_\lambda}^a \text{ para } ((i_\nu, j_\lambda)). \text{ segundos vizinhos} \quad (4.21)$$

Observe que a primeira aproximação é usada para substituir as interações desordenadas entre spins da fronteira de diferentes clusters, enquanto que a segunda e terceira aproximações são utilizadas para substituir as interações interclusters antiferromagnéticas entre spins primeiros e segundos vizinhos. Os termos introduzidos nas aproximações, $\{q^{ab}\}$, $\{m_k^a\}$ e $\{\mu_k^a\}$, determinam um conjunto de parâmetros variacionais. Observe que cada spin da fronteira possui dois spins que são primeiros vizinhos e a aproximação considerada foram implementadas para desacoplar

todas interações entre spins de diferentes de clusters. No caso dos spins primeiros vizinhos, são duas interações a desacoplar e no caso dos spins segundos vizinhos, é apenas uma. Além disso, os clusters são idênticos, logo, usando as aproximações consideradas em (4.19), (4.20) e (4.21) e também usando as igualdades (4.2), (4.3), (4.4) e (4.5), recaímos num problema de um único cluster. Obtendo o hamiltoniano de um único cluster referente ao sistema de referência.

$$\Omega_{clust}^{(n)} = \sum_{a=1}^n \left[H_{intra}^a - \sum_{(i\nu, j\lambda)} J_1^{\nu\lambda} \sigma_{i\nu}^a m_{j\lambda}^a - \sum_{((i\nu, j\lambda))} J_2^{\nu\lambda} \sigma_{i\nu}^a \mu_{j\lambda}^a \right] - \frac{\beta}{2} \sum_{a<b} \sum_{(i\nu, j\lambda)} q^{ab} \sigma_{i\nu}^a \sigma_{i\nu}^b. \quad (4.22)$$

A função de partição do sistema original do modelo descrito é dada por $Z = Tr \exp \{-\beta H^{(n)}\}$, e sem perda de generalidade podemos reescrever

$$Z = \frac{Z_0}{Z_0} Tr \exp \{-\beta H^{(n)}\} = Z_0 \frac{Tr e^{-\beta \tilde{H}^{(n)}} e^{-\beta(H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)})}}{Z_0} = Z_0 \left\langle e^{-\beta(H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)})} \right\rangle_0, \quad (4.23)$$

onde $Z_0 = Tr \exp\{-\beta \tilde{H}^{(n)}\}$ é função de partição do sistema de referência e $\langle \dots \rangle_0$ indica a média com relação ao sistema de referência. Agora, utilizando a relação $\left\langle e^{-\beta(H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)})} \right\rangle_0 \geq e^{\langle -\beta(H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)}) \rangle_0}$, podemos escrever $Z \geq Z_0 e^{\langle -\beta(H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)}) \rangle_0}$, assim obtemos a desigualdade de Bogoliubov

$$-\overline{\ln Tr \{e^{-\beta H^{(n)}}\}} \leq \beta \overline{\langle H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)} \rangle_0} - \overline{\ln Tr \{e^{-\beta \tilde{H}^{(n)}}\}} = \tilde{g}. \quad (4.24)$$

Sendo i e j sítios pertencentes a diferentes clusters e como os clusters são idênticos, podemos escrever uma função de correlação entre clusters $\langle \sigma_{i\nu}^a \sigma_{j\lambda}^a \sigma_{i\nu}^b \sigma_{j\lambda}^b \rangle_0 = \langle \sigma_{i\nu}^a \sigma_{i\nu}^b \rangle_0 \langle \sigma_{j\lambda}^a \sigma_{j\lambda}^b \rangle_0 = \langle \sigma_{i\nu}^a \sigma_{i\nu}^b \rangle_0^2$ e $\langle \sigma_{i\nu}^a \sigma_{j\lambda}^a \rangle_0 = \langle \sigma_{i\nu}^a \rangle_0 \langle \sigma_{j\lambda}^a \rangle_0 = \langle \sigma_{i\nu}^a \rangle_0^2$. Além disso, para calcular a média $\beta \overline{\langle H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)} \rangle_0}$ e utilizar a mesma em (4.24) consideramos que $\overline{\langle H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)} \rangle_0} = \overline{\langle H^{(n)} \rangle_0} - \overline{\langle \tilde{H}^{(n)} \rangle_0}$. Assim,

$$\begin{aligned} \beta \overline{\langle H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)} \rangle_0} &= -\frac{\beta^2}{2} N \sum_{a<b} \left[\frac{\overline{\langle \sigma_{i\nu}^a \sigma_{i\nu}^b \rangle_0^2}}{2} - q^{ab} \overline{\langle \sigma_{i\nu}^a \sigma_{i\nu}^b \rangle_0} \right] \\ &- \beta N \sum_{a=1} \left(J_1^{\nu\lambda} \left[\frac{\overline{\langle \sigma_{i\nu}^a \rangle_0^2}}{2} - \overline{\langle \sigma_{i\nu}^a \rangle_0} m_{j\lambda}^a \right] + J_2^{\nu\lambda} \left[\frac{\overline{\langle \sigma_{i\nu}^a \rangle_0^2}}{2} - \overline{\langle \sigma_{i\nu}^a \rangle_0} \mu_{j\lambda}^a \right] \right). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Conhecendo $\beta \overline{\langle H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)} \rangle_0}$, agora podemos extremizar \tilde{g} na desigualdade de Bogoliubov em relação as variáveis $m_{j\lambda}^a$, $\mu_{j\lambda}^a$ e q^{ab} , e encontrar os conjuntos de parâmetros que satisfaçam $\frac{\partial g}{\partial m_{j\lambda}^a} = 0$, $\frac{\partial g}{\partial \mu_{j\lambda}^a} = 0$ e $\frac{\partial g}{\partial q^{ab}} = 0$. Deste modo encontramos $m_{j\lambda}^a = \langle \sigma_{i\nu}^a \rangle_0$, $\mu_{j\lambda}^a = \langle \sigma_{i\nu}^a \rangle_0$ e $q^{ab} = \langle \sigma_{i\nu}^a \sigma_{i\nu}^b \rangle_0$. Perceba que $m_{j\lambda}^a = \mu_{j\lambda}^a$. Além disso podemos escrever $\langle \sigma_{i\nu}^a \rangle_0^2 = \langle \sigma_{i\nu}^a \rangle_0 \langle \sigma_{i\nu}^a \rangle_0 =$

$\langle \sigma_{i_\nu}^a \rangle_0 \langle \sigma_{j_\lambda}^a \rangle_0 = m_{j_\nu}^a m_{i_\nu}^a$. O parâmetro m representa a magnetização do sistema e q representa o parâmetro de ordem VS. Para que a fase VS ocorra é necessário que $m = 0$ e $q \neq 0$ [35]. Tendo em vista que $m_{j_\lambda}^a = \langle \sigma_{i_\nu}^a \rangle_0$, $\mu_{j_\lambda}^a = \langle \sigma_{i_\nu}^a \rangle_0$, $q^{ab} = \langle \sigma_{i_\nu}^a \sigma_{i_\nu}^b \rangle_0$ e $\langle \sigma_{i_\nu}^a \rangle_0^2 = \langle \sigma_{i_\nu}^a \rangle_0 \langle \sigma_{j_\lambda}^a \rangle_0 = m_{j_\lambda}^a m_{i_\nu}^a$. Reescrevemos a desigualdade de Bogoliubov da seguinte forma:

$$\begin{aligned} -\overline{\ln Tr \{e^{-\beta H^{(n)}}\}} \leq \beta \overline{\langle H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)} \rangle} - \overline{\ln Tr \{e^{-\beta \tilde{H}^{(n)}}\}} = \frac{\beta^2}{4} N \sum_{a < b} (q^{ab})^2 \\ + \frac{\beta N}{2} \sum_{a=1} J_1^{\nu\lambda} m_{j_\lambda}^a m_{i_\nu}^a + \frac{\beta N}{2} \sum_{a=1} J_2^{\nu\lambda} m_{j_\lambda}^a m_{i_\nu}^a - \overline{\ln Tr \{e^{-\beta \tilde{H}^{(n)}}\}}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Com base no resultado (4.26), obtemos uma estimativa para a energia livre por cluster

$$\begin{aligned} g = \frac{-\beta}{8} - \lim_{n \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N n} \ln Tr \{e^{-\beta H^{(n)}}\} \leq \frac{-\beta}{8} + \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left[\frac{\beta}{4} \sum_{a < b} (q^{ab})^2 + \frac{1}{2} \sum_{a=1} J_1^{\nu\lambda} m_{i_\nu}^a m_{j_\lambda}^a \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \sum_{a=1} J_2^{\nu\lambda} m_{i_\nu}^a m_{j_\lambda}^a - \frac{1}{\beta n_\sigma} \overline{\ln Tr \{e^{-\beta \Omega^{(n)}}\}} \right] = \tilde{g}. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Note que indicamos por \tilde{g} a estimativa para energia livre por cluster.

4.3 Solução com Simetria de Réplicas

Nesta seção, para cálculo da energia livre \tilde{g} , consideraremos a aproximação de simetria de réplicas, que consiste em considerar $m_{j_\lambda}^a = m_{j_\lambda}$ ($m_{i_\nu}^a = m_{i_\nu}$) e $q^{ab} = q$, para todos os índices de réplica a e ab . Logo, podemos escrever as seguintes relações

$$\sum_a m_{i_\nu}^a m_{j_\lambda}^a = \sum_a \langle \sigma_{j_\lambda}^a \rangle_0 \langle \sigma_{i_\nu}^a \rangle_0 = n m_{i_\nu} m_{j_\lambda} \quad (4.28)$$

e

$$\sum_{a < b} (q^{ab})^2 = \frac{1}{2} n(n-1) q^2, \quad (4.29)$$

assim, obtém-se a energia livre por cluster de acordo com a expressão:

$$\tilde{g} = \frac{-\beta}{8} + \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left[\frac{\beta}{8} n(n-1) q^2 + \frac{J_1^{\nu\lambda}}{2} n m_{i_\nu} m_{j_\lambda} + \frac{J_2^{\nu\lambda}}{2} n m_{i_\nu} m_{j_\lambda} - \frac{1}{\beta n_\sigma} \overline{\ln Tr \{e^{-\beta \Omega^{(n)}}\}} \right], \quad (4.30)$$

onde

$$\Omega_{clust}^{(n)} = \sum_{a=1}^n \left[H_{intra} - \sum_{(i\nu, j\lambda)} J_1^{\nu\lambda} \sigma_{i\nu} m_{j\lambda} - \sum_{((i\nu, j\lambda))} J_2^{\nu\lambda} \sigma_{i\nu} m_{j\lambda} \right] - \frac{\beta}{2} \sum_{a < b} \sum_{(i)} q \sigma_{i\nu}^a \sigma_{i\nu}^b. \quad (4.31)$$

Percebemos que ainda existem interações entre réplicas distintas na equação (4.31). Para contornar este problema, utilizamos a igualdade

$$\sum_{a < b} \sigma_i^a \sigma_i^b = -\frac{1}{2} \sum_a (\sigma_i^a)^2 + \frac{1}{2} \left(\sum_a \sigma_i^a \right)^2, \quad (4.32)$$

que repassa as interações entre réplicas por termos quadráticos. Em seguida linearizamos os termos quadráticos utilizando transformações de Hubbard-Stratonovich. Após algumas manipulações algébricas, obtemos

$$\tilde{g} = \frac{-\beta}{8} (1 - q)^2 + \frac{J_1^{\nu\lambda}}{2} m_{i\nu} m_{j\lambda} + \frac{J_2^{\nu\lambda}}{2} m_{i\nu} m_{j\lambda} - \frac{1}{4\beta} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{(i,j)}^4 DJ_{ij} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{(i)}^4 Dz_i \ln \{Tr \exp\{-\beta H_{eff}\}\}, \quad (4.33)$$

onde, $DJ_{ij} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} dJ_{ij} \exp\left\{\frac{-J_{ij}^2}{2}\right\}$, $Dz_i = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} dz_i \exp\left\{\frac{-z_i^2}{2}\right\}$ e

$$H_{eff} = - \sum_{(i,j)}^4 J_1^{\nu} \sigma_i \sigma_j - \sum_{((i,j))}^4 J_2^{\nu} \sigma_i \sigma_j - \sum_{(i,j)}^4 \delta J_{ij}^{\nu} \sigma_i \sigma_j - \sum_{(i,j)}^4 J_1^{\nu\lambda} \sigma_i m_{j\lambda} - \sum_{((i,j))}^4 J_2^{\nu\lambda} \sigma_i m_{j\lambda} - \left(\frac{q}{2}\right)^{1/2} \sum_{(i)}^4 \sigma_i z_i. \quad (4.34)$$

Para facilitar a visualização da ação dos campos efetivos (m_1 , m_2 , m_3 e m_4) sobre os spins pertencentes a fronteira do cluster central observe a figura 4.3 que ilustra como os campos efetivos atuam sobre o cluster. Note que os campos efetivos são indicados por setas tracejadas e o cluster central é representado por um contorno em negrito.

Tendo em vista a ação dos campos efetivos sobre os spins da fronteira do cluster na figura

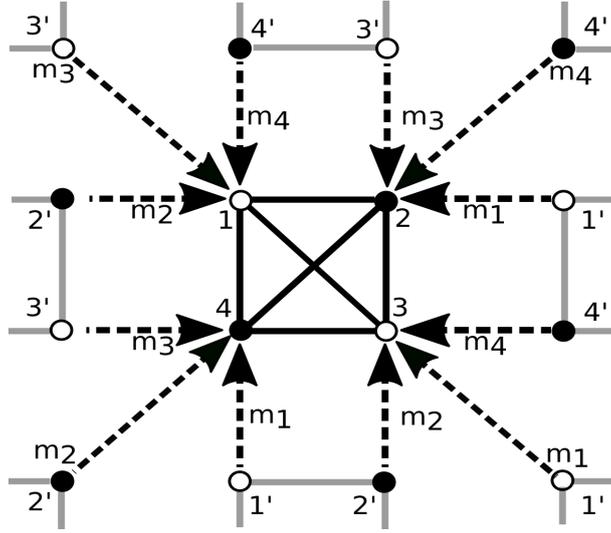


Figura 4.3: Representação esquemática da rede “checkerboard” dividida em clusters com 4 spins. Os círculos brancos (círculos pretos) representam os spins de Ising que assume o valor -1 (1). As linhas contínuas em negrito representam as interações intracluster e as setas tracejadas indicam os campos efetivos atuantes sobre os spins da fronteira do cluster central. Para efeito de representação assumimos que o sistema se comporta como AF, com os spins 1 e 3 (2 e 4) possuindo mesma orientação.

4.3 podemos reescrever a energia livre por spin como:

$$\tilde{g} = \frac{-\beta}{8} (1 - q)^2 + J_1^{\nu\lambda} (m_1 m_2 + m_2 m_3 + m_3 m_4 + m_4 m_1) + J_2^{\nu\lambda} (m_1 m_3 + m_2 m_4) - \frac{1}{4\beta} \overline{\ln Tr \{ \exp [-\beta H_{eff}] \}}^{z_i, J_{ij}}, \quad (4.35)$$

onde,

$$\begin{aligned} H_{eff} = & - \sum_{i=1}^4 J_1^{\nu} \sigma_i \sigma_{i+1} - \sum_{i=1}^2 J_2^{\nu} \sigma_i \sigma_{i+2} - \sum_{i=1}^4 \delta J_{ij}^{\nu} \sigma_i \sigma_{i+1} \\ & - J_1^{\nu\lambda} [\sigma_1 (m_2 + m_4) + \sigma_2 (m_3 + m_1) + \sigma_3 (m_2 + m_4) + \sigma_4 (m_1 + m_3)] \\ & - J_2^{\nu\lambda} [\sigma_1 (m_3) + \sigma_2 (m_4) + \sigma_3 (m_1) + \sigma_4 (m_2)] - \left(\frac{q}{2}\right)^{1/2} \sum_{(i)}^4 \sigma_i z_i. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Vale observar que quando $i = 4$ no primeiro somatório, então $i + 1 = 5 = 1$. Minimizando \tilde{g} em relação aos seus parâmetros obtemos as equações auto-consistentes para cada um destes parâmetros

$$m_k = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{(i,j)} D J_{ij} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i D z_i \frac{Tr \sigma_k \exp [-\beta H_{eff}]}{Tr \exp [-\beta H_{eff}]}, \quad (4.37)$$

e

$$q = \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{(i,j)} DJ_{ij} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i Dz_i \left(\frac{Tr \sigma_k \exp[-\beta H_{eff}]}{Tr \exp[-\beta H_{eff}]} \right)^2, \quad (4.38)$$

onde $k = 1, 2, 3, 4$. O parâmetro m representa magnetizações atuantes nos spins da fronteira do cluster e q o parâmetro de ordem VS.

Resolvendo as equações auto-consistentes (4.37) e (4.38) podemos obter estimar a energia livre por spin \tilde{g} em (4.33) ou em (4.35). Para o cálculo das integrais (4.37), (4.38) e (4.33) utilizamos o método de monte carlo para integral o qual descreveremos na próxima seção.

4.4 Procedimento Numérico

Para resolver as equações auto-consistentes (4.37) e (4.38) é implementado em Fortran um algoritmo que possibilita obter o resultado numérico dos parâmetros m e q . Para isto considere os vetores dados por

$$t = \begin{bmatrix} T \\ J_0 \\ J_{ij} \end{bmatrix}, \quad e \quad y = \begin{bmatrix} m \\ q \end{bmatrix} \quad (4.39)$$

onde as componentes do vetor t são as variáveis independentes: temperatura T , intensidade das interações antiferromagnética J_0 e intensidade da desordem J_{ij} entre spins primeiros vizinhos. É importante observar que as interações antiferromagnéticas consideradas ocorrem entre spins primeiros e também entre spins segundos vizinhos (J_1 e J_2). Os parâmetros m e q são dependentes auto-consistentemente.

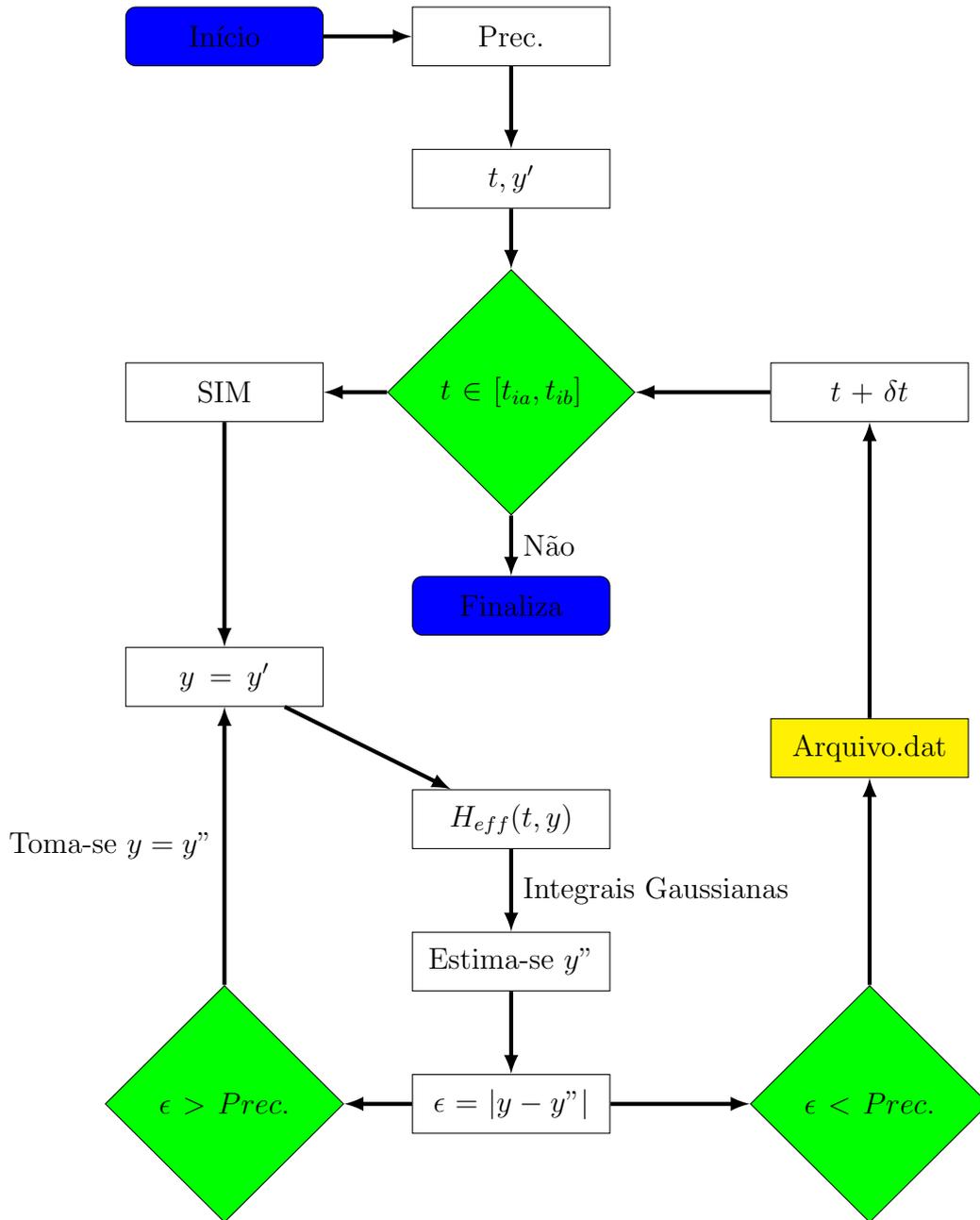
Perceba que determinar m e q auto-consistentemente implica em resolver a equação $F(y) = 0$, onde

$$F(y) = \begin{bmatrix} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{(i,j)} DJ_{ij} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i Dz_i \frac{Tr \sigma_k \exp[-\beta H_{eff}]}{Tr \exp[-\beta H_{eff}]} - m_k \\ \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{(i,j)} DJ_{ij} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i Dz_i \left(\frac{Tr \sigma_k \exp[-\beta H_{eff}]}{Tr \exp[-\beta H_{eff}]} \right)^2 - q \end{bmatrix} \quad (4.40)$$

onde k representa os sítios da fronteira do cluster: $k = 1, 2, 3$ e 4 , quando adotamos clusters com quatro sítios. Vale comentar que são cinco equações para resolver em (4.40), pois para cada valor de $k =$ encontramos uma magnetização m_k , sendo m_1, m_2, m_3, m_4 as magnetizações que desejamos determinar. Além disso, temos uma equação que resolvendo a mesma, nos fornecerá o valor do parâmetro q .

Para ilustrar o algoritmo implementado para resolução da equação $F(y) = 0$ observe o

fluxograma exibido



Observe que iniciamos o algoritmo impondo uma precisão ($Prec.$) aos resultados que serão obtidos. A precisão indica o quão pequeno deve ser erro obtido nos resultados numéricos. Após adotar um valor de precisão da ordem de 10^{-7} , definimos os valores iniciais de t e propomos um vetor tentativa y' que aproxime $F(y) = 0$. No próximo passo verificamos se as componentes do vetor t pertencem ao intervalo $[t_{ia}, t_{ib}]$ em que se deseja avaliar sua solução. Caso seja satisfeita essa última condição, o algoritmo considera o vetor tentativa $y' = y$, caso contrário o algoritmo é finalizado. Supondo que $t \in [t_{ia}, t_{ib}]$, segue-se o algoritmo e partir do vetor tentativa determina-se H_{eff} . Em seguida calculando as integrais gaussianas em $F(y)$ e estima-se um novo

valor y'' como solução de $F(y) = 0$. Daí seguimos o algoritmo determinando o erro ($\epsilon = |y - y''$). Caso o erro seja superior a precisão adotada no início do algoritmo, considera-se como novo vetor tentativa y'' e o ciclo se reinicia, mas caso o erro seja inferior a precisão, os resultados de y'' são armazenados num arquivo (Arquivo.dat) e impomos uma pequena variação δt ao vetor t e o processo se inicia novamente, conforme é ilustrado. Perceba que o processo só será finalizado quando $t \notin [t_{ia}, t_{ib}]$.

Encontrando as componentes de y podemos obter a energia livre por spin e consequentemente obter as demais informações termodinâmicas do sistema analisado.

Capítulo 5

Resultados e Discussões

5.1 Resultados para Desordem Desprezível

A ausência de desordem nas interações possibilita isolar os efeitos causados pela frustração geométrica na rede “checkerboard”. Nesse caso, a frustração pode ser ajustada variando a intensidade das interações antiferromagnéticas entre primeiros e segundos vizinhos, o que leva à definição do parâmetro de frustração geométrica $r = J_2/J_1$ [12].

Antes de iniciarmos a análise dos efeitos da frustração geométrica, vamos definir os parâmetros de ordem que caracterizam as possíveis fases magnéticas esperadas pelas interações propostas no modelo adotado: AF e SAF. A fase AF pode ser encontrada quando os spins dos primeiros vizinhos possuem alinhamento antiparalelo, tendo magnetizações em sentidos opostos. Para ilustrar essa ordem no cluster com 4 sítios, acompanhamos a figura 5.1 (a) que exhibe os spins localizados nos sítios 1 e 3 (2 e 4) possuindo a mesma orientação.

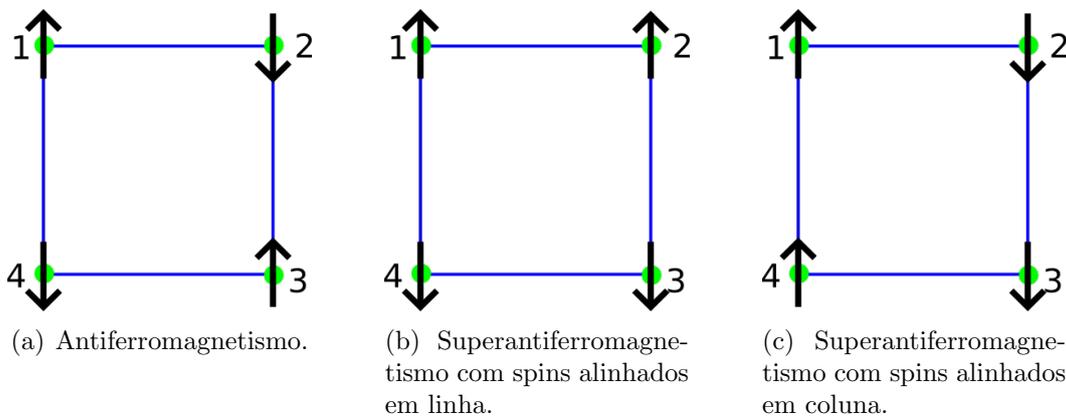


Figura 5.1: Descrição esquemática das fases antiferromagnética e superantiferromagnética. As setas indicam o momento magnético de spin.

Assim, definimos o parâmetro de ordem para a fase AF como:

$$m_{AF} = \frac{|m_1 + m_3 - m_2 - m_4|}{4}. \quad (5.1)$$

Já a fase SAF ocorre quando a interação entre segundos vizinhos é favorecida, formando linhas ou colunas de spins alinhados com mesma orientação. No caso de ser formado linhas de spins com a mesma orientação, os spins dos sítios 1 e 2 (3 e 4) da figura 5.1 (b) possuem o mesmo sentido e, quando é formado colunas de spins com a mesma orientação, os spins dos sítios 1 e 4 (2 e 3) da figura 5.1 (c) possuem o mesmo sentido. Ambas as configurações apresentadas nas 5.1 (b) e (c) justificam a definição do parâmetro de ordem SAF como:

$$m_{SAF} = \frac{|m_1 - m_3| + |m_2 - m_4|}{4}. \quad (5.2)$$

O comportamento dos parâmetros de ordem m_{AF} e m_{SAF} pode ser visto na figura 5.2 para diferentes intensidades de frustração geométrica. No regime $r = 0$ (sem frustração geométrica), ao diminuir a temperatura, observou-se que o sistema sofre uma transição contínua da fase PM ($m_{AF} = 0$ e $m_{SAF} = 0$) para a AF ($m_{AF} \neq 0$ e $m_{SAF} = 0$). Essa transição ocorre com a temperatura de Néel (T_N) em $T_N = 3.5^1$. Ao aumentar a magnitude de r , observa-se que T_N torna-se menor até alcançar um valor mínimo em $r \approx 1.0$. Agora, para $r > 1$, o sistema passa a apresentar a fase superantiferromagnética ($m_{SAF} > 0$ e $m_{AF} = 0$), com a temperatura crítica aumentando conforme r se intensifica a partir de 1. Vale salientar que as magnetizações m_{AF} e m_{SAF} nunca possuem valores simultaneamente não-nulos.

Para melhor visualização das transições de fase, com base nos resultados discutidos na figura 5.2, construímos um diagrama de fases da temperatura crítica pela intensidade da frustração geométrica, ilustrado no gráfico 5.3. Note que para baixa intensidade de r a fase AF é favorecida em temperaturas baixas, enquanto que para valores de r acima de 1 a fase SAF é encontrada. Em temperaturas altas o sistema se torna PM.

Para analisar a transição de fase para temperaturas na região onde $T/|J_1| < 1.0$, fixamos $T/|J_1| = 0.5$, e avaliamos o comportamento das magnetizações m_{AF} e m_{SAF} em função do parâmetro de frustração geométrica $r = J_2/J_1$, conforme é ilustrado em 5.4. As linhas tracejadas indicam as spinodais das soluções AF e SAF, isto é, são magnetizações de estados

¹Essa temperatura de transição está de acordo com o resultado esperado para a técnica com cluster de 4 sítios utilizada para tratar sistemas com interações AF somente entre spins primeiros vizinhos [23].

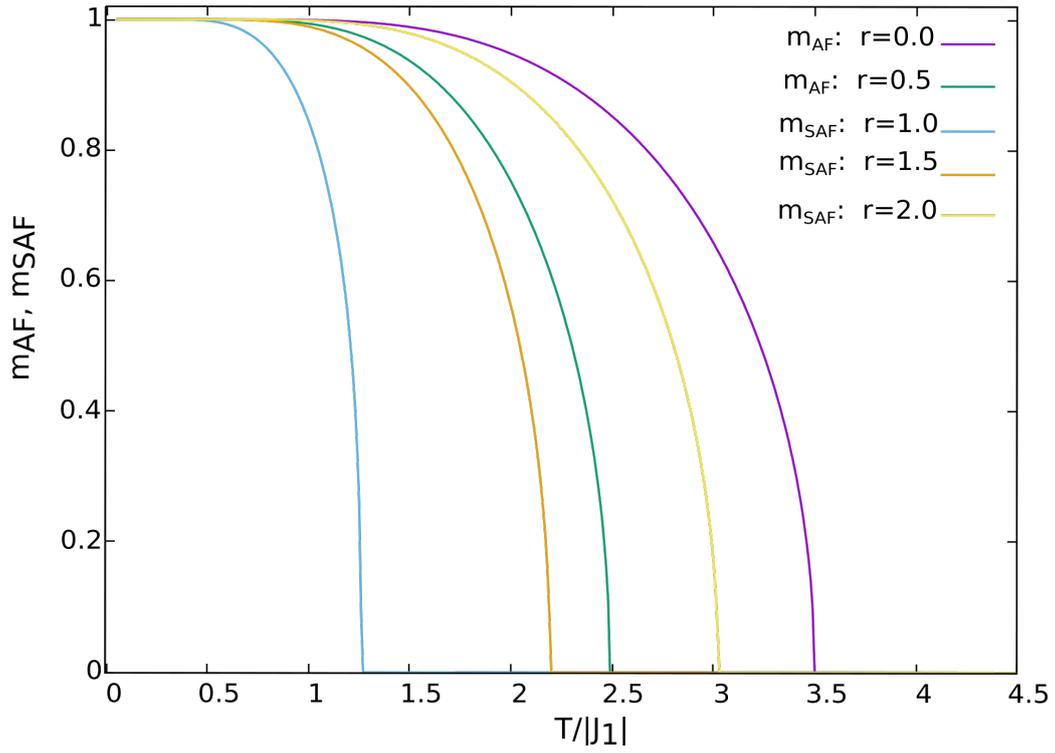


Figura 5.2: Magnetizações m_{AF} e m_{SAF} em função da temperatura $T/|J_1|$ para diferentes valores de $r = J_2/J_1$.

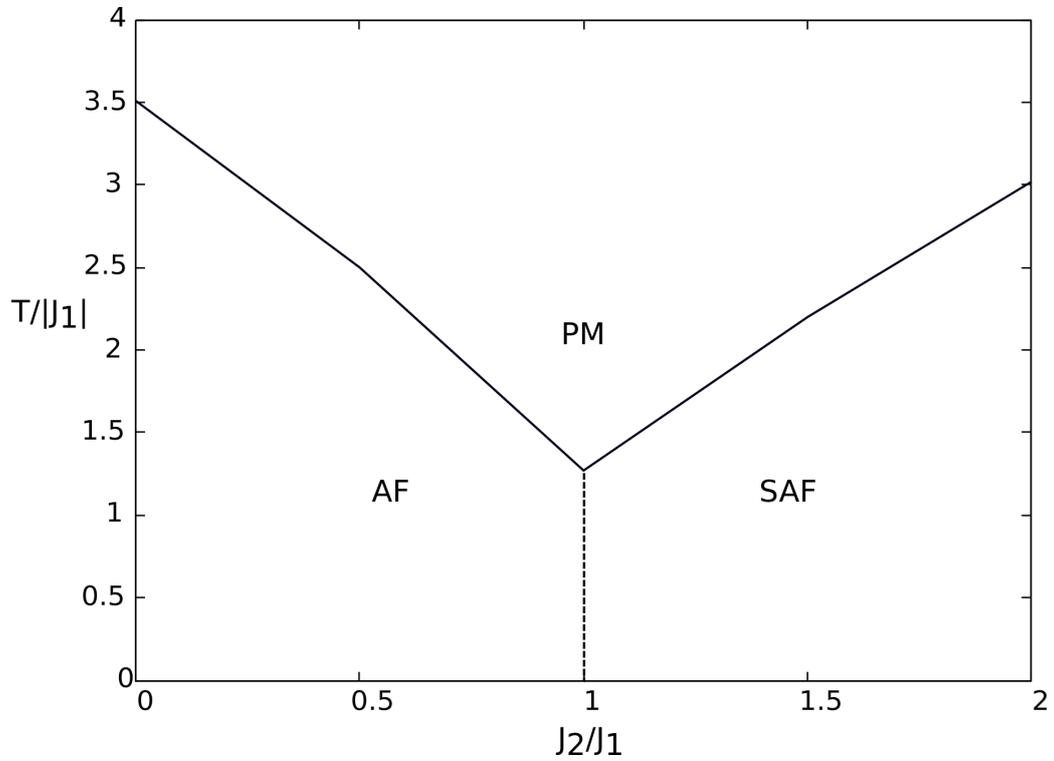


Figura 5.3: Diagrama de fase para rede “checkerboard” sem desordem e com campo externo nulo.

metaestáveis². Nesse caso, uma transição de fase de primeira ordem ocorre.

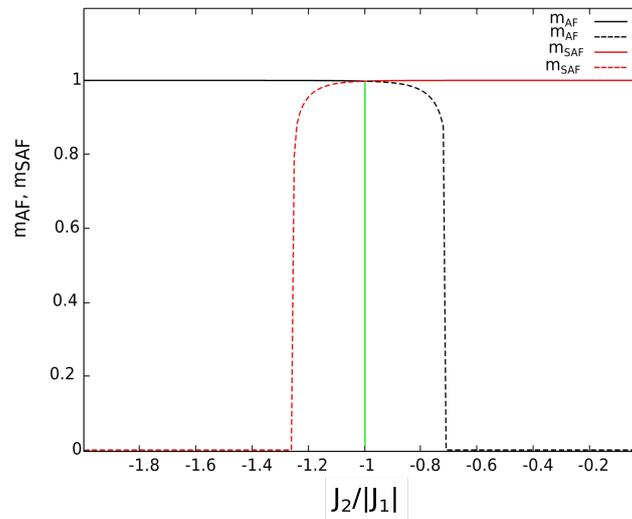


Figura 5.4: Magnetização em função de $J_2/|J_1|$, com $T/|J_1| = 0.5$.

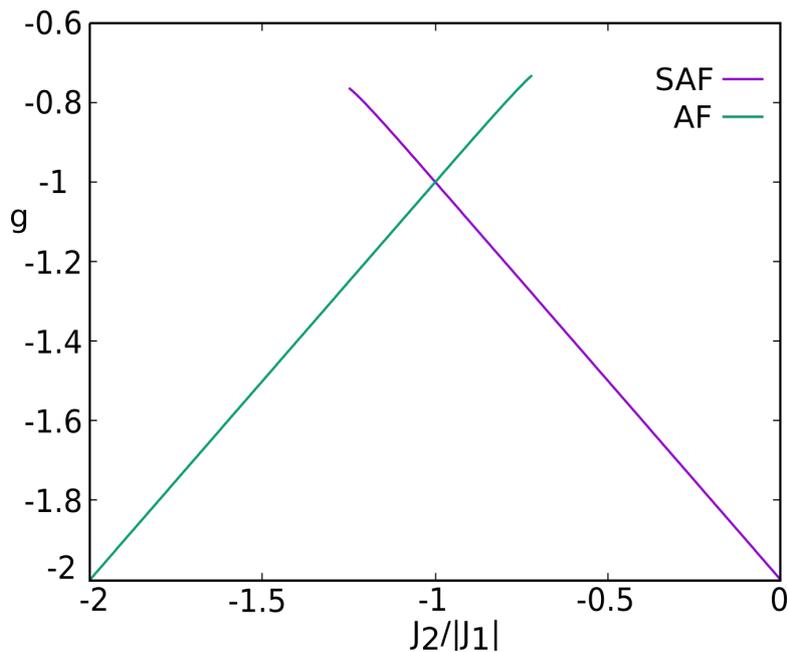


Figura 5.5: Energia livre por spin versus $J_2/|J_1|$, com $T/|J_1| = 0.5$.

Para analisar a transição de fase de primeira ordem que ocorre em temperaturas na região onde $T/|J_1| < 1.0$, fixamos novamente $T/|J_1| = 0.5$, e construímos o gráfico da energia livre versus $J_2/|J_1|$, conforme a figura 5.5. A taxa de crescimento da energia livre para a fase SAF é negativa, ou seja, a mesma aumenta com o decréscimo do parâmetro de frustração geométrica.

²Corresponde a um estado do sistema diferente do estado de menor energia (equilíbrio mais estável)

Já a taxa de crescimento da energia livre para a fase AF é positiva, o que implica que sua energia livre é crescente com o parâmetro de frustração geométrica. Como pode ser observado em $r = 1.0$ as curvas da energia livre para a fase SAF e AF se interceptam. Note que em $r = 1.0$ a frustração geométrica é máxima, ou seja, é o ponto onde a competição entre as interações de spins primeiros e segundos vizinhos é máxima. A linha verde em 5.4 é determinada pelo ponto de encontro das energias livres AF e SAF em 5.5, onde ocorre a transição de fases

5.2 Resultados com Desordem nas Interações

Nesta seção apresentamos os resultados obtidos sob a presença de desordem e frustração geométrica na rede “checkerboard”. Para isto vale lembrar que no modelo adotado a desordem está presente nas interações entre spins primeiros vizinhos (intracluster e interclusters), já a frustração geométrica na rede “checkerboard” surge da competição entre as interações AF de primeiros e segundos vizinhos: $r \rightarrow 1$. É importante destacar que a divisão da rede em clusters é adotada como uma técnica para desacoplar interações e tornar o modelo de muitas interações analiticamente solúvel. Em outras palavras, a presença de clusters é uma abordagem para solucionar o problema e não representa um sistema físico com clusters. Neste sentido avaliamos os efeitos causados pela desordem quando $r = 0.0, 0.5, 1.0, 1.5$ e 2.0 . O hamiltoniano efetivo e a energia livre por spin do modelo adotado estão nas equações (4.36) e (4.35) e, a partir destas, obtemos os resultados numéricos descritos nesta seção. Para efeito de simplicidade, as interações desordenadas são representadas por J , que é o desvio padrão da distribuição de probabilidades de J_{ij} .

Inicialmente desprezamos os efeitos da frustração geométrica ($r = J_2/J_1 = 0.0$), considerando apenas interações desordenadas (J) e AF (J_1) entre primeiros vizinhos. Na figura 5.6 (a) exibimos o comportamento dos campos efetivos m_1, m_2, m_3 e m_4 em função da temperatura para um desordem fixa $J/|J_1| = 1.0$. Observe que os campos efetivos $m_1 = m_3$ e $m_2 = m_4$, além disso $m_1 = m_3 = -m_2 = -m_4$. Isso já era um resultado esperado, pois na região em que o sistema encontra-se na ordem AF os spins se alinham antiparalelamente, ou seja os spins localizados nos sítios 1 e 3 (2 e 4) possuem mesma orientação na fase AF, enquanto os spins localizados nos sítios 1 e 3 possuem orientação contrária aos spins localizados nos sítios 2 e 4, conforme pode ser visualizado na figura 4.3. Para facilitar a compreensão de como os campos efetivos atuam sobre o clusters, a figura 4.3 ilustra a ação dos campos efetivos (indicados por

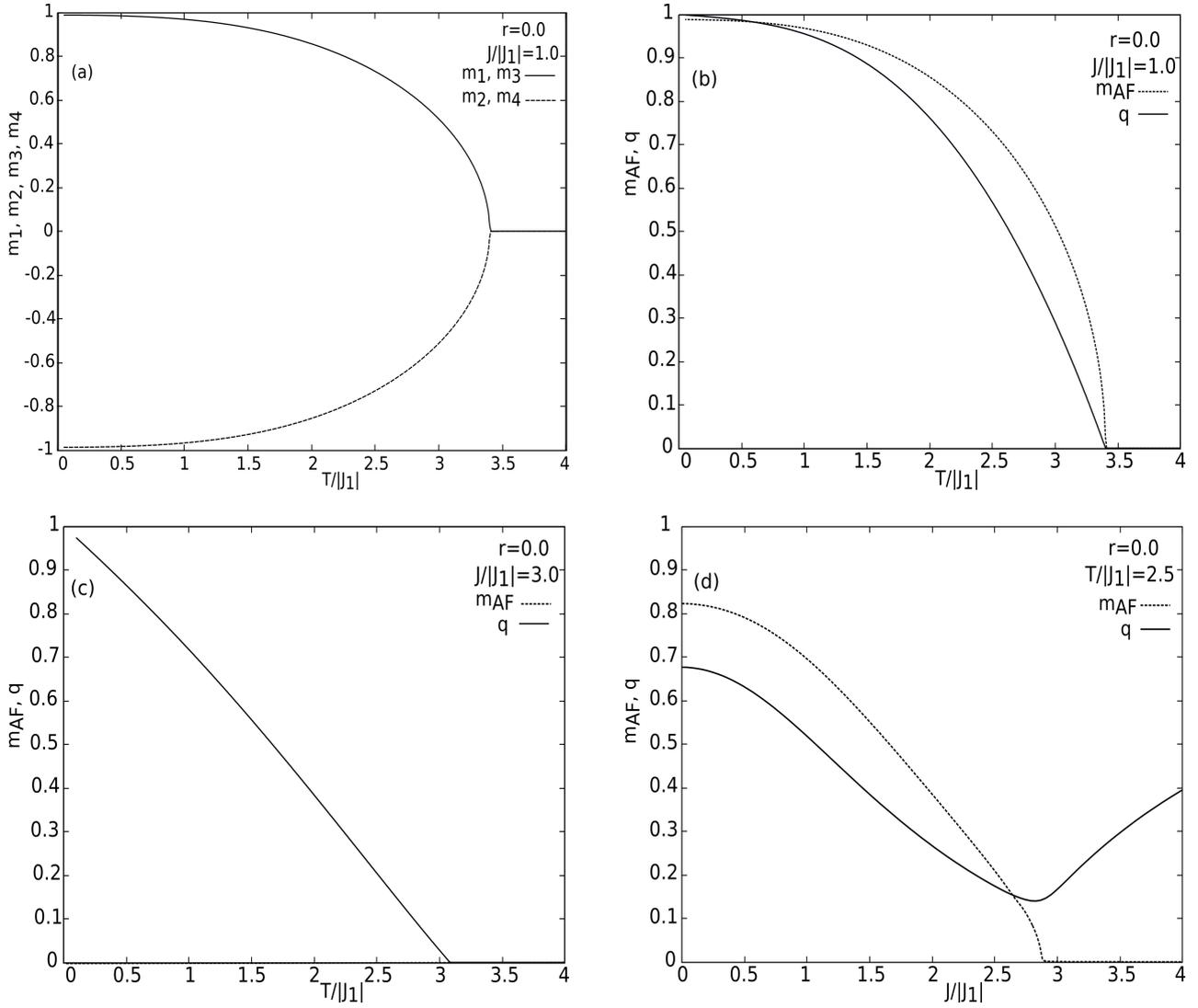


Figura 5.6: Comportamento dos parâmetros de ordem e campos efetivos considerando apenas interações AF entre os spins primeiros vizinhos ($|J_1| = 1$ com $r = 0.0$) em diferentes níveis de desordem. O gráfico (a) ilustra os campos efetivos (m_1, m_2, m_3 e m_4) em função da temperatura ($T/|J_1|$), quando $r = 0.0$ e $J/|J_1| = 1.0$. A figura (b) ilustra o gráfico da magnetização m_{AF} e do parâmetro de ordem VS q em função da temperatura para desordem igual a $J/|J_1| = 1.0$. A figura (c) ilustra os parâmetros de ordem q e m_{AF} em função da temperatura para desordem igual a $J/|J_1| = 3.0$. A figura (d) ilustra o comportamento da magnetização m_{AF} e do parâmetro de ordem q em função da desordem $J/|J_1|$, mantendo constante a temperatura em $T = 2.5$.

setas tracejadas) sobre os spins da fronteira do cluster, onde o cluster central é representado com contorno em negrito³.

Como discutido, na fase AF os spins permanecem alinhados antiparalelamente, o que implica numa magnetização “staggered” m_{AF} (definida na Eq. (5.1)) não nula. Na figura 5.6(b), para os mesmos valores de parâmetros da figura 5.6(a), podemos observar o comportamento de m_{AF} juntamente com q em função da temperatura ($T/|J_1|$), onde q representa o parâmetro de ordem de vidro de spin (VS). Perceba que os parâmetros de ordem m_{AF} e q decrescem com o aumento da temperatura no intervalo de $0 < T/|J_1| < 3.4$ e tornam-se nulos ambos a partir da temperatura $T_N/|J_1| = 3.4$. Logo acima de $T_N/|J_1| = 3.4$, observa-se o sistema na fase PM, já que $q = m_{AF} = 0$ e, logo abaixo, o sistema encontra-se na fase AF, pois m_{AF} e q são não nulos. Vale ressaltar que o parâmetro de ordem q representa o congelamento dos momentos magnéticos, sendo que na fase AF ocorre o congelamento dos spins ($q \neq 0$), porém com m_{AF} indicando a ordem AF de longo alcance. Por outro lado, o sistema se encontra na fase VS quando $q \neq 0$ e $m_{AF} = 0$ [35].

Por exemplo, na figura 5.6 (c) aumentamos a intensidade da desordem presente no sistema para $J/|J_1| = 3.0$ e avaliamos novamente o comportamento dos parâmetros de ordem em função da temperatura ($T/|J_1|$). Observe que a magnetização AF (m_{AF}) é nula para qualquer valor de temperatura e $q \neq 0$ para temperaturas abaixo de 3.08. Isso indica que o sistema encontra-se na fase VS abaixo da temperatura de congelamento $T_f/|J_1| = 3.08$. Para temperaturas superiores a esse valor, o sistema passa a se comportar como PM.

A análise dos efeitos de desordem no comportamento dos parâmetros de ordem m_{AF} e q em baixas temperaturas ($T/|J_1| = 2.5$) pode ser verificada a partir da figura 5.6 (d). Note que na figura 5.6 (d) a magnetização AF se anula para valores acima de $J/|J_1| = 2.87$ e, no entanto, ainda temos $q \neq 0$, o que indica que em $J/|J_1| = 2.87$ o sistema deixa de se comportar como AF e passa a se comportar com VS.

A partir dos resultados apresentados na figura 5.6 podemos mapear as temperaturas de transições de fase: AF para PM, VS para PM ou AF para VS. Note que para o mapeamento completo das temperaturas de transição é necessário avaliar o comportamento dos parâmetros de ordem m_{AF} e q em função da temperatura (desordem) para vários valores diferentes de intensidade de desordem (temperatura) no intervalo de $[0, 4]$ ($[0, 3]$) e o resultado é apresentado na figura 5.7.

³Perceba que em 4.3 deve ser desconsiderado as interações AF entre spins segundos vizinhos na rede “checkerboard”, já que assumimos $J_2 = 0$.

No diagrama de fase apresentado na figura 5.7, podemos observar que a temperatura de transição de fase AF para PM é levemente decrescente conforme aumenta-se a intensidade de desordem no sistema. Já na região em que constatamos a transição de fase VS para PM, vemos que a temperatura de transição de fase é crescente com o aumento da intensidade de desordem. Também percebe-se que a fase VS foi identificada apenas para altos níveis de desordem ($J/|J_1| \geq 2.65$), já a fase PM surge apenas em altas temperaturas ($T/|J_1| > 3.08$). Para baixas intensidades de temperatura e desordem o sistema foi identificado na fase AF. Além disso, todas as transições observadas na figura 5.7 são de segunda ordem.

No modelo SK a temperatura de transição de fase AF para PM se mantém constante para diferentes valores de intensidade de desordem, já no resultado obtido em 5.7 vimos que a temperatura de transição da fase AF para PM decresce levemente conforme o sistema é levado para intensidades de desordem mais intensas [35].

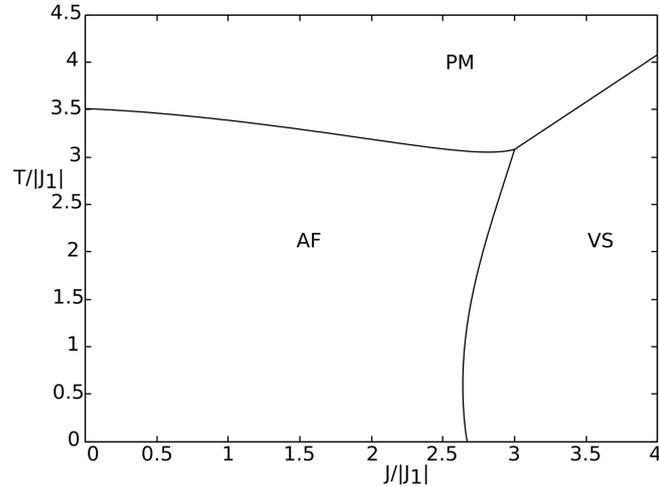


Figura 5.7: Diagrama de fase para a rede “checkerboard”: $T/|J_1|$ versus $J/|J_1|$, com $r = J_2/J_1 = 0.0$.

Seguindo uma análise análoga a que foi feita na figura 5.6, avaliamos na figura 5.8 os efeitos da presença de desordem considerando agora $r = 0.5$. Nesse regime, as interações AF entre spins segundos vizinhos (J_2) não são mais desprezíveis, mas ainda menos intensas que as interações AF entre os spins primeiros vizinhos (J_1). Comparando os resultados das figuras 5.6 e 5.8, podemos observar que quando r passa de 0 para 0.5 os resultados permanecem qualitativamente muito semelhantes, havendo uma leve mudança na localização das temperaturas críticas. Logo, tendo em vista os resultados apresentados na figura 5.8, mapeamos as temperaturas críticas na figura 5.9, onde são exibidas as transições AF para PM, VS para PM e AF para VS quando $r = 0.5$. Novamente, para o mapeamento completo destas temperaturas de transições, avaliamos o

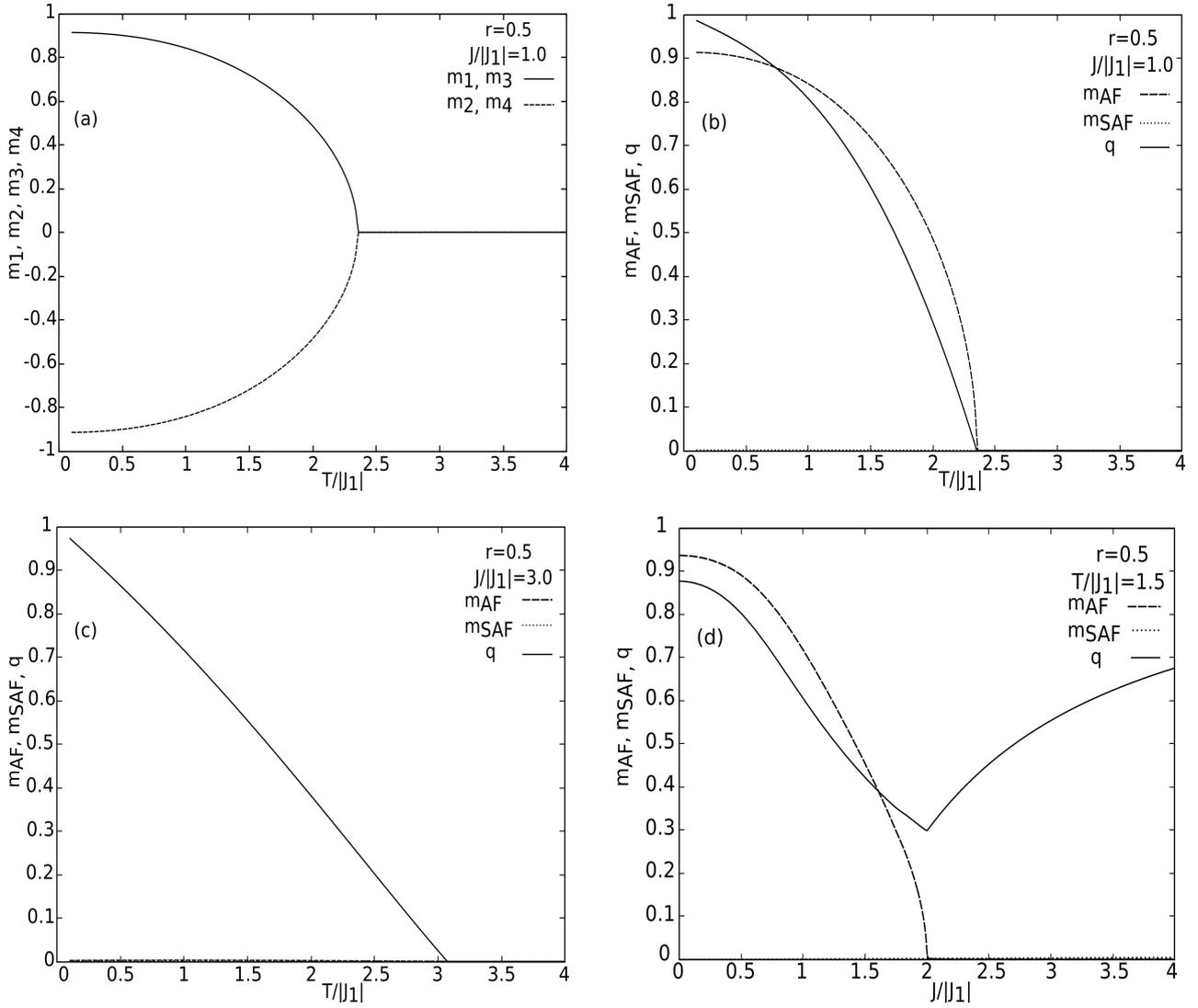


Figura 5.8: Na figura (a) é ilustrado o comportamento dos campos efetivos (m_1, m_2, m_3 e m_4) em função da temperatura ($T/|J_1|$) para a fase AF, adotando $r = 0.5$ e $J/|J_1| = 1.0$. Na figura (b) ilustramos o gráfico dos parâmetros de ordem m_{AF} e q em função da temperatura ($T/|J_1|$), fixando a desordem em $J/|J_1| = 1.0$, no regime em que $r = 0.5$. A figura (c) ilustra o gráfico dos parâmetros de ordem q, m_{AF} e m_{SAF} em função da temperatura ($T/|J_1|$) para uma desordem de $J/|J_1| = 3.0$, no regime em que $r = 0.5$ e neste caso $m_{AF} = m_{SAF} = 0$ para qualquer valor de temperatura. Já na figura (d) ilustramos o comportamento das magnetização m_{AF} e do parâmetro de ordem q em função da desordem $J/|J_1|$, mantendo constante a temperatura em $T/|J_1| = 1.5$ e considerando $r = 0.5$. Note que nas figuras (b), (c) e (d) temos $m_{SAF} = 0$.

comportamento do sistema fixando a temperatura (desordem) e registramos o comportamento do sistema para vários valores distintos de intensidade de desordem (temperatura) no intervalo $[0, 4.0]$ ($[0, 2.13]$).

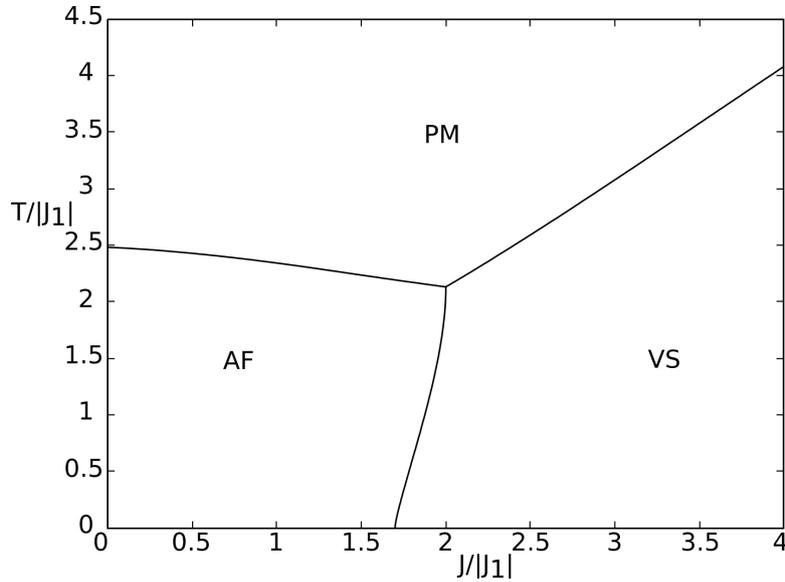


Figura 5.9: Diagrama de fase: $T/|J_1|$ versus $J/|J_1|$, com $r = J_2/J_1 = 0.5$.

Com os resultados obtidos nas figuras 5.7 e 5.9 percebemos que ao considerar também as interações AF entre spins segundos vizinhos a fase VS surge para valores menores de intensidade de desordem. Ou seja, percebe-se que a linha que separa as fase AF e VS em 5.9 está mais próxima do zero (eixo vertical: $T/|J_1|$) do que em 5.7 e isto indica que a transição da fase AF para VS ocorre para intensidades de desordem menores em 5.9.

Note que a linha que marca as transições de fase AF para PM e VS para PM em 5.9 está mais próxima ao eixo horizontal ($J/|J_1|$) do que a mesma linha em 5.7 e isto indica que a fase PM surge para temperaturas menores em 5.9. Além disso, ainda podemos observar que a temperatura T_N ainda permanece levemente decrescente com o aumento da intensidade de desordem e a temperatura T_f é crescente com o aumento de desordem.

Com a análise dos diagramas de fase 5.7 e 5.9 percebe-se que a competição existente entre as interações primeiros vizinhos e segundos vizinhos pode favorecer o aparecimento da fase VS em intensidades de desordem menores. Nesse sentido investigamos agora o caso em que as interações AF entre spins segundos vizinhos são mais intensas que as interações AF entre spins primeiros vizinhos⁴, ou seja, avaliamos o sistema no regime em que o parâmetro de frustração geométrica vale $r = 1.5$. As interações desordenadas entre spins primeiros vizinhos ainda são

⁴Note que em $r > 1$ encontramos a fase SAF na ausência de desordem, conforme ilustra a figura 5.3

consideradas nesta análise.

Deste modo seguindo análise análoga a que foi realizada nas figuras 5.6 e 5.8, avaliamos na figura 5.10 os efeitos da desordem no regime em que as interações AF entre spins segundos vizinhos prevalecem sobre as interações entre spins primeiros vizinhos. Para $r > 1$, o sistema pode encontrar-se na fase SAF ($m_{AF} = 0$ e $m_{SAF} > 0$), pois neste regime as interações entre spins segundos vizinhos são mais intensas e, como já foi discutido na seção anterior para o caso sem desordem, quando o sistema encontra-se na fase SAF os spins segundos vizinhos se alinham antiparalelamente, e portanto o parâmetro de ordem da fase SAF é dado pela magnetização definida na equação 5.2. Os resultados exibidos na figura 5.10 são muito semelhantes qualitativamente aos resultados apresentados nas figuras 5.8, porém com $m_{AF} = 0$ e m_{SAF} podendo ser não nulo, com isso na figura 5.10 mapeamos as temperaturas críticas de transições das fases SAF para PM, SAF para VS ou VS para PM. É importante destacar que a magnetização m_{AF} é nula na figura 5.10.

A partir dos resultados obtidos na figura 5.10 obtemos o diagrama de fase exibido na figura 5.11. Vale lembrar que o estado fundamental SAF apresenta uma estrutura de linhas (ou colunas) de spins ordenados FM, cuja orientação de cada coluna (linha) alterna-se ao longo de toda rede.

Observando a figura 5.11 percebemos que as temperaturas de transição ($T_N/|J_1|$) de fase SAF para PM permanece levemente decrescente com $J/|J_1|$. Já a temperatura de transição de fase VS para PM é crescente com a desordem, assim como foi observado nas figuras 5.7 e 5.9. Também é possível perceber o aparecimento da fase VS para níveis de desordem próximos de $J/|J_1| = 2.0$ abaixo do que foi observado no diagrama de fase 5.7. Logo, como previsto, a competição entre as interações AF entre spins primeiros vizinhos e segundos vizinhos favorece o surgimento da fase VS em níveis de desordem relativamente mais baixos quando comparados com os resultados na ausência dessa competição.

Na busca por investigar qual o papel das interações AF entre spins segundos vizinhos no surgimento da fase VS, aumentamos o parâmetro de frustração geométrica para $r = 2.0$ e repetimos a análise realizada nas figuras 5.10 e 5.11. Os resultados obtidos para $r = 2.0$ são apresentados nas figuras 5.12 e 5.13. Qualitativamente os resultados exibidos nas figuras 5.12 e 5.13 são análogos aos obtidos nas 5.10, 5.11, com a diferença que a fase VS surge para desordens menores quando $r = 1.5$, pois para $r = 2.0$ a fase surgiu para desordens próximas de $J/|J_1| = 2.3$. Logo, percebe-se que não são apenas as interações entre spins segundos vizinhos

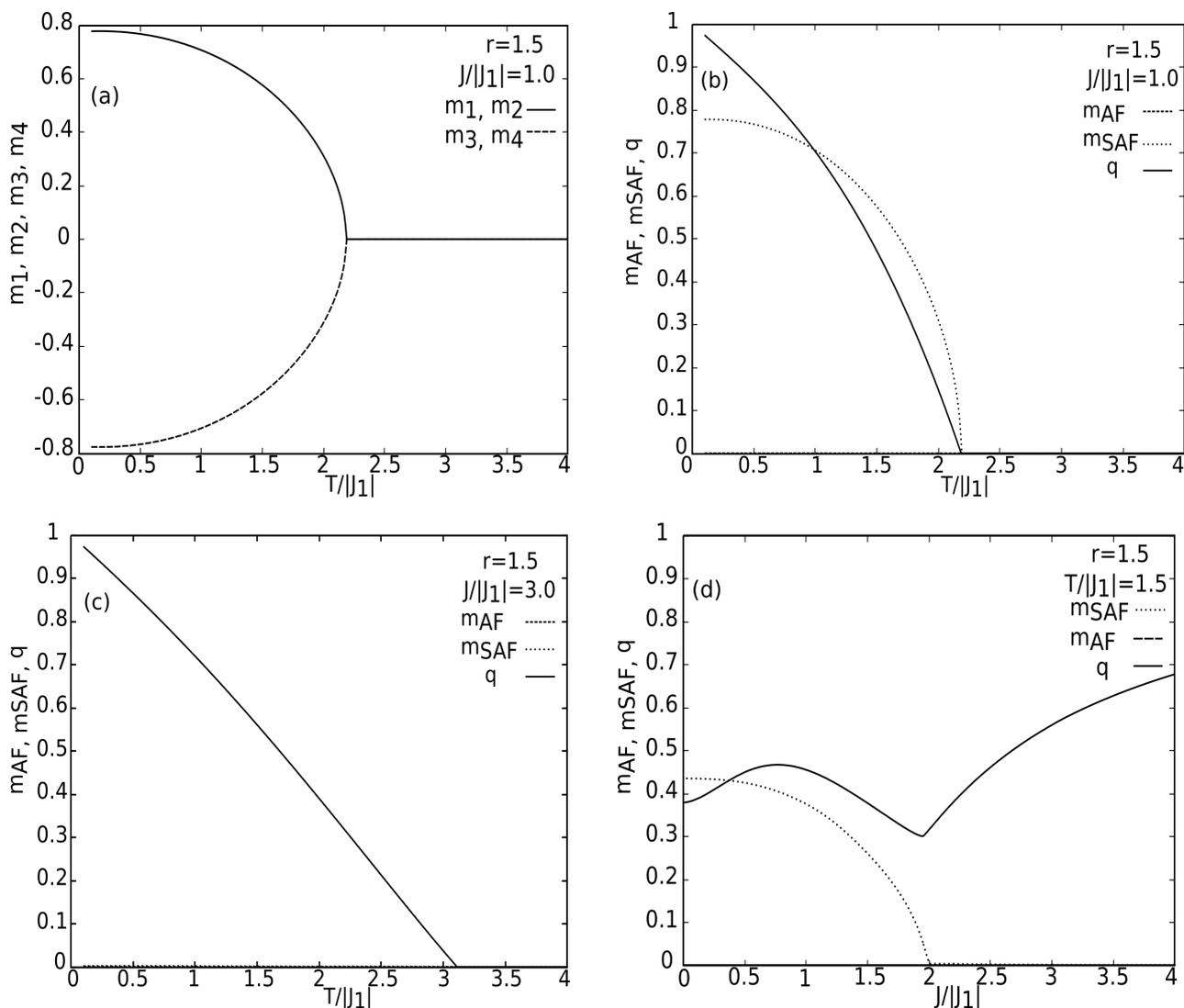


Figura 5.10: Nestes gráficos é avaliado o comportamento do sistema para o caso em que $r = 1.5$. O gráfico (a) ilustra os campos efetivos (m_1, m_2, m_3 e m_4) em função da temperatura ($T/|J_1|$) para a fase SAF, com $J/|J_1| = 1.0$. As figuras (b) e (c) ilustram os gráficos das magnetizações (m_{SAF} e m_{AF}) e do parâmetro de ordem q em função da temperatura ($T/|J_1|$) para intensidades de desordem valendo $J/|J_1| = 1.0$ e $J/|J_1| = 3.0$ respectivamente. Neste último caso tem-se $m_{AF} = m_{SAF} = 0$ para qualquer valor de temperatura. A figura (d) ilustra o comportamento da magnetização m_{SAF} e do parâmetro de ordem q em função da desordem $J/|J_1|$, mantendo constante a temperatura em $T/|J_1| = 1.5$. Observe que nas figuras (b), (c) e (d) temos $m_{AF} = 0$.

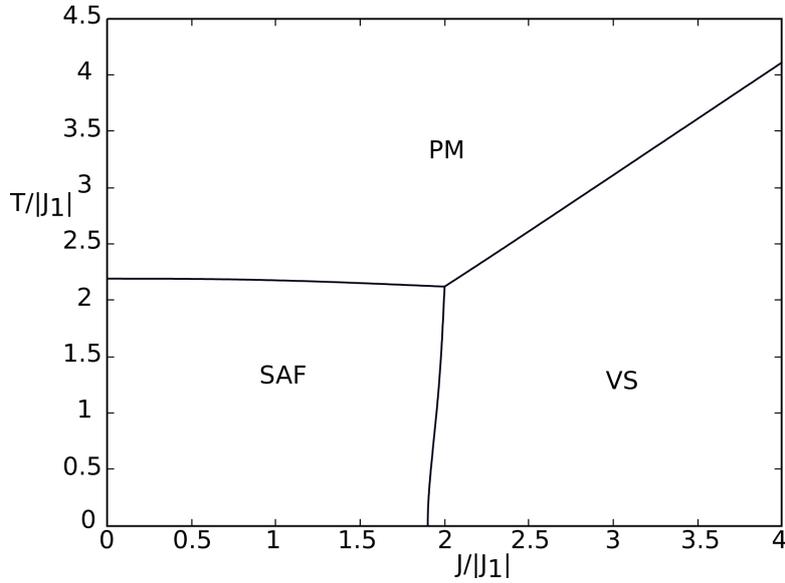


Figura 5.11: Diagrama de fase: $T/|J_1|$ versus $J/|J_1|$, com $r = 1.5$.

que colaboram para o surgimento da fase VS em níveis de desordem mais baixos.

Ainda comparando os resultados obtidos na figura 5.11, com os exibidos na figura 5.13, vemos que as temperaturas de transição de fase SAF para PM ou VS para PM são menores em 5.11.

A próxima etapa é analisar o regime de máxima frustração geométrica em presença de desordem. Nesse sentido, avaliamos o comportamento do sistema no regime com $r = 1.0$ e $J > 0$, onde os resultados são exibidos na figura 5.14. Comparando o resultado da figura 5.14 (b) com os obtidos nas figuras 5.6 (b), 5.8 (b), 5.10 (b) e 5.12 (b) vemos que para o mesmo nível de desordem, $J/|J_1| = 1.0$, a transições da fase AF/SAF para PM ocorre numa menor temperatura ($T_N/|J_1| = 1.3$) quando $r = 1.0$.

Na figura 5.14 (d) podemos observar o comportamento dos parâmetros de ordem m_{AF} , m_{SAF} e q em função da desordem ($J/|J_1|$) para $r = 1.0$ e $T/|J_1| = 1.0$. A partir dos resultados exibidos na figura 5.14 construímos o diagrama de fase para $r = 1.0$, conforme pode ser observado na figura 5.15. É claro que para obter as temperaturas de transição entre as fase SAF/PM, VS/PM e AF/VS foi necessário avaliar a dependência dos parâmetros de ordem m_{AF} , m_{SAF} e q com a temperatura (desordem) para diferentes valores fixos de desordem (temperatura) no intervalo de $[0, 4.0]$ ($[0, 1.3]$).

Analisando o diagrama de fase da figura 5.15 percebemos que no regime de máxima frustração geométrica o sistema apresenta a fase VS nos níveis mais baixos de desordem, ou seja, quando a frustração geométrica é máxima, o nível de desordem para o aparecimento da fase

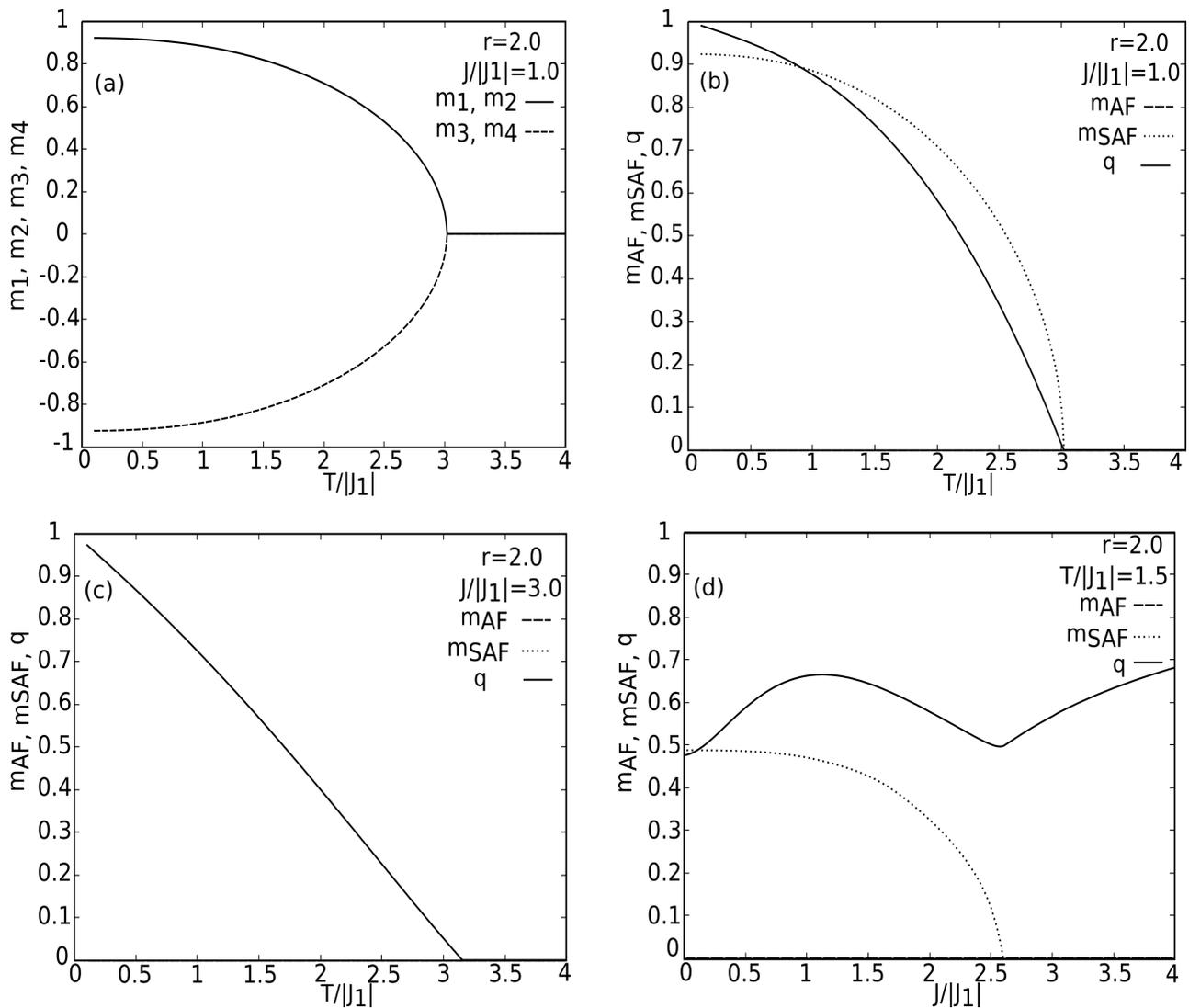


Figura 5.12: Na figura (a) é exibido o gráfico dos campos efetivos (m_1, m_2, m_3 e m_4) versus a temperatura ($T/|J_1|$), quando $r = 2.0$ e $J/|J_1| = 1.0$. Na figura (b) exibimos o gráfico dos parâmetros de ordem m_{SAF} , m_{AF} e q em função da temperatura ($T/|J_1|$) para uma desordem fixa $J/|J_1| = 1.0$, onde $r = 2.0$. Na figura (c) são analisados a dependência com a temperatura dos mesmos parâmetros de ordem analisados na figura (b), porém para uma desordem fixa $J/|J_1| = 3.0$, observar que nesta situação temos $m_{AF} = m_{SAF} = 0$ para qualquer valor de temperatura. Na figura (d) apresentamos o comportamento dos parâmetros de ordem (m_{SAF} , m_{AF} e q) em função da desordem $J/|J_1|$, para uma temperatura fixa $T/|J_1| = 1.5$, ainda no regime em que $r = 2.0$. Note que m_{AF} é nula nos gráficos (b), (c) e (d).

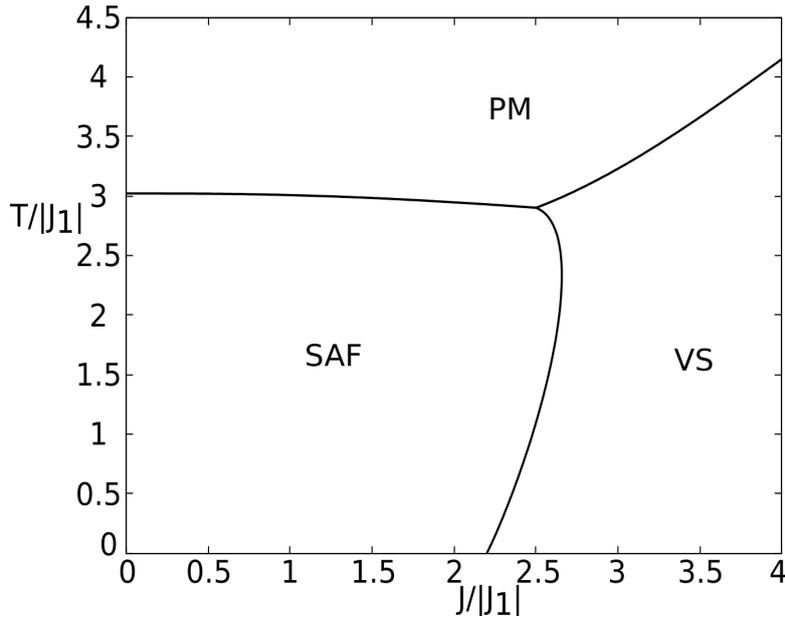


Figura 5.13: Diagrama de fase para a rede “checkerboard”: $T/|J_1|$ versus $J/|J_1|$, com $r = J_2/J_1 = 2.0$.

VS é muito menor do que nos regimes analisados anteriormente. Assim, percebemos que a frustração geométrica potencializa a ação da desordem no sistema, favorecendo o aparecimento da fase VS em baixos níveis de desordem. Além disso, vemos que a temperatura ($T_N/|J_1|$) de transição de fase SAF para PM permanece constante diferente dos diagramas de fase exibidos anteriormente. Também é possível perceber que as temperaturas de transição de fase VS para PM é crescente com a temperatura, resultado análogo aos observados nos diagramas de fase anteriores.

Para efeito comparativo e melhor visualização do aparecimento da fase VS em baixos níveis de desordem na presença de forte frustração geométrica, agrupamos na figura 5.16 os diagramas de fase para $r = 0.0$ (figura 5.7), $r = 0.5$ (figura 5.9), $r = 1.0$ (figura 5.15), $r = 1.5$ (figura 5.11) e $r = 2.0$ (5.13). Note que a fase VS surge nos mais baixos níveis de desordem quando $r = 1.0$, onde também é possível observar que as transições SAF para PM ou PM para VS surgem em temperaturas inferiores as observadas nos demais casos.

Um comportamento que ainda carece de mais observações e uma análise mais cuidadosa é o resultado apresentado para os campos efetivos em função da temperatura ($T/|J_1|$) na figura 5.14 (a), onde $r = 1.0$ e $J/|J_1| = 1.0$. É perceptível que os campos efetivos m_1 e m_2 (m_3 e m_4) não são simétricos em baixas temperaturas quando o sistema encontra-se na ordem SAF, isto é, $m_1 \neq m_2$ ($m_3 \neq m_4$), mas ainda temos $m_1 = |m_3|$ e $m_2 = |m_4|$. Como os campos efetivos m_1 e m_3 (m_2 e m_4) atuantes nos spins da fronteira do clusters possuem sinais contrários e mesmo

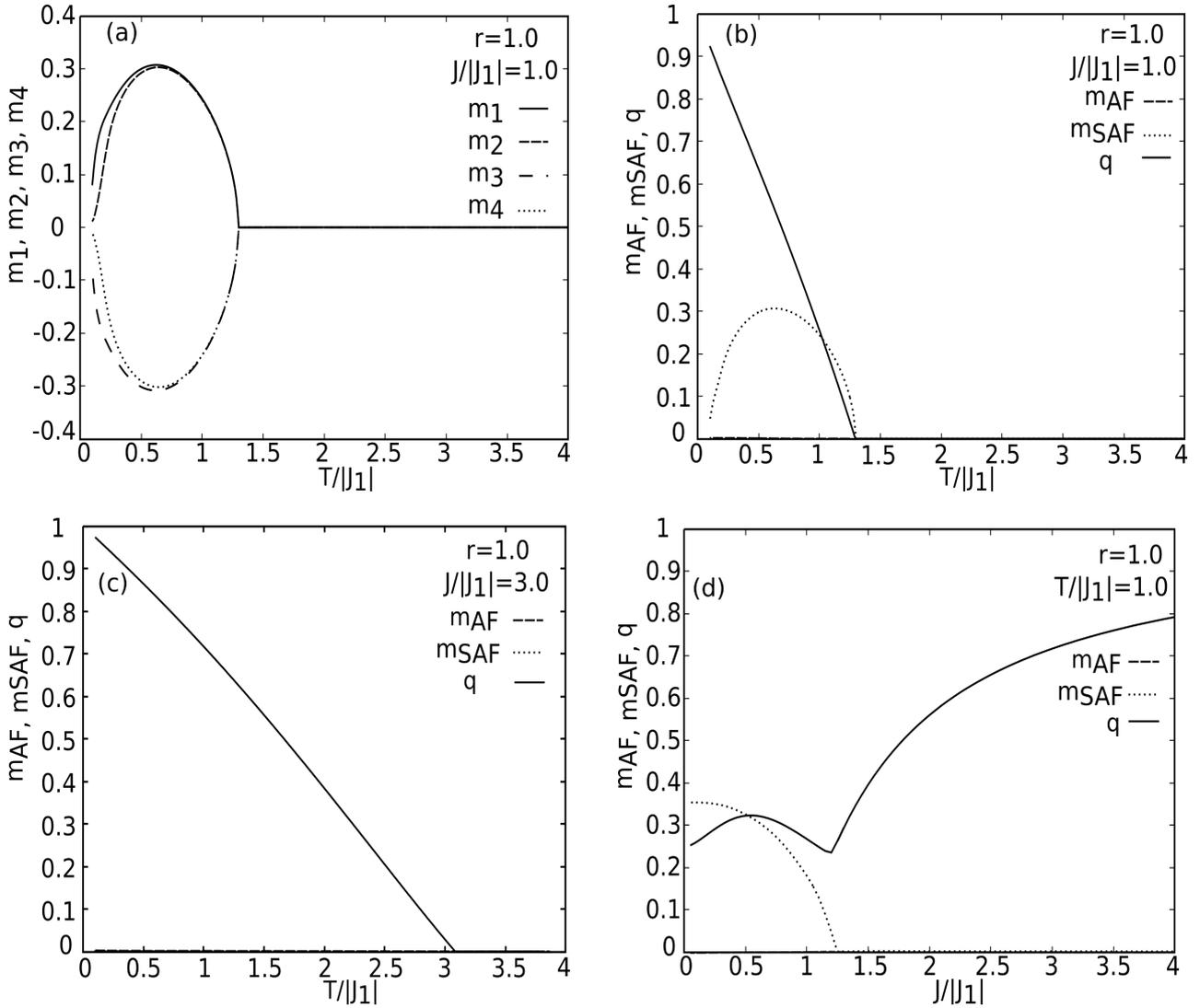


Figura 5.14: Comportamento dos parâmetros de ordem e dos campos efetivos quando $r = 1.0$. A figura (a) ilustra o comportamento dos campos efetivos (m_1, m_2, m_3 e m_4) em função da temperatura ($T/|J_1|$) para a fase SAF, quando $J/|J_1| = 1.0$. A figura (b) ilustra o gráfico das magnetizações (m_{SAF} e m_{AF}) e do parâmetro de ordem q em função da temperatura ($T/|J_1|$) para desordem igual a $J/|J_1| = 1.0$. A figura (c) ilustra o gráfico dos parâmetros de ordem q, m_{AF} e m_{SAF} em função da temperatura ($T/|J_1|$) para desordem valendo $J/|J_1| = 3.0$ e neste caso $m_{AF} = m_{SAF} = 0$ para qualquer valor de temperatura. A figura (d) ilustra o comportamento da magnetização m_{SAF} e do parâmetro de ordem q em função da desordem $J/|J_1|$, mantendo constante a temperatura em $T/|J_1| = 1.0$. Note que m_{AF} é nulo nas figuras (b), (c) e (d).

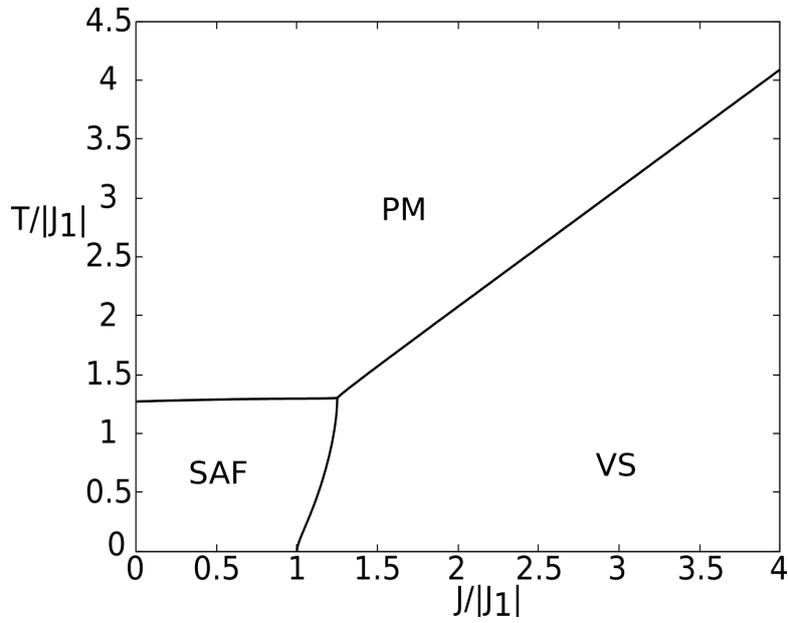


Figura 5.15: Diagrama de fase: $T/|J_1|$ versus $J/|J_1|$, com $r = J_2/J_1 = 1.0$.

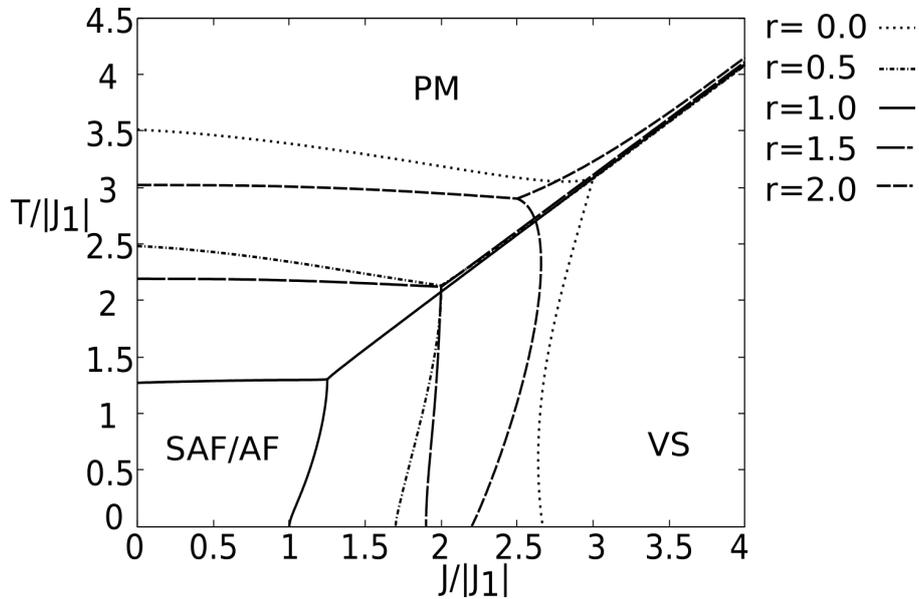


Figura 5.16: Diagrama de fase $T/|J_1|$ versus $J/|J_1|$, para diversos níveis de frustração geométrica: $r = 0.0, 0.5, 1.0, 1.5$ e 2.0 . As linhas sólidas são para delimitar as transições de fases quando $r = 1$. As ordens AF e SAF são encontradas em $J/|J_1| \rightarrow 0$ para $r < 1$ e $r \geq 1$, respectivamente. A legenda no canto superior direito indica o correspondente parâmetro de frustração geométrica com o respectivo diagrama de fase.

valor em módulo, percebemos que o sistema ainda encontra-se na ordem SAF no regime de baixas temperaturas, mas no entanto $m_1 \neq m_2$ ($m_3 \neq m_4$). Deste modo, há fortes indícios que devido a desordem térmica há uma quebra da estrutura de sub-rede na ordem SAF em baixas temperaturas. Além disso, observamos a quebra de estrutura de sub-rede apenas quando o sistema passou a comportar-se como SAF ($r \geq 1.0$).

Para ilustrar a quebra de estrutura de sub-rede em baixas temperaturas na fase SAF observe a figura 5.17, note que os spins obedecem o alinhamento da ordem SAF formando-se linhas com mesma orientação. Na figura 5.17, o cluster central da rede “checkerboard” está indicado com um contorno em negrito, as interações AF intracluster entre spins primeiros e segundos vizinhos são indicadas pelas linhas em negrito, enquanto que a ação dos campos efetivos sobre os spins da fronteira do cluster estão indicadas pelas linhas tracejadas. Já as setas em azul representam o momento magnético resultante da ação dos campos efetivos e como pode ser observado apesar dos spins localizados nos sítios 1 e 2 (3 e 4) possuem mesma orientação, os mesmos possuem momentos magnéticos com magnitudes diferentes, já que $m_1 \neq m_2$ ($m_3 \neq m_4$). Assim, na figura 5.17 está ilustrado o sistema cujo os spins ainda se alinham SAF, porém havendo a quebra da estrutura de sub-rede na ordem SAF.

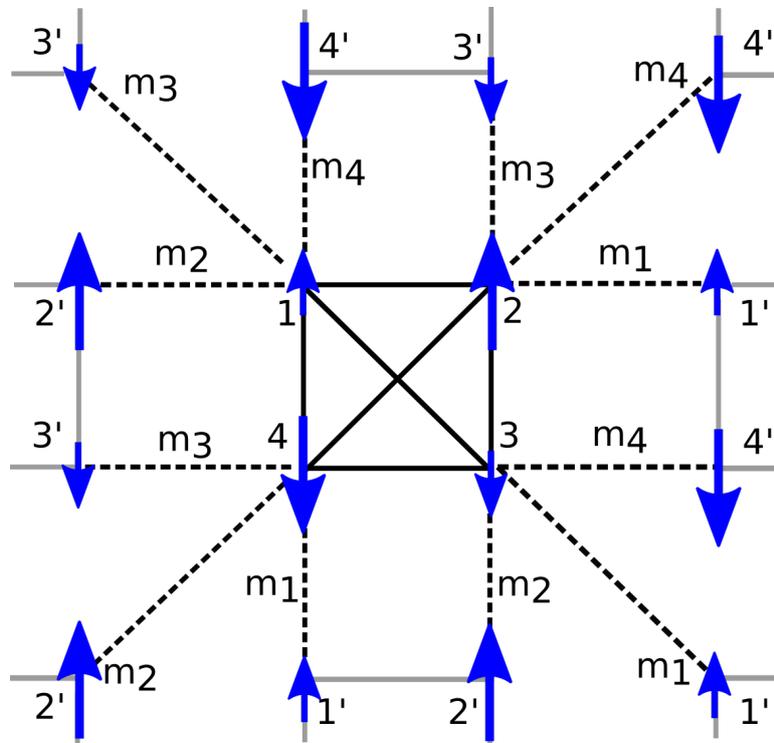


Figura 5.17: Representação esquemática da rede “checkerboard” no regime SAF em baixas temperaturas, onde a desordem possui magnitude próxima do parâmetro de frustração geométrica.

Para confirmar a quebra de estrutura de sub-rede na fase SAF em baixas temperaturas analisamos nos gráficos da figura 5.18 a dependência dos campos efetivos (m_1 , m_2 , m_3 e m_4) com a temperatura para diferentes valores de desordem ($J/|J_1| = 1.0$, $J/|J_1| = 2.0$ e $J/|J_1| = 2.2$) fixando $r = 2.0$. Comparando os resultados obtidos nas figuras 5.18 (a), (b) e (c) vemos que só houve quebra da estrutura de sub-rede nos gráficos (b) e (c), quando $J/|J_1| = 2.0$ e $J/|J_1| = 2.2$, com $r = 2.0$. Vale ressaltar, que ocorreu a quebra de estrutura de sub-rede apenas no regime

de baixas temperaturas.

Na figura 5.18 (d) construímos o gráfico dos campos efetivos (m_1, m_2, m_3 e m_4) em função da desordem ($J/|J_1|$) para uma temperatura fixa de $T/|J_1| = 0.5$, com o parâmetro de frustração geométrica ainda valendo $r = 2.0$. Percebe-se que na figura 5.18 (d) há uma leve quebra da estrutura de sub-rede nas regiões de desordem próxima de $J/|J_1| = 2.0$. Deste modo, com os resultados apresentados em 5.18 percebemos que há fortes indícios que está quebra de estrutura de sub-rede ocorre apenas em baixas temperaturas, com $J_2 \geq J_1$ e $J/|J_1| \simeq J_2$, mas ainda é necessário maior investigação das causas desta quebra de estrutura de sub-rede observada na fase SAF em baixas temperaturas para desordens próximas do parâmetro de frustração geométrica. Por exemplo, esse efeito pode ocorrer devido à quebra da simetria de réplicas, que ainda não foi avaliado nesse problema. Para fazer isso, necessitamos ir além dos resultados com simetria de réplicas, adotando um passo de quebra da simetria de réplicas [4].

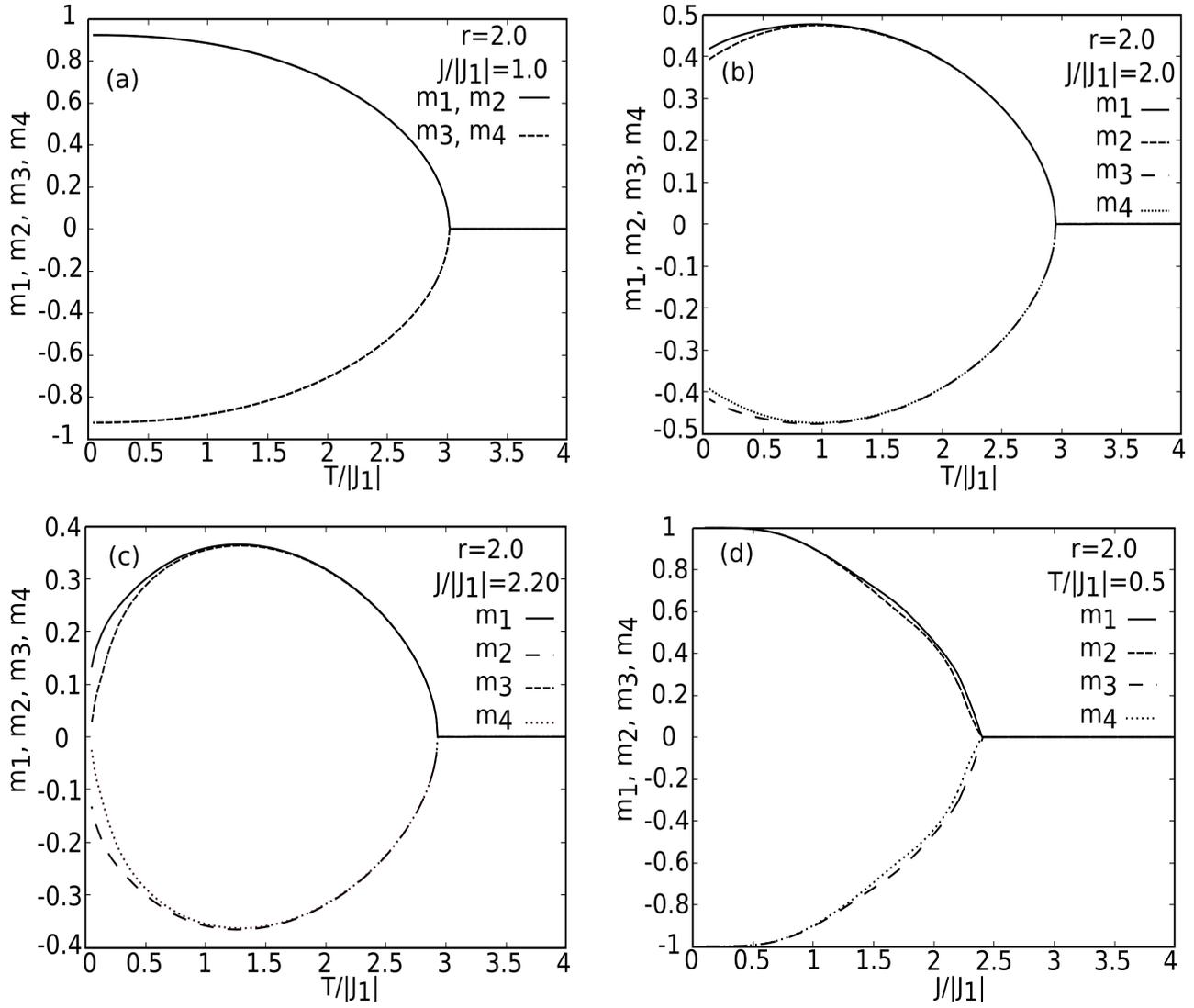


Figura 5.18: As figuras (a), (b) e (c) ilustram o comportamento dos campos efetivos (m_1, m_2, m_3 e m_4) em função da temperatura ($T/|J_1|$) para a fase SAF, quando a desordem vale $J = 1.0$, $J = 2.0$ e $J = 2.20$ respectivamente, em ambos os gráficos o parâmetro de frustração geométrica assume o valor $r = 2.0$. A figura (d) ilustra o comportamento dos campos efetivos em função da desordem ($J/|J_1|$) para uma temperatura fixa de $T/|J_1| = 0.5$.

5.3 Suscetibilidade Magnética

Como foi discutido no capítulo 1, podemos utilizar o fator de frustração $f = \frac{|\theta_{CW}|}{T_c}$ que permite quantificar a frustração geométrica no sistema [5], assim quanto maior o fator f , mais frustrado o sistema é. Os fatores T_c e θ_{CW} representam a temperatura crítica e a constante de Curie Weiss, respectivamente. Vale lembrar que, no nosso caso, T_c é o T_N que marca a transição da fase AF para PM (ou vice-versa). Ambos os valores, T_N e θ_{CW} , podem ser obtidos a partir do gráfico do inverso da suscetibilidade magnética em função da temperatura.

A primeira análise do comportamento do inverso da suscetibilidade magnética em função da temperatura é realizada desprezando-se os efeitos da desordem ($J/|J_1| = 0.0$), que é exibido na figura 5.19 para vários valores de r . Por exemplo, na figura 5.19 (a), $r = J_2/J_1 = 0.0$ o que representa o regime onde há apenas as interações AF entre spins primeiros vizinhos no sistema. Perceba que a temperatura de Néel indicada no gráfico assume o valor $T_N = 3.5$, enquanto que a constante de Curie Weiss que é obtida extrapolando-se a curva de $1/\chi$ de altas temperaturas na fase PM, vale $\theta_{CW} = -4.30$. Deste modo o fator de frustração para o regime em que $r = 0.0$ e $J/|J_1| = 0.0$ é $f = \frac{|\theta_{CW}|}{T_N} = 1.22$. Este resultado pode ser avaliado de forma positiva, pois como estamos analisando o comportamento do sistema na ausência de frustração e sabe-se que nesta situação é previsto um fator de frustração em torno de 1 [5].

No gráfico 5.19 (b) repetimos a análise realizada no gráfico 5.19 (a), porém agora considerando também as interações AF entre spins segundos vizinhos ($J_2 \neq 0$). Na figura 5.19(b) o sistema ainda encontra-se no regime em que as interações AF entre spins primeiros vizinhos prevalecem sobre as interações AF entre spins segundos vizinhos ($J_2 < J_1 \implies r = J_2/J_1 = 0.5$). A primeira diferença a ser destacada na figura 5.19 (b) em relação a figura 5.19 (a) é a redução da temperatura crítica ($T_N = 2.50$), além disso o fator de frustração apresenta um pequeno aumento $f = \frac{|\theta_{CW}|}{T_N} = 2.08$, indicando a presença de frustração no sistema.

Na figura 5.19(c) é feita uma investigação análoga a realizada nos gráficos 5.19 (a) e (b), porém no regime de máxima frustração geométrica ($r = J_2/J_1 = 1.0$). Comparando, os resultados exibidos nas figuras 5.19 (a), (b) e (c) percebe-se que no regime de máxima frustração geométrica ($r = J_2/J_1 = 1.0$) o sistema apresenta a menor temperatura crítica ($T_N = 1.29$), além de apresentar o maior valor para o fator de frustração $f = \frac{|\theta_{CW}|}{T_N} = 5.0$, evidenciando a presença de forte frustração geométrica no regime em que $r = J_2/J_1 = 1.0$.

Nosso último resultado para o comportamento do inverso da suscetibilidade, com desordem desprezível é exibido no gráfico 5.19 (d), onde o sistema encontra-se no regime ($r = J_2/J_1 = 2.0$)

em que as interações AF entre spins segundos vizinhos passam a prevalecer sobre as interações AF entre spins primeiros vizinhos ($J_2 > J_1$). É importante destacar que a temperatura crítica no regime em que $r = 2.0$ é superior a exibida no gráfico 5.19 (c) e o fator de frustração para o regime em que $r = 2.0$ fica em $f = 2.95$, sendo inferior ao apresentado na figura 5.19 (c). Também é importante salientar que $T_N = 3.0$ é a temperatura de transição de fase SAF para PM (ou vice-versa), já que análise reside no regime $J_2 > J_1$ (ou seja, $r = J_2/J_1 = 2.0$). Portanto, é nítido que a frustração pode conduzir o sistema magnético para temperaturas críticas mais baixas conforme pode ser observado nas figuras 5.19.

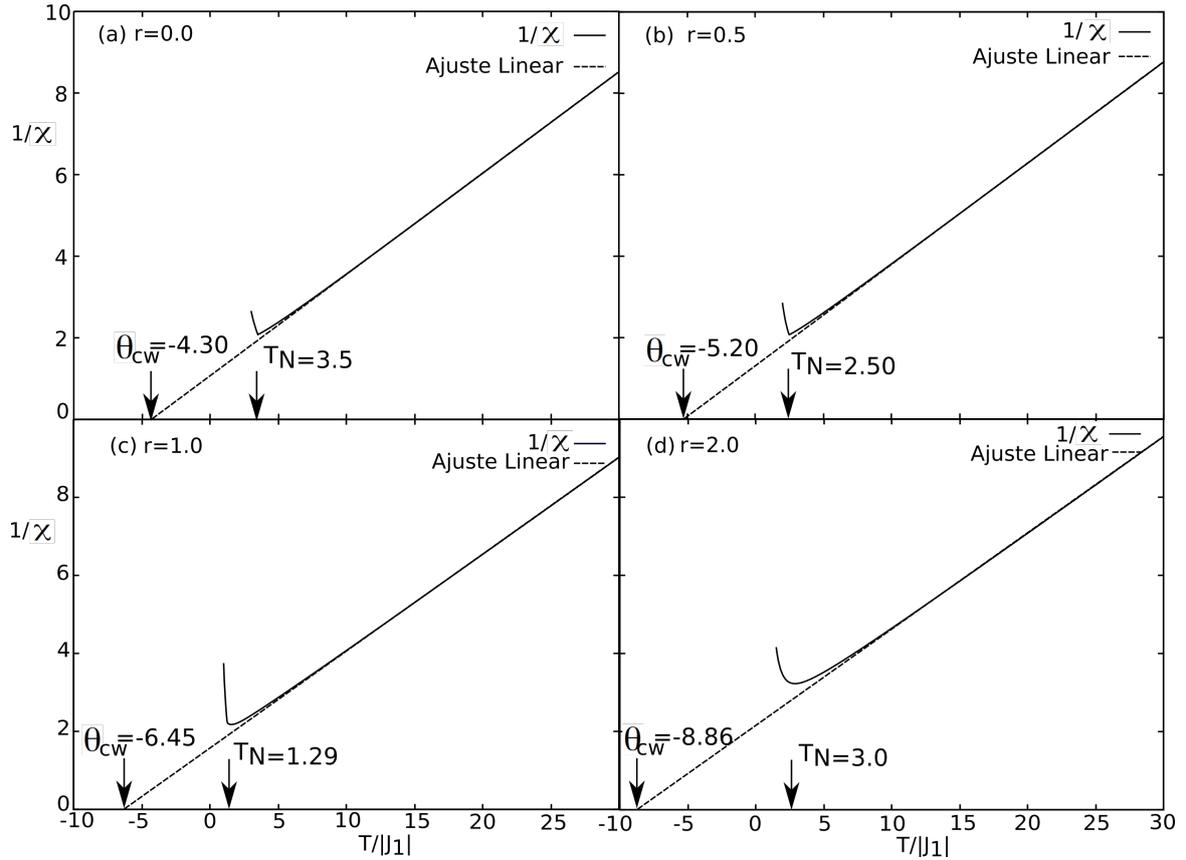


Figura 5.19: Inverso da suscetibilidade magnética ($1/\chi$) versus temperatura ($T/|J_1|$) para diversos níveis de frustração geométrica $r = 0.0, 0.5, 1.0$ e 2.0 , com desordem desprezível ($J/|J_1| = 0.0$). A curva sólida representa o comportamento do inverso da suscetibilidade magnética em função da temperatura, enquanto que a linha tracejada é o ajuste linear realizado para a curva sólida no trecho em que o sistema encontra-se na fase PM. A temperatura T_N é temperatura da transição de fase AF/SAF para PM (ou vice-versa). A constante θ_{CW} é obtida ao realizar o ajuste linear, determinando o ponto de encontro do ajuste linear com o eixo horizontal ($T/|J_1|$).

O próximo resultado exibido na figura 5.20 é obtido sob a presença de desordem, isto é, realizamos uma análise análoga a que foi feita para a figura 5.19, mas considerando agora $J/J_1 = 1.0$. Assim, as interações desordenadas entre spins primeiros vizinhos não são mais

desprezíveis. Percebe-se que os resultados em 5.20 permanecem qualitativamente muito semelhantes aos exibidos na figura 5.19, havendo uma leve mudança nas temperaturas críticas. É relevante destacar que assim como foi observado no regime com desordem desprezível, a menor temperatura crítica também foi alcançada no regime de máxima frustração $r = 1.0$.

Considerando a desordem nas interações entre spins primeiros vizinhos, o maior fator de frustração geométrica também foi observado no regime de máxima frustração ($f = \frac{|\theta_{CW}|}{T_N} = 5.47$). Note que o fator de frustração foi superior considerando a desordem nas interações, já que desprezando a mesma, havíamos obtido $f = 5.0$.

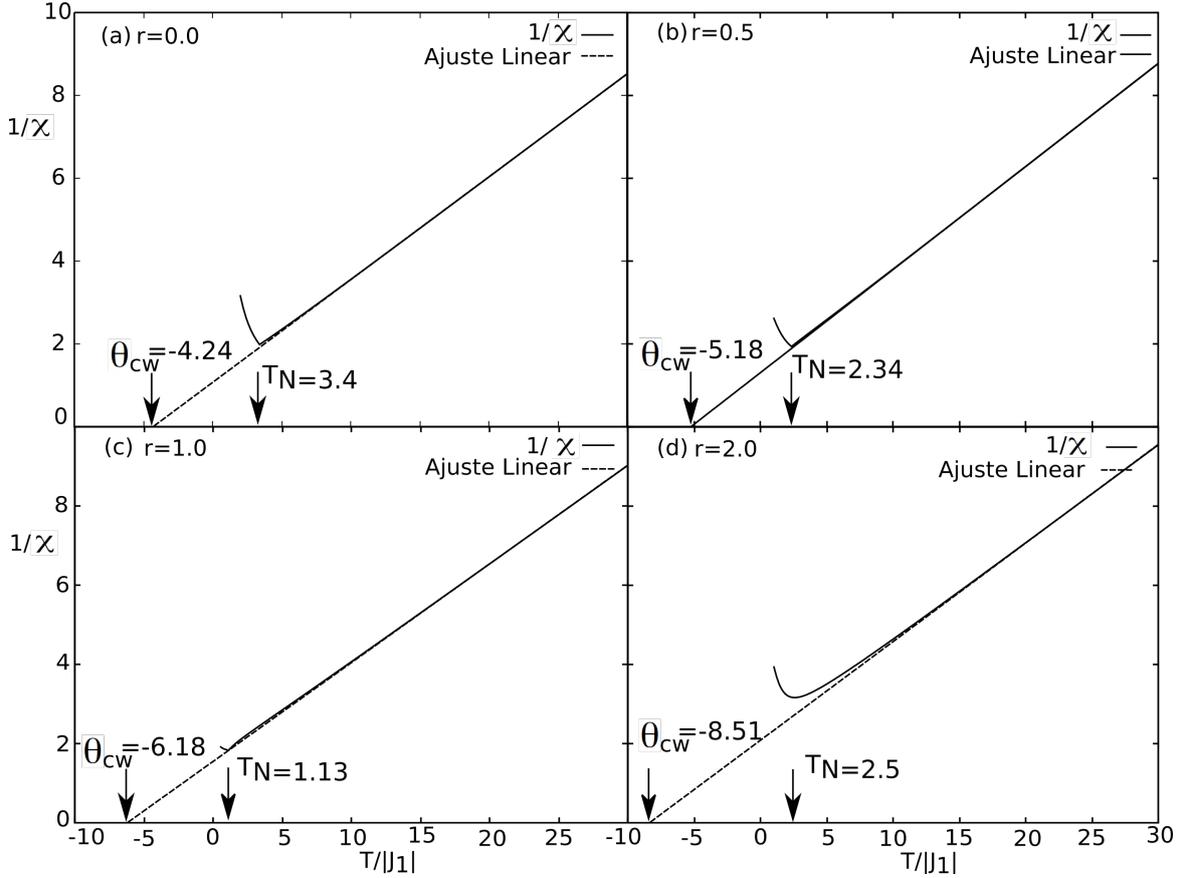


Figura 5.20: Inverso da suscetibilidade magnética ($1/\chi$) versus Temperatura ($T/|J_1|$) para diversos níveis de frustração geométrica $r = 0.0, 0.5, 1.0$ e 2.0 , com uma desordem fixa em $J/|J_1| = 1.0$. A curva sólida representa o comportamento do inverso da suscetibilidade magnética em função da temperatura, enquanto que a linha tracejada é o ajuste linear realizado para a curva sólida no trecho em que o sistema encontra-se na fase PM. A temperatura T_N é temperatura de transição de fase AF/SAF para PM (ou vice-versa). A constante θ_{CW} é obtida ao realizar o ajuste linear, determinando o ponto de encontro do ajuste linear com o eixo horizontal ($T/|J_1|$).

O último resultado exibido nesta seção ilustra o comportamento da suscetibilidade magnética (χ) versus Temperatura ($T/|J_1|$) para um regime de alta desordem, conforme pode ser visu-

alizado na figura 5.21 em que $r = 1.0$ e $J/|J_1| = 3.0$. Neste resultado, tivemos como foco determinar o comportamento de χ na temperatura de transição de fase VS para PM. É importante salientar que de fato a temperatura de transição de fase VS para PM foi identificada como sendo $T_f = 3.09$, resultado este que é confirmado nas análises descritas na seção anterior (gráfico 5.14), onde também foi investigado o comportamento do sistema no regime em que $r = 1.0$ e $J/|J_1| = 3.0$.

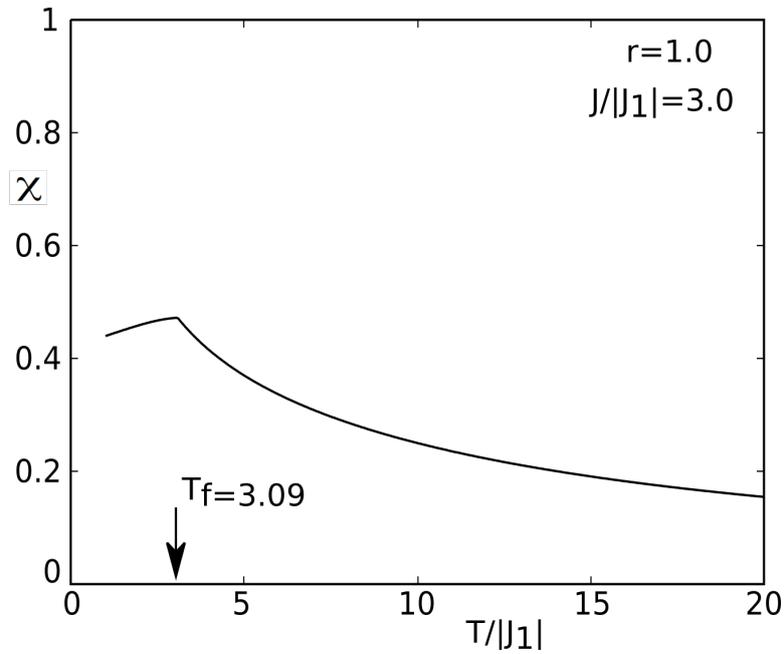


Figura 5.21: Suscetibilidade magnética (χ) versus Temperatura ($T/|J_1|$) com $r = 1.0$ e $J/|J_1| = 3.0$. A temperatura T_f marca a transição de fase VS para PM (ou vice-versa).

Capítulo 6

Considerações Finais

Neste trabalho discutimos sistematicamente os efeitos da desordem em um sistema geometricamente frustrado, adotando a rede “checkerboard” como objeto de estudo. Na rede “checkerboard” consideramos interações AF entre spins primeiros J_1 e segundos J_2 vizinhos e também admitimos interações desordenadas entre os spins primeiros vizinhos. O intuito de considerar interações AF entre spins primeiros e segundos vizinhos foi introduzir uma competição nas interações que pode levar a frustração (geométrica), sendo essa controlada pela relação entre as interações J_1 e J_2 . Além dessa frustração geométrica, outra fonte de frustração pode surgir devido às interações desordenadas. Os efeitos dessa relação entre desordem e frustrações na presença de ordens magnéticas que é o objeto principal de estudos deste trabalho.

Para resolver esse problema, dividimos a rede em N_{cl} clusters idênticos, com $n_\sigma = 4$ spins em cada cluster. Deste modo, as interações foram divididas em dois grupos: o primeiro com interações intracluster e o segundo com interações intercluster. Obtemos a energia livre do sistema adotando o método das réplicas (simetria de réplicas) em conjunto com uma abordagem variacional para a teoria de campo médio com clusters para tratar as interações intercluster. Nesta introduzimos os parâmetros variacionais para as interações interclusters, recaindo em um problema efetivo de um único cluster. É imprescindível salientar que as interações intracluster são calculadas exatamente por meio de enumeração exata.

Desprezando os efeitos da desordem nas interações, avaliamos o sistema somente com interações antiferromagnéticas. Nesta primeira análise encontramos as soluções PM, AF e SAF, que dependem das configurações assumidas pelos parâmetros J_1 , J_2 e T . Por exemplo, a fase AF é obtida quando a relação $r = J_2/J_1$ é menor do que 1, enquanto que a fase SAF é obtida em $r > 1$, sendo a fase PM encontrada em temperaturas suficientemente altas. Vale destacar

que no diagrama de fases obtido, as temperaturas de transição PM/AF e PM/SAF diminuem à medida em que a competição entre as interações J_1 e J_2 aumenta ($r \rightarrow 1$), caracterizando uma forte frustração geométrica (frustração geométrica é máxima em $r = 1$). Assim, percebe-se uma redução da temperatura crítica no regime de $r = 1.0$ e já é possível ver o papel que a frustração geométrica pode desempenhar sobre sistema, mesmo quando a desordem é desprezada.

Considerando a desordem J em competição com as interações AF, o panorama descrito acima é modificado, podendo ocorrer uma fase VS em desordens suficientemente fortes. Nesse caso, os diagramas de fase exibem a ordem AF ($r < 1.0$) ou SAF ($r > 1.0$) em baixas intensidades de J , sendo a fase VS encontrada em altas intensidades de J , onde o sistema sofre uma transição AF/VS ou SAF/VS. Interessantemente, admitindo a presença simultânea de desordem e frustração geométrica, notamos o aparecimento da fase VS em níveis mais baixos de desordem, sendo que o sistema apresenta a fase VS no nível mínimo de desordem na região de forte frustração geométrica ($r = 1.0$).

Contudo, percebe-se que a ação da desordem é potencializada pela presença da frustração geométrica no sistema, contribuindo para o surgimento da fase VS em níveis mais baixos de desordem. Além disso, as menores temperaturas de transição de fase AF/SAF para PM foram verificadas no regime em que $r = 1.0$ e esta permaneceu constante, diferindo dos demais regimes ($r = 0.0, 0.5, 1.5$ e 2.0). Quando $r = 1.0$ e $J > 0$ o sistema apresentou a ordem SAF para valores de desordem inferior a $J \cong 1.0$, a partir deste valor de desordem o sistema exibe a fase VS.

Nossa investigação pelo aparecimento da fase VS em baixos níveis de desordem foi motivada por resultados experimentais que mostram a fase VS em níveis de desordem muito pequenos [9, 10, 11]. Nesse sentido, nossos resultados corroboram esse cenário em que a fase VS ocorre em intensidades de desordem bem menores na presença de frustração geométrica quando comparado a intensidade de desordem esperada para a fase VS aparecer em sistemas desordenados convencionais sem frustração geométrica.

É relevante destacar que há outras abordagens que possibilitam identificar a fase VS em baixos níveis de desordem, como por exemplo as propostas desenvolvidas nas referências [13, 14, 15, 16, 17], onde a desordem está presente nas interações entre os momentos magnéticos dos clusters e deste modo, o aparecimento da fase VS em baixos níveis de desordem é justificado pela presença dos clusters, que atuam como unidade que potencializam as interações desordenadas [16]. Mas no presente trabalho não há interações entre clusters para potencializar a ação de desordem, mas há uma coexistência de interações desordenadas e de interações AF entre spins

primeiros e segundos vizinhos. Portanto, o agente potencializador da desordem na abordagem sugerida por este trabalho é a frustração geométrica, e com isso verificamos a fase VS em níveis de baixa intensidade de desordem.

Com relação as perspectivas futuras pretendemos realizar a quebra de simetria de réplicas. Onde ao invés de utilizar um único parâmetro q como na solução de simetria de réplicas, é usado uma função $q(x)$ contínua e monotonicamente crescente no intervalo $[0, 1]$ para descrever a fase de baixas temperaturas, ou seja, são utilizados infinitos parâmetros [35]. Pretendemos também implementar a análise da estabilidade de Almeida-Thouless para a solução com quebra de simetria de réplica, identificando de certo modo o quão boa é a solução com quebra de simetria de réplica. Além disso, pretendemos investigar a quebra da estrutura de sub-rede na fase SAF que foi observada em baixas temperaturas, quando o parâmetro de frustração geométrica assume os valores $r \geq 1$ e a desordem possui magnitude próxima do parâmetro de frustração geométrica.

Referências Bibliográficas

- [1] COEY, J. M. D. *Magnetism and Magnetic Materials*. [S.l.]: Cambridge: Cambridge University, 2010. ISBN 0521816149.
- [2] SCHULD, M.; SINAYSKIY, I.; PETRUCCIONE, F. Quantum walks on graphs representing the firing patterns of a quantum neural network. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 89, p. 032333, 2014.
- [3] MOESSNER, R.; KNOLLE, J. A field guide to spin liquids. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, v. 10, n. 1, p. 451–472, 2019.
- [4] FISCHER, K.; HERTZ, J. *Spin Glasses*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1993. ISBN 9780521447775.
- [5] RAMIREZ, A. P. Strongly geometrically frustrated magnets. *Annual Review of Materials Science*, v. 24, n. 1, p. 453–480, 1994.
- [6] GINGRAS, M.; HERTOOG, B. C. den. Origin of spin ice behavior in ising pyrochlore magnets with long range dipole interactions: an insight from mean-field theory. *Canadian Journal of Physics*, v. 79, 2000.
- [7] ZHITOMIRSKY, M. Enhanced magnetocaloric effect in frustrated magnets. *Physical Review B*, v. 67, p. 104421, 2003.
- [8] PAKHIRA, S. et al. Magnetic frustration induced large magnetocaloric effect in the absence of long range magnetic order. *Scientific Reports*, v. 7, 2017.
- [9] NGUYEN, L. T.; CAVA, R. A spin glass state in ba3tiru2o9. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 476, p. 334 – 336, 2019.

- [10] YOKOTA, T. Instability of paramagnetic state toward glassy state in random ising anti-ferromagnet on tetrahedron cactus lattices. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 490, p. 458 – 464, 2018.
- [11] FUJIHALA, M. et al. Short-range correlations and persistent spin fluctuations in the undistorted kagome lattice ising antiferromagnet $\text{Co}_3\text{Mg}(\text{OH})_6\text{Cl}_2$. *Physical Review B*, v. 85, p. 012402, 2012.
- [12] JIN, S. et al. Phase transitions in the frustrated ising model on the square lattice. *Physical Review B*, v. 87, p. 144406, 2013.
- [13] SCHMIDT, M.; ZIMMER, F.; MAGALHÃES, S. Spin liquid and infinitesimal-disorder-driven cluster spin glass in the kagome lattice. *Journal of Physics Condensed Matter*, v. 29, p. 165801, 2017.
- [14] SCHMIDT, M.; ZIMMER, F.; MAGALHÃES, S. Field-induced cluster spin glass and inverse symmetry breaking enhanced by frustration. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 449, p. 440–446, 2018.
- [15] SCHMIDT, M. *Efeitos de interações de curto alcance e tamanho de clusters em sistemas desordenados*. Dissertação de Mestrado, 2014.
- [16] SCHMIDT, M. *Efeitos de Frustração Geométrica em Antiferromagnetos com Clusters*. Tese, 2019.
- [17] ZIMMER, F. et al. Interplay between spin-glass clusters and geometrical frustration. *Physical Review E, American Physical Society*, v. 89, p. 022120, 2014.
- [18] YOKOTA, T. Effects of geometrical frustration on the spin-glass transition. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, v. 89, p. 012128, 2014.
- [19] YOKOTA, T. Random ising antiferromagnet on bethe-like lattices with triangular loops. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 447, p. 270–275, 2016. ISSN 378-4371.
- [20] ELHAJAL, M.; CANALS, B.; LACROIX, C. Frustration in 2d and 3d tetrahedral-based lattices. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 226-230, p. 379–380, 2001. ISSN 0304-8853.

- [21] SANTOS, E. G. S. dos. *Supercondutividade BCS ba Rede Tabuleiro de Xadrez*. Tese, 2008.
- [22] POLLMANN, F. et al. Correlated fermions on a checkerboard lattice. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 97, n. 17, Oct 2006.
- [23] YAMAMOTO, D. Correlated cluster mean-field theory for spin systems. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 79, p. 144427, 2009.
- [24] BAVIERA, R.; PASQUINI, M.; SERVA, M. A variational approach to ising spin glasses in finite dimensions. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 31, n. 18, p. 4127–4140, 1998.
- [25] ASHCROFT, N.; MERMIN, N.; OLIVEIRA, M. D. *Física Do Estado Sólido*. [S.l.]: CENGAGE DO BRASIL, 2011. ISBN 9788522109029.
- [26] GETZLAFF, M. *Fundamentals of Magnetism*. [S.l.: s.n.], 2008.
- [27] CALLISTER, W. D. *Ciência e engenharia de materiais: uma introdução*. [S.l.]: Livros Técnicos e Científicos, 2002. ISBN 9788521612889.
- [28] NEGELE JOHN W.; ORLAND, H. *Quantum Many-particle Systems*. [S.l.]: Westview Press, 1998. Paperback. ISBN 0738200522.
- [29] SCHMIDT, M.; ZIMMER, F. M.; MAGALHÃES, S. Spin glass induced by infinitesimal disorder in geometrically frustrated kagome lattice. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 438, p. 416–423, 2015.
- [30] DOTSENKO, V. *An Introduction to the Theory of Spin Glasses and Neural Networks*. River Edge, NJ, USA: World Scientific Publishing Co., Inc., 1994. ISBN 9810218737.
- [31] TEMPERATURE-DEPENDENT frustration: A thermodynamic rather than a topological effect. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 182, p. 133–144, 1992. ISSN 0378-4371.
- [32] LACROIX, C.; MENDELS, P.; MILA, F. *Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory*. [S.l.: s.n.], 2011. ISBN 978-3-642-10588-3.

- [33] SANTOS, d. L. R. *Estudo de interações Competitivas e Anisotropia em Sistemas Magneticos*. Tese, 2013.
- [34] MYDOSH, J. *Spin Glasses: An Experimental Introduction*. [S.l.]: Taylor & Francis, 1993. ISBN 9780748400386.
- [35] SHERRINGTON, D.; KIRKPATRICK, S. Solvable model of a spin-glass. *Physical Review Letters*, v. 35, p. 1792, 1975.
- [36] SOUKOULIS, C.; LEVIN, K. Cluster mean-field theory of spin-glasses. *Physical Review Letters*, v. 39, p. 581–584, 08 1977.
- [37] SALINAS, S. *Introdução a Física Estatística Vol. 09*. [S.l.]: EDUSP, 1997. ISBN 9788531403866.
- [38] LOPES, J. *Simulações de teorias de campo para sistemas magnéticos*. Dissertação, 2017.
- [39] EDWARDS, S. F.; ANDERSON, P. W. Theory of spin glasses. *Journal of Physics F: Metal Physics*, v. 5, n. 5, p. 965–974, 1975.

Apêndice A

Partindo do método das réplicas, podemos escrever:

$$\begin{aligned}\overline{\ln Z (\delta\{J_{ij}\})} &= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\overline{Z^n} - 1}{n} \\ &= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\ln e^{\overline{Z^n} - 1}}{n},\end{aligned}$$

expandindo a função exponencial $e^{\overline{Z^n} - 1}$ em série de Taylor e desprezando os termos de ordem maior que dois, a expressão anterior fica reescrita da forma:

$$\overline{\ln Z (\delta\{J_{ij}\})} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\ln \overline{Z^n}}{n}$$

Apêndice B

Sendo

$$H^{(n)} = -\frac{1}{\sqrt{2d}} \sum_{a=1}^n \sum_{(i_\nu, j_\nu)} J_{ij}^\nu \sigma_{i_\nu}^a \sigma_{j_\nu}^a - \frac{\beta}{2d} \sum_{(i_\nu, j_\lambda)'} \sum_{(a < b)} \sigma_{i_\nu}^a \sigma_{j_\lambda}^a \sigma_{i_\nu}^b \sigma_{j_\lambda}^b, \quad (1)$$

Fazemos a seguinte substituição para obtenção de $\tilde{H}^{(n)}$:

$$\sigma_{i_\nu}^a \sigma_{j_\lambda}^a \sigma_{i_\nu}^b \sigma_{j_\lambda}^b \longrightarrow q^{ab} \{ \sigma_{i_\nu}^a \sigma_{j_\lambda}^a + \sigma_{i_\nu}^b \sigma_{j_\lambda}^b \}, \quad (2)$$

obtemos que

$$\tilde{H}^{(n)} = \sum_{clust} \Omega_{clust}^{(n)}, \quad (3)$$

onde

$$\Omega_{clust}^{(n)} = -\frac{1}{\sqrt{2d}} \sum_{a=1}^n \sum_{(i_\nu, j_\nu)} J_{ij}^\nu \sigma_{i_\nu}^a \sigma_{j_\nu}^a - \frac{\beta}{2d} \sum_{(a < b)} \sum_{(i_\nu, j_\lambda)'} q^{ab} [\sigma_{i_\nu}^a \sigma_{i_\nu}^b + \sigma_{j_\lambda}^a \sigma_{j_\lambda}^b]. \quad (4)$$

A partir das equações (3.24) podemos escrever

$$\sum_{(i_\nu, j_\lambda)'} 1 = \left(d - \frac{n_j}{n_\sigma} \right) N = \left(n_\sigma - \frac{n_j}{d} \right) \frac{d}{n_b} \sum_{(i)} 1, \quad (5)$$

e como os clusters são idênticos temos que

$$\Omega_{clust}^{(n)} = -\frac{1}{\sqrt{2d}} \sum_{a=1}^n \sum_{(i_\nu, j_\nu)} J_{ij}^\nu \sigma_{i_\nu}^a \sigma_{j_\nu}^a - \frac{\beta}{n_b} \left(n_\sigma - \frac{n_j}{d} \right) \sum_{a < b} \sum_{(i)} q^{ab} \sigma_{i_\nu}^a \sigma_{i_\nu}^b. \quad (6)$$

Observe que o primeiro e segundo termo desta última expressão se referem as interações intraclusters entre os spins que são primeiros vizinhos e aos spins localizados na fronteira de um único cluster respectivamente.

Apêndice C

A função de partição do sistema original do modelo descrito é dada por $Z = Tr \exp \{-\beta H^{(n)}\}$, e sem perda de generalidade podemos reescrever

$$Z = \frac{Z_0}{Z_0} Tr \exp \{-\beta H^{(n)}\} = Z_0 \frac{Tr e^{-\beta \tilde{H}^{(n)}} e^{-\beta(H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)})}}{Z_0} = Z_0 \left\langle e^{-\beta(H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)})} \right\rangle_0, \quad (7)$$

onde $Z_0 = Tr \exp\{-\beta \tilde{H}^{(n)}\}$ é função de partição do sistema de referência e $\langle \dots \rangle_0$ indica a média com relação ao sistema de referência. Agora utilizando a relação $\left\langle e^{-\beta(H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)})} \right\rangle_0 \geq e^{\langle -\beta(H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)}) \rangle_0}$, podemos escrever $Z \geq Z_0 e^{\langle -\beta(H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)}) \rangle_0}$, assim obtemos a desigualdade de Bogoliubov

$$-\overline{\ln Tr \{e^{-\beta H^{(n)}}\}} \leq \beta \overline{\langle H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)} \rangle_0} - \overline{\ln Tr \{e^{-\beta \tilde{H}^{(n)}}\}} = g. \quad (8)$$

Sendo i e j sítios pertencentes a diferentes clusters e como os clusters são idênticos, podemos escrever uma função de correlação entre clusters $\langle \sigma_{i\nu}^a \sigma_{j\lambda}^a \sigma_{i\nu}^b \sigma_{j\lambda}^b \rangle_0 = \langle \sigma_{i\nu}^a \sigma_{i\nu}^b \rangle_0 \langle \sigma_{j\lambda}^a \sigma_{j\lambda}^b \rangle_0 = \langle \sigma_{i\nu}^a \sigma_{i\nu}^b \rangle_0^2$, para efeito de simplicidade nos cálculos omitiremos agora o índice do sítio e cluster, ou seja, escreveremos apenas $\langle \sigma_{i\nu}^a \sigma_{j\lambda}^a \sigma_{i\nu}^b \sigma_{j\lambda}^b \rangle_0 = \langle \sigma^a \sigma^b \rangle_0^2$. Além disso, para calcular a média $\beta \overline{\langle H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)} \rangle_0}$ e utilizar a mesma em (8) consideramos que $\overline{\langle H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)} \rangle_0} = \overline{\langle H^{(n)} \rangle_0} - \overline{\langle \tilde{H}^{(n)} \rangle_0}$. Assim,

$$\beta \overline{\langle H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)} \rangle_0} = -\frac{\beta^2}{2} N \left(1 - \frac{n_J}{dn_\sigma} \right) \sum_{a < b} \left[\overline{\langle \sigma^a \sigma^b \rangle_0^2} - 2q^{ab} \overline{\langle \sigma^a \sigma^b \rangle_0} \right]. \quad (9)$$

Sendo g dado na desigualdade de Bogoliubov, para extremizar g em relação as variáveis q^{ab} , consideramos a expressão obtida em (9). Note que com o intuito de extremizar g em relação a q^{ab} encontramos os conjuntos de parâmetros $\{q^{ab}\}$ que satisfaçam $\frac{\partial g}{\partial q^{ab}} = 0$. Deste modo,

calculamos a derivada parcial:

$$\begin{aligned}
0 = \frac{\partial g}{\partial q^{ab}} &= -\beta^2 N \left(1 - \frac{n_J}{dn_\sigma}\right) \sum_{(a<b)} \frac{\partial \overline{\langle \sigma^a \sigma^b \rangle}_0}{\partial q^{ab}} \left[\overline{\langle \sigma^a \sigma^b \rangle}_0 - q^{ab} \right] + \\
&+ \beta^2 N \left(1 - \frac{n_J}{dn_\sigma}\right) \sum_{a<b} \overline{\langle \sigma^a \sigma^b \rangle}_0 - \frac{\beta^2}{n_b} \left(n_\sigma - \frac{n_J}{d}\right) \sum_{a<b} \sum_{(i)} \overline{\langle \sigma^a \sigma^b \rangle}_0,
\end{aligned} \tag{10}$$

como $\sum_{(i)} 1 = \frac{n_b}{n_\sigma} N$, então $\frac{\sum_{(i)} 1}{n_b} = N/n_\sigma$, logo podemos concluir que

$$\begin{aligned}
0 = \frac{\partial g}{\partial q^{ab}} &= -\beta^2 N \left(1 - \frac{n_J}{dn_\sigma}\right) \sum_{(a<b)} \frac{\partial \overline{\langle \sigma^a \sigma^b \rangle}_0}{\partial q^{ab}} \left[\overline{\langle \sigma^a \sigma^b \rangle}_0 - q^{ab} \right] + \\
&+ \beta^2 N \left(1 - \frac{n_J}{dn_\sigma}\right) \sum_{a<b} \overline{\langle \sigma^a \sigma^b \rangle}_0 - \beta^2 N \left(1 - \frac{n_J}{dn_\sigma}\right) \sum_{a<b} \overline{\langle \sigma^a \sigma^b \rangle}_0,
\end{aligned} \tag{11}$$

portanto $q^{ab} = \overline{\langle \sigma^a \sigma^b \rangle}_0$, deste modo, a desigualde de Bogoliubov (8) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
-\overline{\ln Tr \{e^{-\beta H^{(n)}}\}} &\leq \beta \overline{\langle H^{(n)} - \tilde{H}^{(n)} \rangle}_0 - \overline{\ln Tr \{e^{-\beta \tilde{H}^{(n)}}\}} = \\
&= \frac{\beta^2}{2} N \left(1 - \frac{n_J}{dn_\sigma}\right) \sum_{a<b} (q^{ab})^2 - \overline{\ln Tr \{e^{-\beta \tilde{H}^{(n)}}\}},
\end{aligned} \tag{12}$$

Com base no resultado (12), a partir de (3.22) e (3.25), temos

$$\begin{aligned}
g_d &= - \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\overline{\ln Z_{\nu\lambda}^n}}{\beta N n} = \frac{-\beta}{4} \left(1 - \frac{n_J}{dn_\sigma}\right) - \lim_{n \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N n} \overline{\ln Tr \{e^{-\beta H^{(n)}}\}} \leq \\
&\leq \frac{-\beta}{4} \left(1 - \frac{n_J}{dn_\sigma}\right) + \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left[\frac{\beta}{2} \left(1 - \frac{n_J}{dn_\sigma}\right) \sum_{a<b} (q^{ab})^2 - \frac{1}{\beta n_\sigma} \overline{\ln Tr \{e^{-\beta \Omega^{(n)}}\}} \right] = \tilde{f}_d,
\end{aligned} \tag{13}$$

onde

$$\Omega^{(n)} = -\frac{1}{\sqrt{2d}} \sum_{a=1}^n \sum_{(i_\nu, j_\nu)} J_{ij}^\nu \sigma_{i_\nu}^a \sigma_{j_\nu}^a - \frac{\beta}{n_b} \left(n_\sigma - \frac{n_J}{d}\right) \sum_{a<b} \sum_{(i)} q^{ab} \sigma_{i_\nu}^a \sigma_{i_\nu}^b. \tag{14}$$

$\Omega^{(n)}$ representa o hamiltoniano de um único cluster. Note que chamamos de \tilde{g}_d a nossa estimativa para energia livre por cluster.

Apêndice D

Neste apêndice desenvolveremos os cálculos analíticos necessários para obtenção da desigualdade de Bogoliubov. Inicialmente definimos o operador $V = H - H_0$, onde H é o hamiltoniano do sistema original que se deseja estudar e H_0 é hamiltoniano do sistema de referência. A função de partição do sistema de referência é dada por

$$Z_0 = Tr \exp\{-\beta H_0\}. \quad (15)$$

A média térmica de um observável é dado por

$$\langle A \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} Tr A \exp\{-\beta H_0\}, \quad (16)$$

já a função de partição para o sistema original é dada por

$$Z = Tr \exp\{-\beta H\}. \quad (17)$$

Esta última expressão ainda pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} Z &= Tr \exp\{-\beta H\} = Tr \exp\{-\beta H + \beta H_0 - \beta H_0\} \\ &= Tr \exp\{-\beta V\} \exp\{-\beta H_0\} = Z_0 \langle \exp\{-\beta V\} \rangle_0, \end{aligned} \quad (18)$$

Expandindo $\exp\{-\beta V\}$ em série de Taylor e usando as relações

$$e^x \geq 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \dots \quad (19)$$

e

$$\overline{(x^2)} > \bar{x}^2 \quad (20)$$

obtemos que

$$\langle e^{-\beta v} \rangle_0 = 1 - \beta \langle V \rangle + \beta^2 \frac{\langle V^2 \rangle_0}{2!} + \dots \quad (21)$$

e

$$e^{\langle -\beta v \rangle_0} = 1 - \beta \langle V \rangle + \beta^2 \frac{\langle V \rangle_0^2}{2!} + \dots \quad (22)$$

Tendo em vista a desigualdade (20), temos que

$$\langle e^{-\beta V} \rangle_0 \geq e^{-\beta \langle V \rangle_0}. \quad (23)$$

Multiplicando esta última desigualdade pela função de partição do sistema de referência Z_0 , obtemos que

$$Z = Z_0 \langle e^{-\beta V} \rangle_0 \geq Z_0 e^{-\beta \langle V \rangle_0} \quad (24)$$

Tomando o logaritmo na desigualdade anterior e multiplicando ambos os membros desta última desigualdade obtemos para a energia livre de Gibbs que

$$G = -k_b T \ln Z \leq -k_b T \ln Z_0 + \langle H - H_0 \rangle_0 = G_0 + \langle H - H_0 \rangle_0. \quad (25)$$

e portanto

$$G \leq G_0 + \langle H - H_0 \rangle_0 = g \quad (26)$$

Esta última desigualdade é conhecida como desigualdade de Bogoulibov. A energia livre de campo médio é dado pelo lado direito da ultima desigualdade quando minimizada em relação aos parâmetros de H_0 .