



Universidade Federal de Goiás
Instituto de Física

Programa de Pós-Graduação em Física

RICARDO MAYCKON LOPES NASCIMENTO

Uma proposta de modelo de acoplamento spin-rede anisotrópico

Goiânia
2025



UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS
INSTITUTO DE FÍSICA

TERMO DE CIÊNCIA E DE AUTORIZAÇÃO (TECA) PARA DISPONIBILIZAR VERSÕES ELETRÔNICAS DE TESES

E DISSERTAÇÕES NA BIBLIOTECA DIGITAL DA UFG

Na qualidade de titular dos direitos de autor, autorizo a Universidade Federal de Goiás (UFG) a disponibilizar, gratuitamente, por meio da Biblioteca Digital de Teses e Dissertações (BDTD/UFG), regulamentada pela Resolução CEPEC nº 832/2007, sem ressarcimento dos direitos autorais, de acordo com a [Lei 9.610/98](#), o documento conforme permissões assinaladas abaixo, para fins de leitura, impressão e/ou download, a título de divulgação da produção científica brasileira, a partir desta data.

O conteúdo das Teses e Dissertações disponibilizado na BDTD/UFG é de responsabilidade exclusiva do autor. Ao encaminhar o produto final, o autor(a) e o(a) orientador(a) firmam o compromisso de que o trabalho não contém nenhuma violação de quaisquer direitos autorais ou outro direito de terceiros.

1. Identificação do material bibliográfico

Dissertação Tese Outro*: _____

*No caso de mestrado/doutorado profissional, indique o formato do Trabalho de Conclusão de Curso, permitido no documento de área, correspondente ao programa de pós-graduação, orientado pela legislação vigente da CAPES.

Exemplos: Estudo de caso ou Revisão sistemática ou outros formatos.

2. Nome completo do autor

Ricardo Mayckon Lopes Nascimento

3. Título do trabalho

Uma proposta de modelo de acoplamento spin-rede anisotrópico

4. Informações de acesso ao documento (este campo deve ser preenchido pelo orientador)

Concorda com a liberação total do documento SIM NÃO¹

[1] Neste caso o documento será embargado por até um ano a partir da data de defesa. Após esse período, a possível disponibilização ocorrerá apenas mediante:

a) consulta ao(à) autor(a) e ao(à) orientador(a);

b) novo Termo de Ciência e de Autorização (TECA) assinado e inserido no arquivo da tese ou dissertação.

O documento não será disponibilizado durante o período de embargo.

Casos de embargo:

- Solicitação de registro de patente;
- Submissão de artigo em revista científica;
- Publicação como capítulo de livro;
- Publicação da dissertação/tese em livro.

Obs. Este termo deverá ser assinado no SEI pelo orientador e pelo autor.



Documento assinado eletronicamente por **Leandro Felix De Sousa Bufaical**, Coordenador de Pós-Graduação, em 26/01/2026, às 11:03, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Ricardo Mayckon Lopes Nascimento, Discente**, em 26/01/2026, às 12:11, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://sei.ufg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **5931872** e o código CRC **17634992**.

Referência: Processo nº 23070.052068/2025-11

SEI nº 5931872

RICARDO MAYCKON LOPES NASCIMENTO

Uma proposta de modelo de acoplamento spin-rede anisotrópico

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física, do Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Física.

Área de concentração: Física

Área de pesquisa: Física Estatística

Orientador: Prof. Dr. Álvaro A. Caparica

Co - Orientador: Prof. Dr. Cláudio José da Silva

Goiânia
2025

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor, através do Programa de Geração Automática do Sistema de Bibliotecas da UFG.

Nascimento, Ricardo Mayckon Lopes
Uma proposta de modelo de acoplamento spin-rede anisotrópico
[manuscrito] / Ricardo Mayckon Lopes Nascimento. - 2025.
XCIV, 94 f.: 2025

Orientador: Prof. Dr. Álvaro de Almeida Caparica; co-orientador: Dr. Cláudio José Da Silva

Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Goiás, Instituto de Física (IF), Programa de Pós-Graduação em Física, Goiânia, 2025.

1. Acoplamento Spin-rede. 2. Anisotropia. 3. Frustração. 4. Simulação Entrópica. 5. Transição de Fase.

I. Caparica, Álvaro de Almeida, orient. II. Da Silva, Cláudio José, co-orient. III. Título.

CDU 531.21



UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS

INSTITUTO DE FÍSICA

ATA DE DEFESA DE TESE

Ata Nº 81 da sessão de Defesa de Tese de Ricardo Mayckon Lopes Nascimento que confere o título de Doutor em Física, na área de concentração em Física.

Aos 03 dias do mês de outubro de 2025, a partir das 10h00min, no Laboratório de Mídias do Instituto de Física da UFG, realizou-se a sessão pública de Defesa de Tese intitulada “Uma proposta de modelo de acoplamento spin-rede anisotrópico”. Os trabalhos foram instalados pelo Orientador, Professor Doutor Álvaro de Almeida Caparica (IF/UFG) com a participação dos demais membros da Banca Examinadora: Professor Doutor Lucas Nunes Jorge (IFMT/Cáceres), membro titular externo; Professor Doutor José Ricardo de Sousa (ICE/UFAM), membro titular externo; Professor Doutor Fabiano Caetano de Souza (IFG/Goiânia), membro titular externo; e Professor Doutor Hermann Freire Ferreira Lima e Silva (IF/UFG), membro titular interno. Durante a arguição, os membros da banca não fizeram sugestão de alteração do título do trabalho. A Banca Examinadora reuniu-se em sessão secreta a fim de concluir o julgamento da Tese, tendo sido o candidato aprovado pelos seus membros. Proclamados os resultados pelo Professor Doutor Álvaro de Almeida Caparica, Presidente da Banca Examinadora, foram encerrados os trabalhos e, para constar, lavrou-se a presente ata que é assinada pelos Membros da Banca Examinadora, aos 03 dias do mês de outubro de 2025.

TÍTULO SUGERIDO PELA BANCA



Documento assinado eletronicamente por **Hermann Freire Ferreira Lima E Silva**, **Professor do Magistério Superior**, em 03/10/2025, às 12:40, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Fabiano Caetano De Souza**, **Usuário Externo**, em 03/10/2025, às 12:46, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Alvaro De Almeida Caparica**, **Usuário Externo**, em 03/10/2025, às 12:49, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **José Ricardo de Sousa**, **Usuário Externo**, em 03/10/2025, às 16:38, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Lucas Nunes Jorge**, **Usuário Externo**, em 08/10/2025, às 09:15, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://sei.ufg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **5690650** e o código CRC **64DBF6D6**.

Referência: Processo nº 23070.052068/2025-11

SEI nº 5690650

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, pela vida que tenho e pela minha identidade, fruto de todas as graças e desafios que me foram proporcionados até aqui. À minha família por todo amparo incondicional que sempre me transmitiram ao longo da minha jornada. À minha companheira de longa data Jossiele, por todo amor, carinho, atenção e paciência ao longo desses anos.

Ressalto também a minha imensa gratidão ao meu co-orientador Cláudio José da Silva e ao meu orientador Álvaro de Almeida Caparica, por todo engajamento, pelas orientações, pelas discussões, pelos elogios e críticas ao vivo ou online que tivemos ao longo desses anos. Aos professores do Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás, principalmente os professores do programa de pós-graduação, por toda sua dedicação, seriedade e compromisso com a formação intelectual e científica dos seus estudantes. Destaco de forma ainda mais particular os meus agradecimentos ao grupo de Física Estatística ao qual faço parte, por toda colaboração, atenção e compromisso dedicado a mim e a este trabalho.

Agradeço também aos meus amigos e colegas do Instituto por todos os momentos de convivência, seja no restaurante universitário, em nossas salas de estudo ou em ambientes de lazer que não só foram palco de muita discussão acadêmica mas também de descontração. Estendo também a minha gratidão a toda equipe do Colégio Militar de Goiás - Unidade Colina Azul, especialmente ao corpo docente ao qual atualmente faço parte e ao grupo gestor por todo suporte, compreensão e apoio que me foi concedido nesses últimos anos de doutorado.

E por fim, agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pelo apoio financeiro destinado a essa pesquisa e à minha formação e a toda equipe do Laboratório de Multiusuário de Computação de Alto Desempenho (LAMCAD/UFG) pela concessão do acesso a esse ambiente e pelas valiosas orientações que foram cruciais para nortear a execução das simulações realizadas neste trabalho.

“A verdadeira viagem de descobrimento não consiste em procurar novas paisagens, mas em ter novos olhos.”

– **Marcel Proust**

RESUMO

Esta tese tem como foco principal propor uma modelagem adequada para o estudo de sistemas de spins que abordem um acoplamento spin-rede capaz de respeitar a simetria da rede cristalina e que ao mesmo tempo permita avaliar os efeitos que a vibração dessa rede, estabelecida em uma direção preferencial, promove na interação dos spins. Para atender a este objetivo, como ponto de partida, nós ajustamos e generalizamos uma proposta estabelecida na minha dissertação de mestrado para o estudo de sistemas de spins do tipo Ising. Nesta tese, após formularmos uma representação geral do modelo para spins desse tipo, adotamos como objeto de aplicação a rede triangular. Tal combinação estabelece uma anisotropia rotacional para as interações dos spins que é derivada da associação da direção preferencial de vibração da rede com um parâmetro reconhecido no modelo como J_a . Esse parâmetro é responsável por mensurar o grau de interação da rede com os spins. Em síntese, quando $J_a > 0$ o sistema irá favorecer a interação dos spins que se encontram sobre a direção preferencial de vibração da rede, ao passo que, quando $J_a < 0$ as interações situadas fora dessa direção preferencial é que serão favorecidas até um certo valor crítico de J_a .

A forma escolhida para avaliar toda a dinâmica dos spins, sob essas condições, foi a técnica de amostragem entrópica, cuja abordagem de simulação se vincula ao algoritmo de Wang-Landau. Embora tenhamos feito uma ampla descrição do sistema para ambas as condições de J_a , os resultados oriundos das simulações ficaram dedicados exclusivamente ao caso de $J_a < 0$. Com esta estratégia, conseguimos direcionar o nosso estudo para avaliar o comportamento do sistema em circunstâncias particulares de interesse obtidos pelo diagrama de fase, desde o regime de baixas temperaturas até o regime de altas temperaturas. Essa análise nos impulsionou a investigar de forma mais contundente o comportamento do sistema quando ele se encontra com $J_a = -1.0$, $J_a = -3.0$ e na região em torno de $J_a = -4.0$, onde o sistema alcança um regime de frustração máxima. Para cada uma dessas condições em particular, nós conseguimos calcular algumas propriedades termodinâmicas básicas de interesse como a energia do sistema, o calor específico, a magnetização e a susceptibilidade magnética.

Esses dados, em conjunto com as diversas simulações efetuadas para vários tamanhos de rede escolhidos com base nessa proposta, também nos ajudou a identificar a existência de fases exóticas associadas ao ponto de frustração máxima e ao seu entorno.

Além disso, também conseguimos avaliar o comportamento do sistema na criticalidade, onde calculamos diversos expoentes críticos através da teoria de escala de tamanho finito, que nos permitiu argumentar sobre a ocorrência de transições de fase convencionais (como as transições de segunda ordem) e não convencionais (como a transição de primeira ordem fraca) além da provável classe de universalidade associada a pontos específicos do diagrama de fase.

Palavras - chave: Acoplamento spin-rede, anisotropia, frustração, simulação entrópica, transição de fase.

ABSTRACT

This thesis's main focus is to propose a suitable model for the study of spin systems that addresses a spin-lattice coupling capable of respecting the symmetry of the crystal lattice and simultaneously allowing for the evaluation of the effects that the vibration of this lattice, established in a preferred direction, has on the spin interactions. To achieve this objective, as a starting point, we adjusted and generalized a proposal established in my master's thesis for the study of Ising-type spin systems. In this thesis, after formulating a general representation of the model for spins of this type, we adopt the triangular lattice as the object of application. This combination establishes a rotational anisotropy for the spin interactions that is derived from the association of the lattice's preferred direction of vibration with a parameter recognized in the model as J_a . This parameter measures the degree of interaction between the lattice and the spins. In short, when $J_a > 0$, the system will favor the interaction of spins located along the lattice's preferred direction of vibration. However, when $J_a < 0$, interactions outside this preferred direction will be favored up to a certain critical J_a value.

The method chosen to evaluate the entire spin dynamics under these conditions was an entropic sampling technique whose simulation approach is linked to the Wang-Landau algorithm. Although we provided a comprehensive description of the system for both J_a conditions, the simulation results were exclusively dedicated to the $J_a < 0$ case. With this strategy, we were able to direct our study to evaluate the system's behavior under specific circumstances of interest, as determined by the phase diagram from the low-temperature to the high-temperature regime. This analysis prompted us to more thoroughly investigate the system's behavior at $J_a = -1.0$, $J_a = -3.0$, and in the region around $J_a = -4.0$, where the system reaches a regime of maximum frustration. For each of these conditions, we were able to calculate some basic thermodynamic properties of interest, such as the system's energy, specific heat, magnetization, and magnetic susceptibility.

These data, along with the various simulations performed for various lattice sizes chosen based on this proposal, also helped us identify the existence of exotic phases associated with the point of maximum frustration and its surroundings. Furthermore, we were also able to evaluate the system's behavior at criticality, where we calculated several critical exponents using finite-size scaling theory. This allowed us to argue for

the occurrence of conventional phase transitions (such as second-order transitions) and unconventional phase transitions (such as the weak first-order transition), in addition to the likely universality class associated with specific points on the phase diagram.

Key - words: Spin-lattice coupling, anisotropy, frustration, entropic simulation, phase transition.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1:	Figura representativa dos graus de liberdade de spin conforme cada modelo [1].	29
Figura 2.1:	Exemplos de frustração magnética para interações de uma rede quadrada e de uma rede triangular.	33
Figura 2.2:	Esquema das quatro principais redes que favorecem a ocorrência da frustração geométrica [2].	34
Figura 2.3:	Figura representativa das distorções da rede seguindo a dinâmica dos modelos <i>Bond-Phonon</i> e <i>Site-Phonon</i> [3].	38
Figura 3.1:	Figura representativa de um spin interagindo com seus respectivos vizinhos em uma célula unitária.	40
Figura 3.2:	Figura representativa de um spin $\sigma_{i,j}$ interagindo com seus respectivos vizinhos sob uma rede 3x3.	41
Figura 3.3:	Possíveis orientações adotadas por um sítio arbitrário no estado fundamental quando o sistema se encontra com $J = 1.0$ e $J_a = 0$	42
Figura 3.4:	Esquema ilustrativo das possíveis fases em $J = 1.0$ e $J_a = 2$	45
Figura 3.5:	Possíveis orientações adotadas por um sítio arbitrário quando o sistema se encontra com $J = 1.0$ e $J_a = 4.0$	46
Figura 3.6:	Possíveis orientações adotadas por um sítio arbitrário quando o sistema se encontra com $J = 1.0$ e $J_a = -1.0$	47
Figura 3.7:	Possíveis orientações adotadas por um sítio arbitrário e seus spins vizinhos quando o sistema se encontra com $J = 1.0$ e $J_a = -3.0$	48
Figura 3.8:	Ilustração de duas células unitárias que se interceptam em uma rede 4 x 4.	49
Figura 3.9:	Exemplos de possíveis orientações adotadas por um sítio arbitrário e seus spins vizinhos quando o sistema se encontra com $J = 1.0$ e $J_a = -5.0$	50
Figura 4.1:	Diagrama de fases do modelo.	53

Figura 4.2:	Energia média por spin em função da temperatura para vários tamanhos de rede (à esquerda) e a diferença da energia média por spin para os tamanhos de rede $L = 84$ e $L = 78$ em função da temperatura (à direita).	55
Figura 4.3:	Calor específico em função da temperatura para vários tamanhos de rede.	55
Figura 4.4:	Magnetização (à esquerda) e Susceptibilidade magnética (à direita) em função da temperatura para vários tamanhos de rede.	56
Figura 4.5:	Gráficos dos expoentes críticos $\frac{1}{\nu}$ e T_c com $J_a = -1$	57
Figura 4.6:	Gráficos dos expoentes críticos γ/ν e β/ν com $J_a = -1$	57
Figura 4.7:	Gráfico da distribuição de probabilidade da energia em função da energia por spin para alguns tamanhos de rede. (Gráfico original à esquerda e gráfico ampliado à direita).	58
Figura 4.8:	Energia média por spin em função da temperatura para vários tamanhos de rede (à esquerda) e a diferença da energia média por spin para os tamanhos de rede $L = 84$ e $L = 78$ em função da temperatura (à direita).	59
Figura 4.9:	Calor específico em função da temperatura para vários tamanhos de rede.	60
Figura 4.10:	Gráficos do ajuste linear do módulo da diferença do primeiro e segundo máximo do calor específico (à esquerda) e do módulo da diferença da temperatura destes máximos (figura à direita) em função do inverso do tamanho da rede.	60
Figura 4.11:	Magnetização (à esquerda) e Susceptibilidade magnética (à direita) em função da temperatura para vários tamanhos de rede.	61
Figura 4.12:	Gráficos dos expoentes críticos $\frac{1}{\nu}$ e T_c com $J_a = -3.0$	62
Figura 4.13:	Gráficos individuais da temperatura crítica de c_v e χ com $J_a = -3.0$	62
Figura 4.14:	Gráficos dos expoentes críticos γ/ν e β/ν com $J_a = -3.0$	62
Figura 4.15:	Gráfico da distribuição de probabilidade da energia em função da energia por spin para alguns tamanhos de rede.	63
Figura 4.16:	Energia média por spin para $L = 24$ com J_a variando de -3.5 a -4.5	65
Figura 4.17:	Energia média por spin para $L = 24$ com J_a variando de -4.5 a -5.5	66
Figura 4.18:	Calor específico para $L = 24$ com J_a variando de -3.5 a -4.5	66
Figura 4.19:	Calor específico para $L = 24$ com $J_a = -4.0$	67
Figura 4.20:	Densidade da entropia (à esquerda) e ajuste linear da densidade da entropia residual (à direita) para $J_a = -1.0$	67
Figura 4.21:	Densidade da entropia (à esquerda) e ajuste linear da densidade da entropia residual (à direita) para $J_a = -4.0$	67

Figura 4.22:	Calor específico para $L = 24$ com J_a variando de -4.5 a -5.5	68
Figura 4.23:	Magnetização e susceptibilidade para $L = 24$ com valores específicos de J_a	69
Figura 4.24:	Configurações do estado fundamental para $J_a = -3.99$ (à esquerda) e para $J_a = -3.994$ (à direita).	71
Figura 4.25:	Configurações do estado fundamental para $J_a = -4.0$ (à esquerda) e para $J_a = -4.02$ (à direita).	71
Figura 4.26:	Configurações do estado fundamental para $L = 24$ com valores específicos de J_a	72
Figura 1:	Diagrama de fases do ferromagneto $Sm_{0.55}Sr_{0.45}MnO_3$ [4].	81
Figura 2:	Possíveis estruturas da distribuição de probabilidade [5].	82

SUMÁRIO

Capítulo 1: Introdução	25
1.1 Sistemas magnéticos sob a ótica da física estatística	25
1.2 O estudo de sistemas de spins	28
1.3 A adoção de spins do tipo Ising e sua relevância para o modelo	29
Capítulo 2: Frustração e a Modelagem Spin-Rede	33
2.1 Sistemas magnéticos frustrados	33
2.2 O acoplamento spin-rede para sistemas magnéticos	36
Capítulo 3: Proposição do Modelo	39
3.1 Apresentação do Modelo	39
3.2 O modelo com $J = 1.0$ e $J_a \geq 0$	42
3.3 O modelo com $J = 1.0$ e $J_a < 0$	46
Capítulo 4: Resultados Obtidos	53
4.1 Propriedades do sistema para $J_a = -1.0$	54
4.2 Propriedades do sistema para $J_a = -3.0$	58
4.3 Propriedades do sistema em torno de $J_a = -4.0$	64
Capítulo 5: Conclusões e Perspectivas Futuras	73
Apêndice	77
A.1 Simulações entrópicas com o Método de Wang-Landau	77
A.2 Densidade de estados conjunta	79
A.3 Transições de fase e fenômenos críticos	80

INTRODUÇÃO

1.1 Sistemas magnéticos sob a ótica da física estatística

O estudo de sistemas magnéticos é sem dúvida um dos temas mais relevantes para a compreensão e desenvolvimento da ciência e tecnologia em geral, especialmente no contexto de materiais fortemente correlacionados, no desenvolvimento de dispositivos baseados em graus de liberdade de spin e na investigação de fenômenos coletivos emergentes como frustração e transições de fase não convencionais. Diversas áreas do conhecimento se beneficiam da crescente capacidade de manipular esses sistemas em prol dos mais variados interesses. Porém, entender de maneira mais adequada e profunda o devido comportamento e os potenciais impactos que tais sistemas podem promover com base em suas influências magnéticas requer um conhecimento que gira em torno das interações associadas às partículas que compõem esses materiais [6, 7, 8]. No entanto, lidar com este número elevado de constituintes que tais estruturas magnéticas possuem torna-se uma tarefa impraticável quando buscamos descrevê-los com as equações de Hamilton [9], pois para cada partícula haveria uma equação descrevendo sua energia em função de suas interações, o que torna o sistema altamente interconectado, aumentando consideravelmente a complexidade das equações a serem resolvidas.

Sendo assim, uma das saídas possíveis é recorrer a métodos numéricos que se sustentam com base na Mecânica Estatística. Deste modo, o tratamento desses sistemas não fica mais a cargo das soluções das equações de movimento, mas sim sob a ótica de um cenário de probabilidades. Um dos métodos que mais se destaca nesta abordagem é o método Monte Carlo [10, 11]. Esse método não só permite a exploração de propriedades físicas complexas, que na maioria das vezes são inviáveis por meio de soluções analíticas ou tratamentos experimentais, mas também nos auxilia na compreensão do comportamento coletivo de partículas, suas interações, transições de fase e demais fenômenos associados ao magnetismo [12, 13]. Logo, quando adotamos esta abordagem estamos preocupados

em estabelecer e em entender as implicações de um sistema ser mais provável em um estado do que em outro. Assim, quando consideramos por exemplo que $\omega_\eta(t)$ represente a probabilidade de encontrarmos o sistema em um dado estado η em um tempo t , isso significa que $\omega_\eta(t)$ deve obedecer à equação

$$\sum_{\eta} \omega_\eta(t) = 1, \quad (1.1)$$

que corresponde à condição de normalização das probabilidades [14]. Assim, seremos capazes de reunir cada equação que compõe a taxa de transição de um dado estado do sistema para outro em um conjunto de equações que em geral é conhecida apenas como equação mestra

$$\frac{d\omega_\eta}{dt} = \sum_{\lambda} [\omega_\lambda(t)R(\lambda \rightarrow \eta) - \omega_\eta(t)R(\eta \rightarrow \lambda)], \quad (1.2)$$

onde $R(\lambda \rightarrow \eta)$ é a taxa de transição do estado λ para o estado η . Esta equação representa a variação da probabilidade de um sistema estar em um determinado estado ao longo do tempo, tornando assim um instrumento indispensável para entender como as probabilidades dos estados evoluem dinamicamente em simulações de Monte Carlo. Nesse sentido, no lado direito da equação temos o primeiro termo refletindo o ganho de probabilidade do estado η devido à transição de outro estado para esse estado, enquanto que, o segundo termo reflete a perda de probabilidade do estado η devido a sua transição para outro estado. Em uma situação em que os pesos $\omega_\eta(t)$ são constantes no tempo, a equação (1.2) irá atender à condição do *balanço detalhado*:

$$\omega_\lambda(t)R(\lambda \rightarrow \eta) = \omega_\eta(t)R(\eta \rightarrow \lambda). \quad (1.3)$$

Sob estas circunstâncias, podemos dizer que o sistema se encontra em equilíbrio e a partir disso poderemos formular uma proposta que atenda melhor os objetivos deste trabalho, considerando o sistema de interesse em equilíbrio com um reservatório térmico. Para isso, devemos inicialmente entender que no equilíbrio os pesos ω_η agora irão nos informar as probabilidades de ocupação de equilíbrio, que para um dado estado η serão representadas por

$$p_\eta = \lim_{t \rightarrow \infty} \omega_\eta(t). \quad (1.4)$$

Uma escolha ajustada para melhor descrever as probabilidades de ocupação de um sistema em equilíbrio com um reservatório térmico deve-se ao trabalho de J. Willard Gibbs, que em 1902 [15, 16], propôs a adoção da distribuição de Boltzmann:

$$p_\eta = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\eta}. \quad (1.5)$$

Nesta expressão, temos a energia do estado η representada por E_η , a variável

$\beta = 1/K_B T$ com $K_B = 1.38 \times 10^{-23} J/K$ correspondendo à constante de Boltzmann, T indicando a temperatura absoluta de equilíbrio com o reservatório e a função Z representando uma soma sobre todos os possíveis microestados η do sistema que é conhecida como função de partição [17, 18], cuja descrição matemática é representada por

$$Z = \sum_{\eta} e^{-\beta E_{\eta}}. \quad (1.6)$$

Assim, com base neste formalismo matemático, podemos obter qualquer quantidade termodinâmica que nos auxilie na compreensão do material magnético em estudo, como a susceptibilidade magnética, o calor específico, a magnetização, entre outras. Para isso, calculamos o valor esperado de uma determinada grandeza termodinâmica A tomando:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_{\eta} A_{\eta} p_{\eta} \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\eta} A_{\eta} e^{-\beta E_{\eta}}. \end{aligned} \quad (1.7)$$

No entanto, este caminho só é possível para sistemas muito pequenos, pois para sistemas com um número muito grande de estados, esta metodologia se torna impraticável. Com o intuito de contornar este problema, surgiram algumas abordagens propondo a seleção de configurações mais importantes, que tem maior impacto na grandeza de interesse, ao invés de tomarmos todos os estados do sistema conforme dispõe a equação (1.7). Para isso, construímos uma amostra com estados escolhidos de acordo com alguma distribuição de probabilidade específica. Assim, se escolhermos um subconjunto com N estados $(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N)$ teremos

$$A_N = \frac{\sum_{i=1}^N A_{\eta_i} p_{\eta_i}^{-1} e^{-\beta E_{\eta_i}}}{\sum_{j=1}^N p_{\eta_j}^{-1} e^{-\beta E_{\eta_j}}} \quad (1.8)$$

como nossa melhor estimativa de uma quantidade de interesse A . Quanto maior é o número N de estados amostrados, mais precisa é a estimativa de $\langle A \rangle$, de modo que quando $N \rightarrow \infty$ teremos $A_N = \langle A \rangle$. Duas abordagens que mais se destacam neste contexto é a amostragem por importância [12, 19]. Adotada pelo algoritmo de Metropolis, que propõe uma probabilidade proporcional ao peso de Boltzmann e a amostragem entrópica, cujo preceito é obedecido pelo método de Wang-Landau, que por sua vez propõe uma probabilidade proporcional ao inverso da densidade de estados $g(E)$. Esta estratégia é melhor discutida na seção A.1 do apêndice e consiste no método escolhido para obter os resultados que são apresentados neste trabalho. Todo este aparato teórico é extremamente útil para diversas abordagens envolvendo o estudo de sistemas magnéticos especialmente para aqueles voltados exclusivamente para o tratamento de spins magnéticos conforme veremos a seguir.

1.2 O estudo de sistemas de spins

Uma das maneiras mais simples de se avaliar o comportamento de um determinado sistema magnético é por meio da modelagem de spins. Nesta abordagem, os átomos que compõem um determinado sistema magnético são representados apenas por seus respectivos momentos magnéticos [20]. Esta maneira de visualizar tal material magnético se justifica em virtude do fato dos respectivos átomos que compõem tal material serem dotados de elétrons de modo que cada elétron gera um campo magnético devido ao seu spin conforme foi verificado pelo experimento de Stern - Gerlach em 1922 [21]. Assim, o comportamento magnético de um material passa a ser observado mediante a existência de um ou mais elétrons desemparelhados [22], de modo que a maioria das propriedades magnéticas possa ser obtida por meio de um tratamento *ad hoc* do spin do elétron. Tal aspecto se tornou o principal fator motivador responsável por impulsionar a proposição de várias hamiltonianas que sejam capazes de modelar as propriedades macroscópicas de interesse de sistemas magnéticos.

O primeiro modelo de grande sucesso associado a esta proposta é o modelo de Ising, que foi proposto por Lenz mas resolvido exatamente para o caso unidimensional por Ernest Ising em 1925 [1, 23]. Neste modelo, os spins são tratados como variáveis discretas que podem assumir apenas dois valores $+1$ ou -1 , que se vinculam por uma força de interação entre os primeiros vizinhos. Sua hamiltoniana adequada a esta proposta na presença de um campo externo H corresponde a

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i, \quad (1.9)$$

onde σ_i e σ_j são as variáveis de spin e J é a interação de troca. Em 1928, Heisenberg propôs um modelo mais completo para a descrição do ferromagnetismo, cuja hamiltoniana na ausência de campo externo pode ser representada por [24]

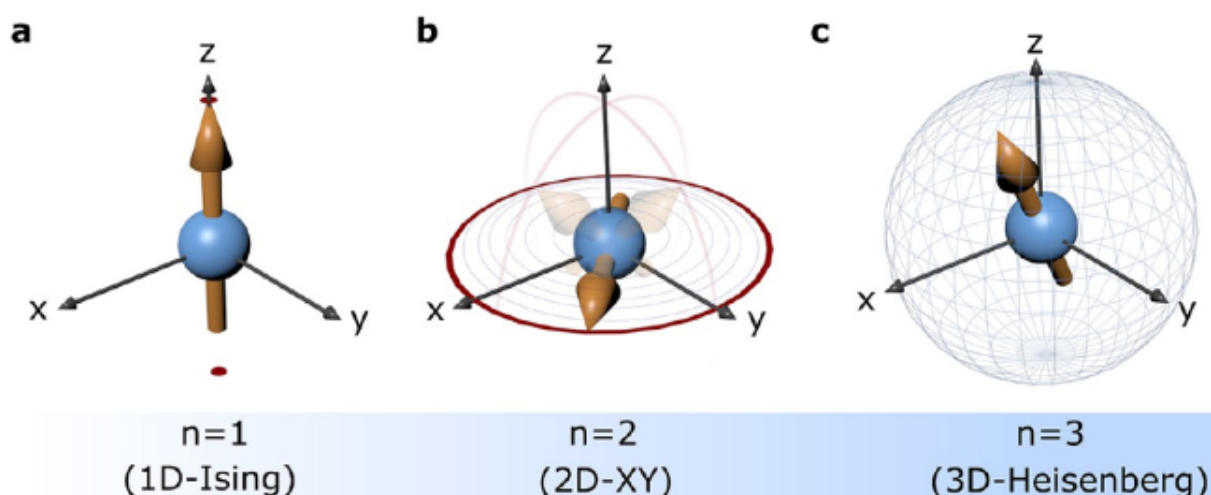
$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.10)$$

onde o operador de spin \mathbf{S}_i depende das componentes S_i^x , S_i^y e S_i^z . Esta proposta, além de se mostrar mais adequada ao conceito de spin, também permitiu caracterizar casos particulares de sua abordagem como o modelo de Ising, onde se assume uma única componente de spin ao longo de um eixo e também o modelo XY, onde se assume spins bidimensionais confinados a um plano [25] conforme podem ser observados na figura 1.1.

No entanto, a maleabilidade disposta pelo modelo de Ising fomentou um número maior de estudos em torno deste modelo. Por volta de 1936, a sua representação começa a deixar de ser vista apenas como um objeto matemático passando a ser encarado também como um modelo capaz de apresentar aspectos físicos relevantes. Uma das publicações

precursoras responsáveis por sustentar esta ideia foi o artigo publicado por R. Peierls [26] que reconheceu, ainda que de forma não tão rigorosa, a existência do comportamento ferromagnético em baixas temperaturas no modelo de Ising bidimensional. Na sequência, veio a solução exata deste modelo pelo trabalho de L. Onsager em 1944 [27], cuja contribuição, além de outros aspectos, foi capaz de apontar a existência de transição de fase para o caso bidimensional e de validar a relevância do modelo.

Figura 1.1: Figura representativa dos graus de liberdade de spin conforme cada modelo [1].



Com estes avanços, a base de estudos envolvendo a dinâmica de spins foi ficando mais sólida proporcionando o desenvolvimento de novas teorias como a de transição de fases e fenômenos críticos (seção A.3 do apêndice) que foi revolucionada pela teoria de grupo de renormalização [28, 29], a qual fornece uma robusta estrutura teórica para esse assunto. Os avanços também se estenderam para a compreensão de modelos mais complexos como por exemplo o próprio modelo de Heisenberg. Também foram propostos novos modelos como o de Potts [30], o de Baxter-Wu [31] e de vários outros que se ajustam melhor à descrição dos fenômenos físicos de interesse e que atualmente compõe a base acadêmica responsável por fomentar o estudo de sistemas magnéticos.

1.3 A adoção de spins do tipo Ising e sua relevância para o modelo

O modelo de Ising é visto como um exemplo clássico de como a simplificação pode nos conduzir a análises mais profundas. Em sistemas magnéticos, o modo simplificado da complexidade dos spins quando se propõe apenas dois graus de liberdade (para cima ou para baixo) nos oferece um claro ponto de partida na compreensão de como os spins interagem entre si e de como as propriedades magnéticas gerais do sistema são afetadas

por essas interações. Além disso, tal estratégia também se mostra extremamente útil na investigação de regiões críticas, visto que nesses pontos os detalhes microscópicos se mostram menos importantes do que o comportamento coletivo e as interações em larga escala [32].

A ideia por trás do modelo não se restringe apenas no tratamento de sistemas magnéticos. Na biologia, por exemplo, a proposta atribuída aos estados de spin do modelo de Ising é modelada para analisar dados genéticos [33], onde os estados $+1$ ou -1 irão corresponder respectivamente a um alelo sendo compartilhado ou não por um par de irmãos. Outra analogia interessante por trás dessa modelagem está associada ao efeito do campo magnético na proposta original, que para o referido sistema biológico é equivalente ao efeito que um gene de uma doença promove nos alelos, causando um aumento no compartilhamento de alelos em loci próximos. Em neurociência, diversas pesquisas buscam compreender como as informações são processadas e transferidas pelas redes corticais [34], onde o modelo de Ising também é utilizado em estratégias combinadas para estudar essa dinâmica contribuindo especialmente para a extração de propriedades emergentes em regimes análogos à criticalidade. Em áreas sociais também é possível observar a forte influência das ideias do modelo de Ising [35], seja para avaliar o fluxo da polarização de opiniões, na dinâmica urbana associada à formação de domínios, entre outras. Esses são apenas alguns exemplos que compõem o imenso conjunto de aplicações que fazem uso da mesma estratégia implementada por Ising, onde se considera apenas dois graus de liberdade de spin para modelar e avaliar comportamentos específicos de sistemas de interesse.

Diante disso, é possível perceber que a estratégia por trás da redução de um determinado mecanismo complexo pode gerar *insights* profundos e desencadear uma série de aplicações potenciais. A essência por trás disso representa um dos principais pilares que justifica a proposta deste trabalho. Nele, apresentamos um modelo de acoplamento spin-rede que adota os spins do tipo Ising, que simplifica a abordagem do referido acoplamento e que estabelece uma anisotropia rotacional nas interações. Esta característica anisotrópica proposta pela nosso modelo, surge em função do interesse de se avaliar os impactos que a vibração da rede cristalina em uma direção preferencial podem promover na dinâmica de interação desses spins de maneira que, a simetria da rede também seja respeitada nesse processo. Neste trabalho, escolhemos como objeto de aplicação de nossa proposta a rede triangular, onde extraímos resultados relevantes associados ao cálculo de propriedades termodinâmicas de interesse e à aplicação de técnicas de tamanho finito, com o objetivo de estabelecer uma descrição ajustada do comportamento do modelo nessa rede. Mesmo assim, é importante ressaltar que a nossa proposta não se limita à rede escolhida. Este é um dos aspectos que garante a versatilidade e a maleabilidade necessária para que ela sirva, não apenas para explorar outras redes, mas também para que seja facilmente implementada por outras técnicas de simulação tão bem consolidadas, quanto a que

estamos adotando aqui e com um custo computacional mais reduzido.

Este trabalho também tem como objetivo apresentar informações capazes de fornecer o suporte e o direcionamento necessário para um bom entendimento da proposta em si e dos resultados obtidos através do objeto de estudo. Para isso, o estruturamos apresentando no Capítulo 2 um conjunto de conceitos básicos sobre sistemas magnéticos frustrados e outros conceitos vinculados a abordagens modernas envolvendo a modelagem spin-rede. No Capítulo 3, apresentamos a proposta central deste trabalho, os aspectos pertinentes à sua adequação à rede adotada e demais características particulares à hamiltoniana associada. O Capítulo 4 se encarrega de exibir os resultados obtidos através das simulações, onde exploramos pontos relevantes do diagrama de fase e os confrontamos na medida do possível com características extraídas analiticamente conforme é exposto no capítulo anterior. As conclusões e as perspectivas futuras em conjunto com os possíveis desdobramentos relacionados aos assuntos apresentados por este trabalho, fica a cargo do Capítulo 5. E para finalizar, deixamos no apêndice os detalhes responsáveis por apresentar de forma mais descritiva os aspectos associados à simulação além de outras informações que auxiliem numa compreensão mais ampla sobre transição de fase e fenômenos críticos.

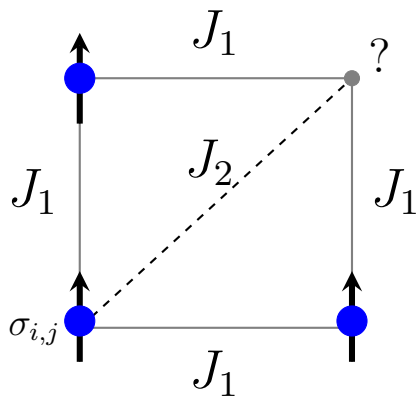
FRUSTRAÇÃO E A MODELAGEM SPIN-REDE

2.1 Sistemas magnéticos frustrados

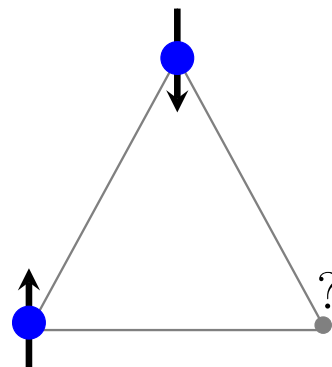
Materiais magnéticos frustrados consistem em um dos tópicos mais intrigantes da física da matéria condensada. Esses materiais configuram os mais variados arranjos de spins magnéticos cujas interações entre si não possam ser simultaneamente minimizadas a ponto de conduzir o sistema a um estado de mínima energia. Desta forma, tais sistemas se mostram incapazes de minimizar todas as interações envolvidas na rede [36]. Essa

Figura 2.1: Exemplos de frustração magnética para interações de uma rede quadrada e de uma rede triangular.

(a) Frustração promovida pela competição de interações ferromagnéticas (J_1) entre os primeiros vizinhos e antiferromagnéticas (J_2) entre os segundos vizinhos.



(b) Frustração geométrica entre três spins vizinhos de uma rede triangular com interações antiferromagnéticas.

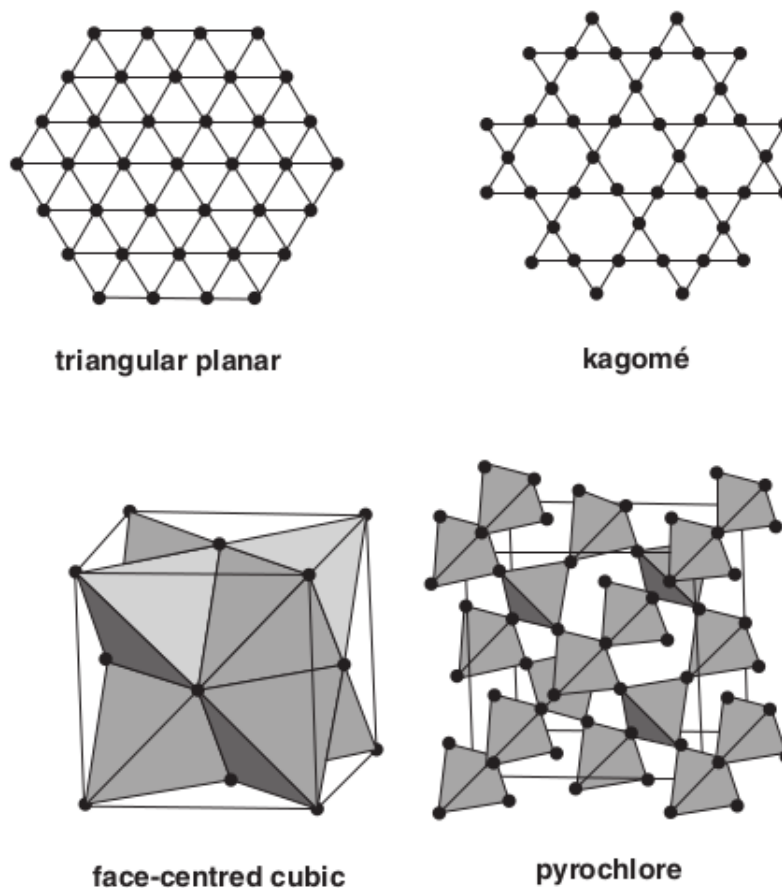


impossibilidade é oriunda do fenômeno de frustração que pode ser um fator resultante da existência de competição entre interações de troca [37, 38, 39] conforme pode ser observado pela figura 2.1a, ou por influência da própria geometria da rede [40, 41, 42] de modo que

neste último caso também possa ser reconhecida como frustração geométrica [43], cuja característica pode ser razoavelmente ilustrada pela figura 2.1b. Por consequência disso, geralmente os sistemas magnéticos frustrados possuem um estado fundamental altamente degenerado [44]. Esta condição, embora possa favorecer a formação de propriedades e fases não convencionais também pode tornar a proposição de um parâmetro de ordem um verdadeiro desafio.

Alguns trabalhos sugerem que o termo frustração foi primeiramente empregado com propriedade por P. W. Anderson, G. Toulouse e S. Kirkpatrick no contexto de sistemas magnéticos [45, 46, 47] por volta de 1977. Desde esta época os estudos acerca deste assunto se tornaram cada vez mais intensos, no que diz respeito à frustração oriunda da existência de competições entre as interações. Temos tal comportamento como base fundamental para a proposição de modelos de rede famosos como, por exemplo, o modelo de rede $J_1 - J_2$ [48], o modelo XY [49], o modelo de Ising com interações de curto e longo alcance [50], entre outros. No campo da frustração geométrica, onde o tipo de interação se mostra incompatível com a simetria da rede, temos como destaque os estudos que investigam o comportamento de materiais magnéticos sob estruturas específicas conforme exemplifica a figura 2.2.

Figura 2.2: Esquema das quatro principais redes que favorecem a ocorrência da frustração geométrica [2].



Em geral, os sistemas que são organizados sobre essas estruturas são mais propensos a apresentarem comportamentos inusitados e fases exóticas aliadas à frustração geométrica que cada rede pode proporcionar. Por exemplo, no estudo de sistemas antiferromagnéticos, a rede kagomé e a rede triangular representam algumas das poucas redes bidimensionais geometricamente frustradas [51]. Sobre cada uma delas, podemos ressaltar que a rede Kagomé (que é formada por triângulos que compartilham cantos) costuma apresentar uma capacidade mais elevada na formação do estado de ressonância de valência de ligação (*resonating valence bond (RVB)*), geralmente responsável por promover no estado fundamental a fase líquido de spin neste tipo de estrutura [52]. Este tipo de arranjo também ocupa um papel de destaque em trabalhos que envolvem o estudo e compreensão de protótipos de Jarositas [53], que são minerais formados por camadas de Kagomé.

A rede triangular, que como já sabemos, também possui uma simetria incompatível com antiferromagnetos [54, 55], possui uma física muito semelhante ao que se observa em materiais que são formados por uma estrutura triangular empilhada, como é o caso dos compostos ABX_3 [56], onde A é um metal alcalino, B um metal de transição e X um átomo halogênio. A rede triangular também é reconhecida por fornecer o suporte necessário para a compreensão de estados topologicamente não triviais como, por exemplo, a formação de Skyrmions [57]. Além disso, ela também se mostrou relevante para a proposição de relações importantes entre o estado Hall Quântico Fracional e o estado (*RVB*) [58]. Esta rede também serviu de base para o estudo de diversos modelos complexos, como, por exemplo, o modelo de dímeros quântico [59], que propôs a ocorrência de uma fase líquida mais estável sob este tipo de rede, contribuindo assim para o arcabouço de fases, cujas características topológicas podem ser importantes para a computação quântica como foi observado e proposto por Kitaev [60, 61, 62].

Sob a ótica tridimensional, os materiais associados à rede cúbica de face centrada (*FCC*) também têm sua parcela de contribuição no cenário do magnetismo frustrado, especialmente quando o assunto é perovskita dupla [63]. Esta estrutura também serviu de protótipo para propostas inusitadas como a que obteve o estado vidro de spin (*spin-glass*) através de um único tipo de interação [64], oferecendo uma rota diferente do que é proposto no modelo de Edwards-Anderson [65, 66]. Para fechar o panorama tridimensional temos a rede de pirocloro, que se destaca pelo estudo de óxidos do tipo $A_2^{3+}B_2^{4+}O_7$ [67], onde A é um íon de terras raras e B é normalmente um metal de transição. Os materiais que se enquadram nesta composição apresentam os mais diversos e intrigantes comportamentos exóticos, se estendendo até para materiais com interações ferromagnéticas como é o caso do composto $Ho_2Ti_2O_7$ [68], onde nesta estrutura representa um ferromagneto frustrado cujo comportamento se mostrou consistente com o modelo de gelo de spin (“*spin ice*”), onde a orientação do spin é similar à posição do hidrogênio no gelo [69].

O fenômeno que envolve a frustração se mostra extremamente relevante para

a compreensão de vários sistemas complexos presentes não só na Física mas também em outras áreas do conhecimento como na biologia com um destaque para o estudo do enovelamento de proteínas [70] e sua variabilidade conformacional [71], na química que além dos estudos envolvendo as Jarositas conforme mencionamos, a frustração também se mostra importante para a ativação de moléculas pequenas [72], além de vários outros ramos. Toda esta riqueza representa apenas uma pequena fração da importância e do potencial que a frustração propõe para o meio científico.

2.2 O acoplamento spin-rede para sistemas magnéticos

Uma das principais motivações responsáveis por justificar a proposição e a adoção do acoplamento spin-rede surgiu devido à necessidade de avaliar as possíveis influências que o meio, dotado de constituintes magnéticos, pode promover na dinâmica de interação dos seus spins. Tal busca é justificada porque em geral a interação magnética entre constituintes de um dado material depende do meio que os envolve [73]. Neste sentido, qualquer perturbação no meio pode alterar as interações existentes em virtude do acoplamento gerado entre os graus de liberdade do spin e da rede que os acomoda.

Um dos primeiros trabalhos desenvolvidos nessa linha de investigação, envolvendo spins do tipo Ising, foi publicado em 1975 [74], onde além de demonstrar outras singularidades, conseguiu apresentar fortes indícios do impacto que o acoplamento com a rede pode promover na temperatura crítica e no tipo de transição de fase. No entanto, estudos iniciais acerca do potencial de influência deste tipo de acoplamento em sistemas magnéticos sob os mais diversos cenários são bem anteriores a este artigo [75, 76, 77, 78, 79].

Atualmente, existe na literatura um número extremamente expressivo de trabalhos que associa o acoplamento spin-rede aos mais diversos sistemas. O interesse crescente neste tipo de acoplamento surge como consequência da sua relevância para o estudo de materiais eletrônicos como semicondutores de camada única [80], que pertencem a uma lista de dispositivos de grande potencial para spintrônica [81] e por suas contribuições no entendimento de fenômenos envolvendo a supercondutividade [82], a ferroeletricidade [83] além de outras características únicas de grande interesse para o estudo de materiais magnéticos.

Neste conjunto mais atual de artigos que abordam esse tipo de acoplamento, nota-se que a grande maioria deles direcionam suas atenções para modelos de spins que possuem graus de liberdade maiores [84, 85], visando garantir aos modelos uma descrição mais ajustada à realidade. Com base nesta premissa, destaca-se os modelos de rede com spins do tipo Heisenberg, pois além de fornecerem um amplo grau de liberdade para o spin, também concentram seus esforços em avaliar como que pequenos deslocamentos atômicos

executados em torno das suas posições de equilíbrio podem contribuir para a interação de troca dos spins. Em geral, se propõe que a interação de troca deve ser do tipo:

$$J_{ij}(|\mathbf{r}_{ij}^0 + \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j|), \quad (2.1)$$

onde \mathbf{r}_{ij}^0 é a distância de equilíbrio entre dois sítios vizinhos e \mathbf{u}_i (\mathbf{u}_j) representa o vetor deslocamento de cada sítio i (j) a partir da sua respectiva posição regular localizada na rede de spins. A vantagem de se considerar pequenos deslocamentos permite assumir que $|\mathbf{u}_i|/|\mathbf{r}_{ij}^0| \ll 1$, assim ao desprezarmos os termos de ordens superiores em uma expansão da equação (2.1) em torno da posição de equilíbrio, teremos

$$J_{ij}(|\mathbf{r}_{ij}^0 + \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j|) = J_{ij}(|\mathbf{r}_{ij}^0|) + \left. \frac{dJ_{ij}}{dr} \right|_{r=|\mathbf{r}_{ij}^0|} u_{ij}, \quad (2.2)$$

de modo que o primeiro termo fique responsável apenas por caracterizar uma constante que depende somente da posição regular dos spins e portanto, represente uma interação de troca não perturbada. O segundo termo se encarrega de trazer uma contribuição oriunda da taxa da variação da interação de troca aplicada no ponto de equilíbrio em conjunto com a mudança no comprimento de cada ligação, uma vez que $J_{ij} = J_{ij}(|\mathbf{r}_{ij}^0 + \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j|)$ e que $u_{ij} = \mathbf{e}_{ij} \cdot (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j)$ sendo $\mathbf{e}_{ij} \equiv \mathbf{r}_{ij}^0/|\mathbf{r}_{ij}^0|$ o vetor que conecta os dois referidos sítios vizinhos i e j em suas respectivas posições de equilíbrio.

Em adição a esta formulação, um outro aspecto que também chama atenção nesta exposição teórica mais recente consiste na inserção de uma energia elástica em sua hamiltoniana. Desse modo, além da interação de troca mencionada teremos um termo cuja representação pode classificar os modelos em uma abordagem do tipo *Bond-Phonon* ou *Site-Phonon* [86, 87, 88]. Logo, quando este fator adicional assumir a forma

$$\mathcal{H}_{el} = \frac{K_{BP}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} u_{ij}^2, \quad (2.3)$$

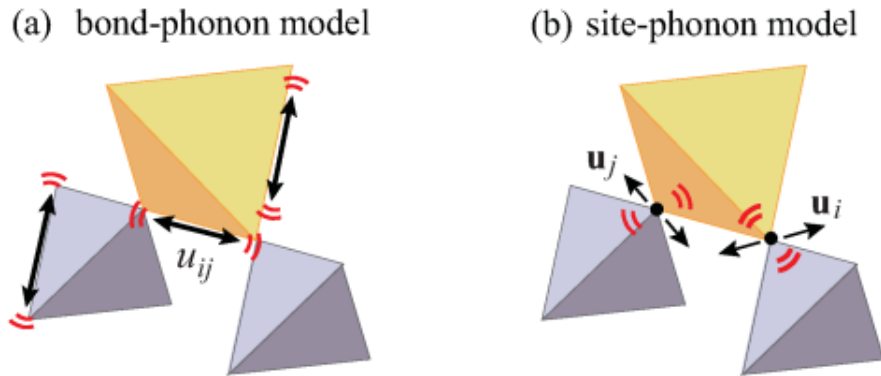
estaremos lidando com uma classe de modelos *Bond-Phonon*, cuja principal interpretação consiste em considerar os processos de expansão e contração de cada ligação entre os sítios da rede de forma independente uma das outras. Assim, tanto a interação de troca quanto a energia elástica irão depender do comprimento da ligação [89]. Por outro lado, a classe de modelos *Site-Phonon* assume uma energia elástica caracterizada por

$$\mathcal{H}_{el} = \frac{K_{SP}}{2} \sum_i |\mathbf{u}_i|^2, \quad (2.4)$$

onde tal contribuição energética irá depender dos deslocamentos independentes de cada átomo, de modo que, o comprimento das ligações sejam formuladas em função dessas distâncias, afetando não só a interação spin-spin entre os seus vizinhos mais próximos

mas também com outros sítios mais distantes da rede. De maneira particular, tais descrições podem ser melhor compreendidas de forma mais visual através da figura 2.3, que foi extraída de um estudo baseado na rede de pirocloro [3]. Embora em ambas as

Figura 2.3: Figura representativa das distorções da rede seguindo a dinâmica dos modelos *Bond-Phonon* e *Site-Phonon* [3].



circunstâncias K_{BP} e K_{SP} sejam reconhecidas como constantes elásticas [90, 91], apenas a última classe é considerada como mais realista, pois além de todos os seus aspectos particulares, ela também visa garantir uma correlação de spin mais próxima da realidade. Mas como é observado no meio científico, existe uma forte tendência crescente do grau de complexidade associado ao estudo de sistemas magnéticos ser proporcional ao quanto nos aproximamos da realidade almejada [92, 93, 94]. Diante disso, os primeiros passos a serem dados na proposição de novos modelos e novas rotas de investigação acerca do acoplamento spin-rede podem ser mais facilmente implementados estabelecendo certas restrições às liberdades que seriam esperadas de modelos mais realísticos. Essa premissa é, sem dúvida, um dos principais fatores responsáveis por impulsionar o desenvolvimento da proposta central deste trabalho que será apresentada a seguir.

PROPOSIÇÃO DO MODELO

3.1 Apresentação do Modelo

Visando expor um novo ponto de vista a respeito da dinâmica que envolve o acoplamento spin-rede, buscamos apresentar um novo modelo cuja principal motivação partiu do interesse de avaliar como que a propagação dos fônons sob uma dada direção preferencial pode afetar a interação de troca dos spins dispostos em uma rede magnética. Em virtude dessa direção preferencial (que também será reconhecida como eixo principal) e da simetria apresentada pela rede escolhida como objeto de estudo, o modelo a ser apresentado irá impor uma anisotropia rotacional para as interações estabelecidas entre os spins da respectiva rede. Para tal feito, decidimos executar os primeiros passos acerca desta nova perspectiva utilizando spins do tipo Ising em conjunto com uma forma adaptada da abordagem mais recente para o acoplamento spin-rede cuja interação de troca possa ser tratada como foi disposta na equação (2.2). No entanto, a nossa proposta irá se restringir em considerar a influência da dinâmica da rede apenas na interação de troca. Desse modo, todo aspecto visual dos possíveis deslocamentos dos spins assim como a contribuição proveniente da energia elástica serão completamente desprezados, mesmo assim, a mecânica de aplicação de tal proposta nos leva a acreditar que estejamos diante de uma abordagem do tipo *Bond-Phonon*.

Desta forma, a hamiltoniana que julgamos capaz de atender a essas expectativas deve corresponder a seguinte representação matemática:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (3.1)$$

de modo que para podermos envolver nesta expressão a interação de troca entre os spins, a influência que a vibração da rede pode promover nesta interação, a proposição de um

eixo principal fixo e a simetria da rede avaliada, assumimos que

$$J_{ij} = J + J_a \cos(n\phi_{i,j}). \quad (3.2)$$

Nessa hamiltoniana, os spins do tipo Ising são representados por σ_i , J corresponde a interação de troca entre os spins, $J_a \equiv \frac{dJ_{ij}}{dr} \Big|_{r=|r_{ij}^0|} \cdot |(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j)|$ diz respeito ao grau de interação da rede com os spins onde assume um papel equivalente a um parâmetro fenomenológico e $\phi_{i,j}$ representa o ângulo formado entre o vetor que liga dois sítios vizinhos e uma direção transversal ou longitudinal definida sobre a rede cristalina (que corresponde ao eixo principal). Além disso, vale destacar também a importância da variável n que é responsável por garantir a isotropia das ligações entre dois spins vizinhos.

Assim, quando direcionamos esta metodologia para uma rede do tipo triangular e definimos a direção do eixo principal ao longo de uma das interações conforme expõe o destaque em vermelho na figura 3.1, podemos facilmente observar que $\phi_{i,j}$ irá corresponder a ângulos múltiplos de 60° conforme é imposto pela simetria da rede escolhida. Em adição a isso, diante da definição da rede e do eixo principal poderemos expor as características de n para o caso concreto.

Figura 3.1: Figura representativa de um spin interagindo com seus respectivos vizinhos em uma célula unitária.

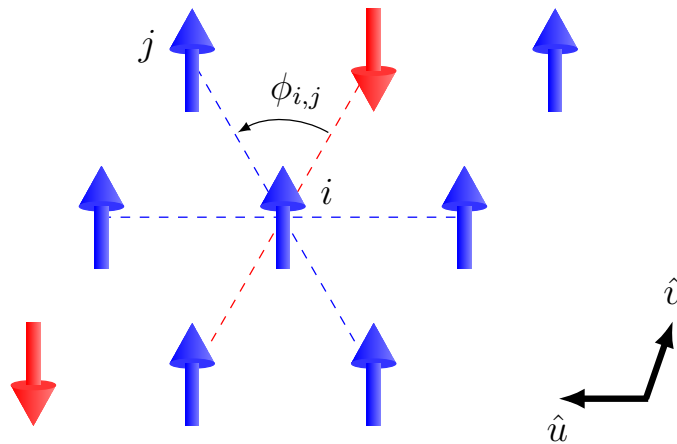


Tabela 3.1: Exposição do conjunto de valores da variável n para a rede triangular.

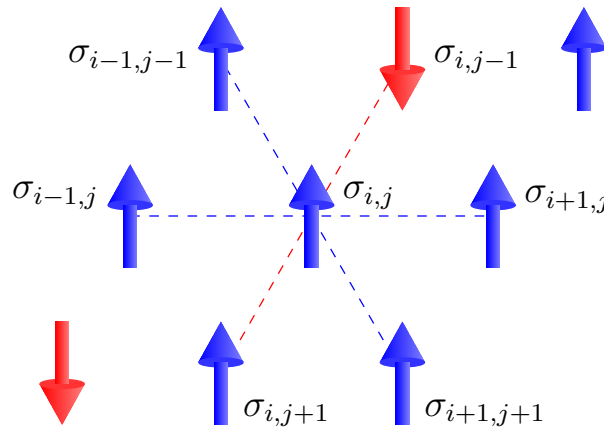
		valor de $\cos(n\phi_{i,j})$					
		$\phi_{i,j} = 0^\circ$	$\phi_{i,j} = 60^\circ$	$\phi_{i,j} = 120^\circ$	$\phi_{i,j} = 180^\circ$	$\phi_{i,j} = 240^\circ$	$\phi_{i,j} = 300^\circ$
n Ímpar	Múltiplo de 3	1	-1	1	-1	1	-1
	Não múltiplo de 3	1	1/2	-1/2	-1	-1/2	1/2
n Par	Múltiplo de 6	1	1	1	1	1	1
	Não múltiplo de 6	1	-1/2	-1/2	1	-1/2	-1/2

Ao observarmos a tabela 3.1 obtida para a rede triangular, podemos perceber que o propósito da variável n só é respeitado quando ele for um número par. Com base nisso, teremos duas rotas de investigação possíveis, de modo que no caso (1), n é um número múltiplo de 6 e no caso (2), n não é múltiplo de 6. A situação apontada pela

condição (1) nos garante que o sistema terá $J_{ij} = J + J_a$ para todas as interações. Nesta circunstância podemos facilmente perceber que para $J_a > 0$, a Eq. (3.1) irá representar o modelo de Ising triangular ferromagnético com interações reforçadas, ao passo que com $J_a < 0$ e $|J_a| > J$ teremos o modelo de Ising triangular antiferromagnético, onde neste caso estaremos representando um sistema que se comporta como um modelo que já compõe a classe de sistemas frustrados [95]. Agora, para a situação apresentada pela condição (2) temos um caso ainda mais interessante, onde obtemos $J_{ij} = J + J_a$ para as interações situadas na mesma direção do eixo principal e $J_{ij} = J - J_a/2$ para aquelas que se encontram fora desse eixo.

Com base nesta exposição, decidimos explorar o caso (2) adotando $n = 2$ ao longo de todo o nosso estudo. Desse modo, quando consideramos esta circunstância em conjunto com a Eq. (3.1), podemos a partir de uma disposição algébrica extraída de um sítio da rede, inferir características prévias a respeito do modelo que também servirão para nortear os resultados oriundos das simulações. Assim, partindo de uma representação pictórica, que surge de um ponto de vista de uma simulação conforme expõe a figura 3.2, poderemos antecipar alguns aspectos acerca da evolução do sistema por intermédio de uma representação simplificada de uma pequena rede, onde é destacado um sítio e seus respectivos vizinhos. A figura 3.2 apresenta as interações tomadas sobre o eixo principal

Figura 3.2: Figura representativa de um spin $\sigma_{i,j}$ interagindo com seus respectivos vizinhos sob uma rede 3x3.



(destaque em vermelho) e as demais interações (destaque em azul) presentes em um sítio qualquer da rede magnética. Nesta representação também fica caracterizado o eixo principal que foi escolhido de forma arbitrária na direção do versor \hat{v} conforme é destacado na figura 3.1, cuja orientação será mantida durante toda a simulação. Com base nisso, podemos expandir nossa interpretação obtendo as prováveis configurações dos spins no estado fundamental para qualquer valor de J_a através da análise energética desses spins.

Desta forma, teremos para um sítio arbitrário a seguinte energia:

$$\frac{\mathcal{H}_{i,j}}{\sigma_{i,j}} = \left[-(J + J_a) \cdot (\sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1}) - \left(J - \frac{J_a}{2} \right) \cdot (\sigma_{i-1,j-1} + \sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j+1} + \sigma_{i+1,j}) \right] \quad (3.3)$$

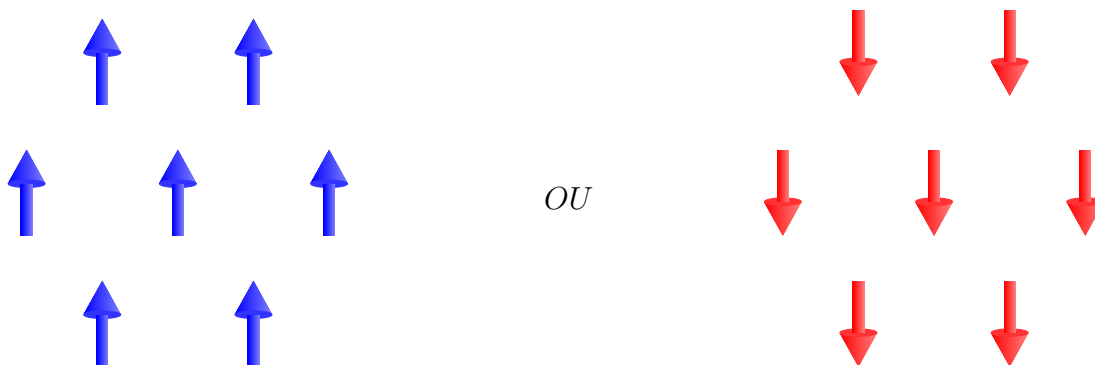
3.2 O modelo com $J = 1.0$ e $J_a \geq 0$

Neste primeiro momento, iniciamos nosso estudo sobre o comportamento do sistema permitindo que J_a assuma alguns valores positivos. Com exceção de $J_a = 0$, isto quer dizer que ao respeitarmos a equação (3.3) teremos a vibração da rede (cuja intensidade é representada pelos valores a serem admitidos por J_a) favorecendo majoritariamente as interações dos spins que se encontram sobre o eixo principal. Assim, quando o sistema assume o par $J = 1.0$ e $J_a = 0$, onde nesta situação ele se encontra isento de qualquer influência vibracional da rede, verifica-se que:

$$\mathcal{H}_{i,j} = \sigma_{i,j} \left[-J(\sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1}) - J(\sigma_{i-1,j-1} + \sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j+1} + \sigma_{i+1,j}) \right]. \quad (3.4)$$

Para o sistema que se encontra nestas condições já podemos observar a partir da equação (3.4) que o coeficiente da 1ª parcela (que representa os spins que estão no eixo principal) e o coeficiente da 2ª parcela (que representa os spins que estão fora desse eixo) possuem sinais negativos e o mesmo peso. O sinal negativo indica uma preferência de ordenamento ferromagnético e o peso (que corresponde ao valor absoluto do coeficiente) caracteriza a intensidade da interação. Outro aspecto que também vale destacar é o alcance do estado fundamental (*Ground State*) que somente é obtido quando minimizamos a equação (3.4). Para satisfazer este requisito pode-se observar que a orientação de todos os spins vizinhos devem coincidir com a mesma adotada pelo spin $\sigma_{i,j}$. Logo, as possíveis orientações para um sítio arbitrário no estado fundamental equivale as disposições apresentadas pela figura 3.3.

Figura 3.3: Possíveis orientações adotadas por um sítio arbitrário no estado fundamental quando o sistema se encontra com $J = 1.0$ e $J_a = 0$.



A extensão desta característica para todos os sítios dispostos na rede induz o coletivo de spins a adotar apenas duas formas de orientações características da fase ferromagnética. Este comportamento já era esperado, visto que nesta circunstância o sistema consegue representar o modelo de Ising puro na rede triangular. Além disso, também é possível verificar (a partir da equação (3.4)) que para qualquer que seja a orientação adotada pelo sistema, a energia no estado fundamental irá corresponder a $-3J$.

Considerando agora uma situação em que o sistema sofra uma pequena influência da vibração da rede, estabelecemos que sejam considerados os valores $J = 1.0$ e $J_a = 1.0$. Nesta proposta, podemos perceber que a equação (3.3) se ajustará à expressão:

$$\mathcal{H}_{i,j} = \sigma_{i,j} \left[-2J(\sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1}) - \frac{1}{2}J(\sigma_{i-1,j-1} + \sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j+1} + \sigma_{i+1,j}) \right]. \quad (3.5)$$

Efetuada uma análise simples entre a equação (3.5) e a equação (3.4), em conjunto com a figura 3.2, podemos perceber que as interações sob o eixo principal receberam um reforço na energia enquanto que as interações fora desse eixo se enfraqueceram. Além disso, em virtude do sinal negativo para ambos os coeficientes percebe-se que o sistema continua mantendo a preferência de ordenamento ferromagnético. Este comportamento energético pode ser melhor contextualizado se efetuarmos uma extrapolação a respeito da dinâmica do nosso modelo, pois se avaliarmos este comportamento sob a ótica de um sistema que permita o deslocamento de sítios, poderíamos inferir que os spins sobre o eixo principal estariam se aproximando, enquanto que, os spins fora desse eixo estariam se afastando. Ao retornarmos para a ótica do nosso modelo, poderemos verificar que novamente a condição de mínima energia para a equação (3.5) só será satisfeita se a orientação de todos os spins vizinhos coincidirem com a mesma adotada pelo spin $\sigma_{i,j}$. Isso reforça ainda mais o fato de que no estado fundamental o ordenamento ferromagnético também se mostrará presente assim como em $J_a = 0$, de modo que a energia correspondente a este estado também irá coincidir com $-3J$. Diante disso, podemos inferir que embora a rede magnética de spins sofra uma pequena influência da vibração da rede, essa perturbação não se mostra suficiente para mudar a ordem do estado fundamental do sistema em relação a $J_a = 0$ e a sua consequente dinâmica de evolução térmica.

No entanto, um comportamento extremamente inusitado surge quando o sistema assume o par $J = 1.0$ e $J_a = 2.0$, onde a equação (3.3) irá convergir para:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{i,j} &= \sigma_{i,j} [-3J(\sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1}) - 0J(\sigma_{i-1,j-1} + \sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j+1} + \sigma_{i+1,j})] \\ &= \sigma_{i,j} [-3J(\sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1})]. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Baseando-se na equação (3.6) podemos imediatamente perceber que as interações fora do eixo principal adotado não são computadas para o cálculo da energia, pois neste caso a vibração da rede adquire uma intensidade que não apenas continua favorecendo as

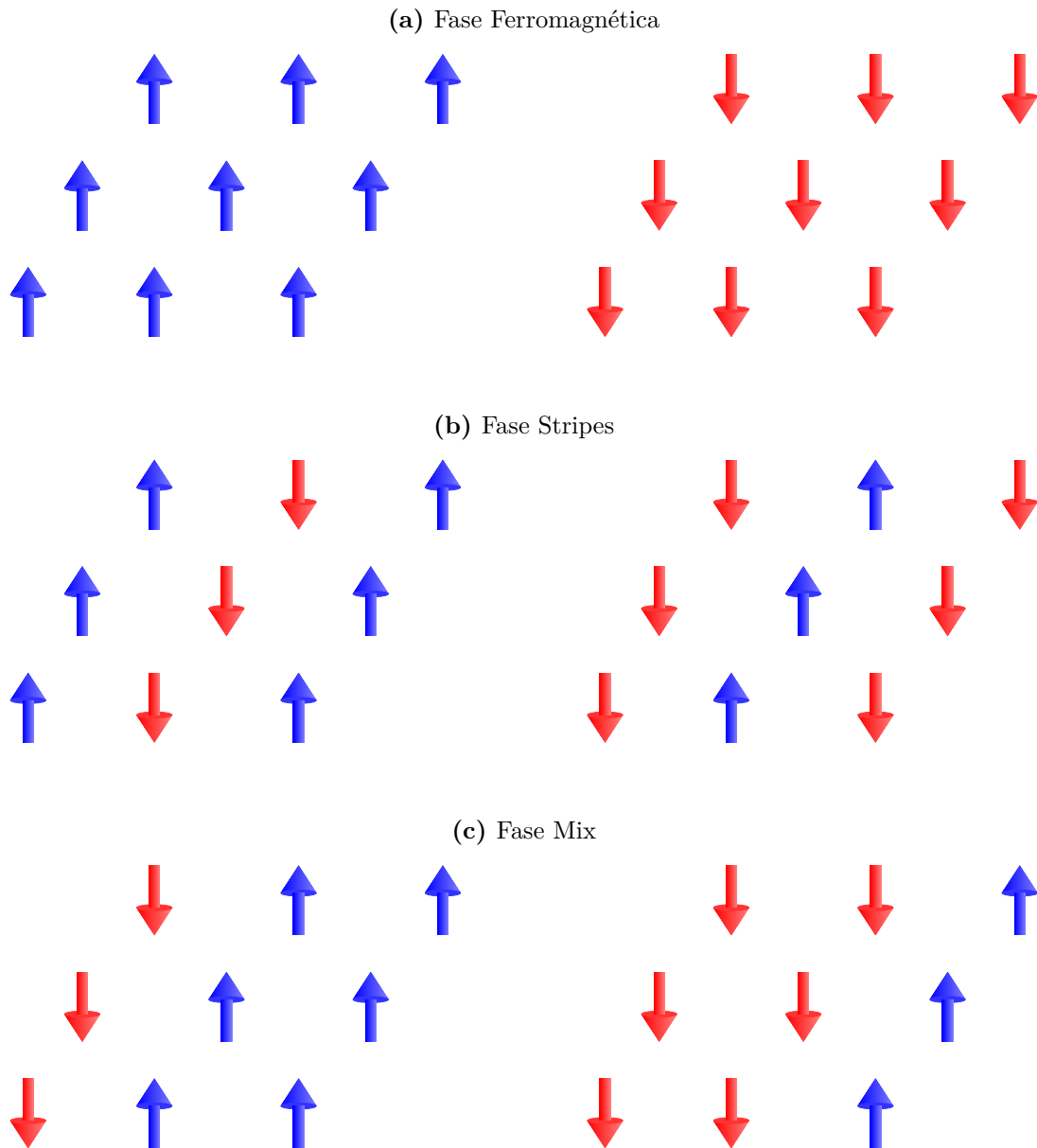
interações sobre o eixo principal como também anula as interações que ocorrem fora desse eixo. Além disso, tal particularidade nos mostra que o critério de mínima energia só será plenamente satisfeito se $\sigma_{i,j-1}$ e $\sigma_{i,j+1}$ assumirem a mesma orientação que $\sigma_{i,j}$. E como esses elementos estão sempre sobre as mesmas colunas apontadas para a direção \hat{v} conforme dispõe a figura 3.1, então, cada uma delas deve adotar uma única orientação independentemente da orientação das outras. Um outro aspecto interessante que vale a pena destacar é que nesta circunstância o sistema bidimensional passa a se comportar como um conjunto de cadeias de spins unidimensionais desacopladas. Esta característica associada à expressão final da equação (3.6) nos leva a crer que este caso particular do modelo expõe um conjunto de sistemas independentes dos tipo Ising unidimensional a menos de uma constante. Tal condição associada às possíveis orientações *up* ou *down* que as colunas podem adquirir expõem um conjunto de configurações aceitáveis e igualmente prováveis a serem assumidas pelo sistema como um todo.

Neste sentido, é possível presumir que as configurações em questão se associam às fases ferromagnética (quando todas as colunas estão em acordo de orientação), *stripes* (quando as colunas se revezam alternadamente em termos de orientação) e uma fase mista (que corresponde a mistura entre as duas fases anteriores), onde as possíveis configurações deste estado fundamental podem ser respectivamente exemplificadas pela figura 3.4. Nessas condições, qualquer que seja a fase assumida pelo sistema, ela será igualmente equivalente do ponto de vista energético. Além disso, como consequência de toda essa dinâmica, cabe retificar que o sistema não assume uma característica de frustração, conforme foi mencionado em estudos preliminares desenvolvidos acerca desse modelo [96]. Na verdade, o que observamos em $J_a = 2.0$ é a descaracterização do comportamento bidimensional do sistema conforme já destacamos. Para reforçar a ausência de frustração neste ponto, observa-se que além da hamiltoniana resultante (equação (3.6)) não admitir competição entre as ligações, também é possível observar que a rede triangular não dificulta o alcance de mínima energia. Em adição a isso, é possível ainda recorrer à equação

$$P = \prod_{\langle i,j \rangle} \text{sign}(J_{i,j}), \quad (3.7)$$

que ao buscar o mínimo de energia efetua-se o produtório dos sinais de todas as ligações possíveis da rede, neste caso, admite-se um sinal positivo quando a ligação atende ao critério de mínima energia e um sinal negativo no caso contrário [36]. Com base nisso, o sistema é dito frustrado quando P assume um valor negativo, o que de fato não acontece para esse sistema nas condições aqui discutidas. Outro fato interessante é observado quando o sistema se encontra com o par $J = 1.0$ e $J_a = 4.0$. Ao assumir esses valores, podemos notar que a equação (3.3) irá corresponder a:

$$\mathcal{H}_{i,j} = \sigma_{i,j} [-5J(\sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1}) + J(\sigma_{i-1,j-1} + \sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j+1} + \sigma_{i+1,j})]. \quad (3.8)$$

Figura 3.4: Esquema ilustrativo das possíveis fases em $J = 1.0$ e $J_a = 2$.

Quando o sistema admite esta característica imediatamente é possível perceber que os coeficientes que acompanham as parcelas da equação (3.8) não possuem mais o mesmo sinal como estava acontecendo até $J_a < 2.0$. Isto sinaliza que agora essas parcelas tendem a se opor em relação às orientações que cada conjunto de spins pode assumir, pois no estado fundamental a 1ª parcela visa o ordenamento ferromagnético ao passo que a 2ª parcela visa o ordenamento antiferromagnético. Tal exigência se torna ainda mais evidente quando buscamos minimizar a energia da equação (3.8), onde, neste caso, o sistema obriga os spins vizinhos, representados pela primeira parcela da equação, a assumirem a mesma orientação que o spin $\sigma_{i,j}$, enquanto que a segunda parcela deverá se manter em uma orientação contrária a ele. Desta forma, os spins que estão fora do eixo principal tendem a se alinhar em oposição àqueles que se encontram sobre o eixo principal.

Figura 3.5: Possíveis orientações adotadas por um sítio arbitrário quando o sistema se encontra com $J = 1.0$ e $J_a = 4.0$.



Esta interpretação conduz a duas possíveis configurações para um sítio arbitrário conforme é exposto pela figura 3.5. Ao observá-las com cuidado, podemos verificar que estas possíveis representações correspondem a um sítio arbitrário da fase *stripes* conforme foi destacado na figura 3.4b. Neste sentido, o estado fundamental do sistema nessas condições adquire uma configuração distinta da fase ferromagnética conforme havíamos identificado para $J_a < 2$. Além disso, vale ressaltar também que a partir da equação (3.8) a energia correspondente ao estado fundamental assumida pelo sistema nessas condições irá equivaler a $-7J$, conforme já foi exposto em estudos preliminares [96].

3.3 O modelo com $J = 1.0$ e $J_a < 0$

Nesta seção, vamos avaliar o comportamento do sistema quando J_a assume valores negativos. Isto quer dizer que até um J_a crítico a vibração da rede irá a partir de agora privilegiar do ponto de vista energético os spins de um sítio arbitrário situados fora do eixo principal. Então, a etapa inicial de nossa abordagem por este espectro consiste em atribuir ao modelo o valor de $J_a = -1.0$. Neste caso, devido ao pequeno valor absoluto de J_a é de se esperar que o sistema sofra apenas uma pequena influência da vibração da rede, assim como acontece em $J_a = 1.0$. Além disso, podemos perceber que quando atribuímos os valores de $J = 1.0$ e $J_a = -1.0$ à equação (3.3) obtemos a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{i,j} &= \sigma_{i,j} \left[-0J(\sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1}) - \frac{3}{2}J(\sigma_{i-1,j-1} + \sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j+1} + \sigma_{i+1,j}) \right] \\ &= \sigma_{i,j} \left[-\frac{3}{2}J(\sigma_{i-1,j-1} + \sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j+1} + \sigma_{i+1,j}) \right]. \end{aligned} \quad (3.9)$$

A interpretação desta equação nos traz informações substanciais sobre o comportamento do sistema neste estágio. A partir dela já é possível notar que a preferência de ordenamento no estado fundamental é ferromagnética devido ao sinal negativo que acompanha o coeficiente da equação resultante em (3.9). Também podemos perceber que de forma oposta ao que acontece em $J_a = 2.0$, agora são as ligações sobre o eixo principal que

são anuladas pela vibração da rede. Para um entendimento mais abrangente sobre este aspecto, vale comentar que nestas condições o sistema impõe para qualquer sítio escolhido da rede magnética o fato de que não há uma interação resultante diferente de zero a ser contabilizada entre o spin $\sigma_{i,j}$ e os seus spins vizinhos que se encontram especificamente sobre o eixo principal.

Figura 3.6: Possíveis orientações adotadas por um sítio arbitrário quando o sistema se encontra com $J = 1.0$ e $J_a = -1.0$.



Além disso, para que o sistema obedeça ao critério de mínima energia podemos observar ainda com base na equação (3.9) que os spins situados fora do eixo principal devem necessariamente assumir a mesma orientação que o spin $\sigma_{i,j}$. Por consequência disso, as configurações aceitáveis para este caso em particular seguem as mesmas perspectivas obtidas para $J_a = 0.0$ e $J_a = 1.0$, conforme é apresentado pela figura 3.6. Tal característica ao ser replicada pela rede, promove uma energia do estado fundamental equivalente a $-3J$, pois apesar da vibração da rede anular o cômputo das interações que existem sobre o eixo principal para o cálculo da energia, esta mesma vibração reforça as demais interações a ponto de compensar essa ausência de modo que a energia no estado fundamental continue sendo equivalente aos casos em que tínhamos $J_a = 0.0$ e $J_a = 1.0$. Tudo isso reforça ainda mais o fato de que realmente o sistema se encontra na fase ferromagnética conforme já havíamos indicado anteriormente.

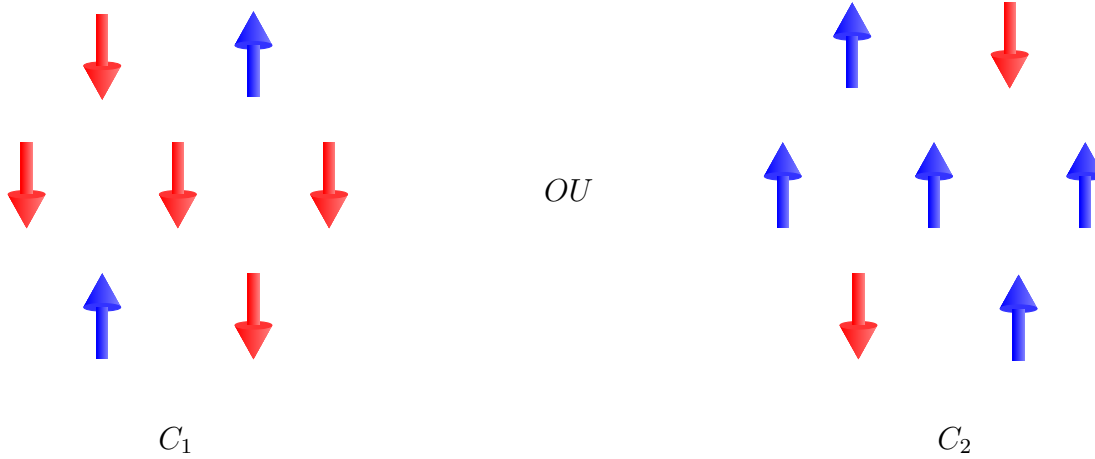
Avançando agora para uma situação em que o sistema se encontra com $J = 1.0$ e $J_a = -3.0$, iremos perceber que a equação (3.3) irá se ajustar à expressão:

$$\mathcal{H}_{i,j} = \sigma_{i,j} \left[2J(\sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1}) - \frac{5}{2}J(\sigma_{i-1,j-1} + \sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j+1} + \sigma_{i+1,j}) \right]. \quad (3.10)$$

Para que a equação (3.10) obedeça ao critério de mínima energia podemos observar que os spins da 1ª parcela que se encontram sobre o eixo principal devem assumir uma orientação anti-paralela em relação ao spin $\sigma_{i,j}$, fato este que também se sustenta devido ao sinal positivo do coeficiente desta parcela, sendo assim, surge então uma preferência para o ordenamento antiferromagnético. Por outro lado, os spins da 2ª parcela que se encontram fora do eixo principal devem assumir a mesma orientação que o spin $\sigma_{i,j}$

favorecendo a existência de um ordenamento ferromagnético entre eles. Assim, para que o sistema atenda plenamente o critério de mínima energia, as possíveis configurações de um sítio arbitrário devem corresponder às disposições apresentadas pela figura 3.7. No

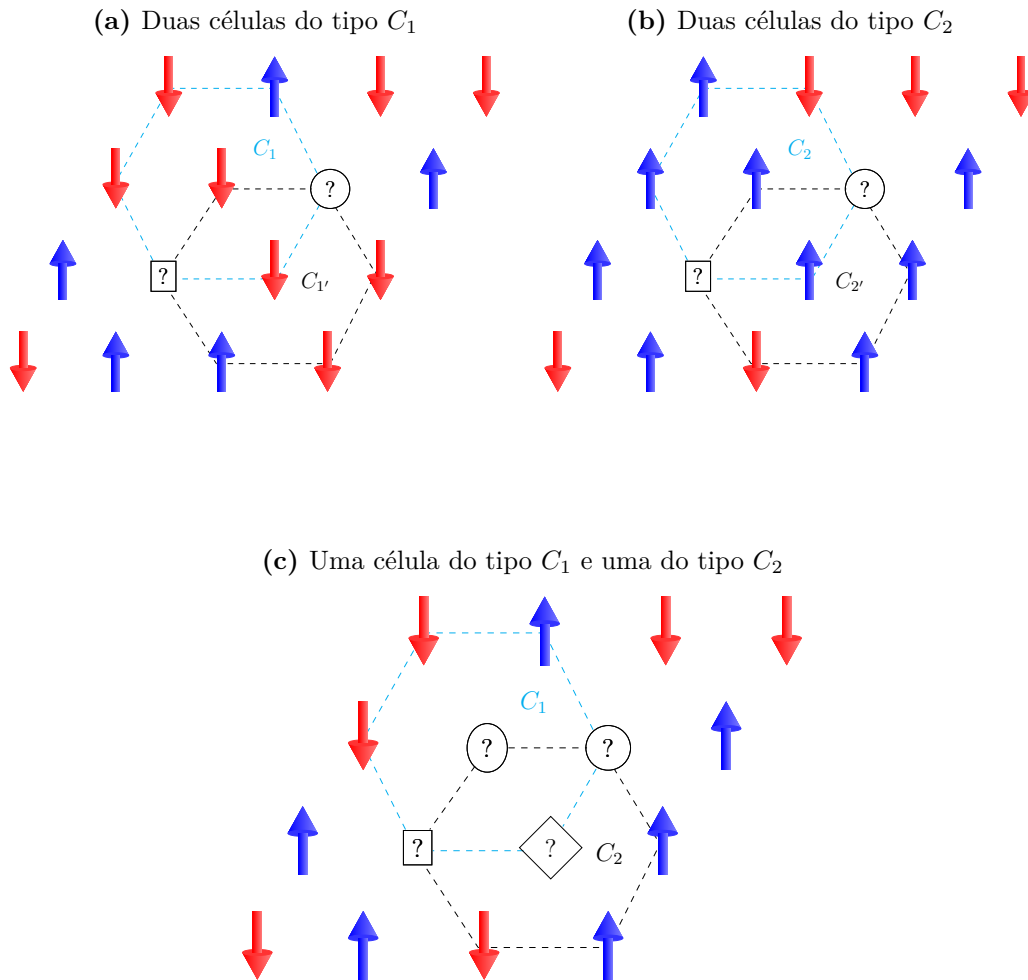
Figura 3.7: Possíveis orientações adotadas por um sítio arbitrário e seus spins vizinhos quando o sistema se encontra com $J = 1.0$ e $J_a = -3.0$.



entanto, a replicação de tal comportamento para a rede como um todo não se mostra possível, pois ao tentarmos replicar a célula do tipo C_1 poderemos notar que o sistema não irá conseguir satisfazer o mínimo energético de todas as ligações envolvidas entre duas células que se interceptam conforme pode ser visualizado pela figura 3.8a. Este mesmo entendimento pode ser estendido para duas células do tipo C_2 e serem ainda mais intensificados quando a intersecção envolve uma célula do tipo C_1 e uma do tipo C_2 , como podem ser respectivamente observados pelas figuras 3.8b e 3.8c. Essa dificuldade em manter a orientação do spin capaz de satisfazer todas as ligações como é exposto nos diversos cenários representados pela figura 3.8 está vinculada à ideia de minimizar por inteiro a equação (3.10). Mas a busca pelo caminho de menor energia é uma condição inerente de qualquer sistema físico [97, 98], neste sentido, na impossibilidade de minimizar ambas as parcelas envolvidas nesta equação o sistema buscará minimizar aquela parcela que melhor contribui para um mínimo possível. Dessa forma, é de se esperar que nestas condições o sistema favoreça a 2ª parcela visto que o módulo do seu coeficiente é maior e portanto traz uma contribuição mais relevante para um mínimo energético viável. Com base nisso, a rede como um todo deve seguir o ordenamento ferromagnético sugerido pela 2ª parcela cuja energia neste acessível estado fundamental seja equivalente a $-3J$ assim como também acontece para $J_a = -1.0$.

A dinâmica envolvendo $J_a < 0$ fica ainda mais interessante quando o sistema se encontra em um estágio em que $J = 1.0$ e $J_a = -4.0$, cuja equação (3.3) irá se ajustar à expressão:

$$\mathcal{H}_{i,j} = \sigma_{i,j} [3J(\sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1}) - 3J(\sigma_{i-1,j-1} + \sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j+1} + \sigma_{i+1,j})]. \quad (3.11)$$

Figura 3.8: Ilustração de duas células unitárias que se interceptam em uma rede 4 x 4.

Neste caso, podemos perceber que a intenção de minimizar integralmente a energia da equação (3.11) irá conduzir às mesmas condições de configurações representadas pelas figuras 3.7 e às mesmas impossibilidades elencadas pela figura 3.8 conforme dispõe a análise da equação (3.10) associada a $J_a = -3.0$. No entanto, a equação (3.11) também nos mostra que o módulo de cada coeficiente vinculado a cada parcela é o mesmo. Com base nisso, o sistema fica ao mesmo tempo impossibilitado de minimizar a equação como um todo e incapaz de favorecer qualquer ordenamento vinculado a uma de suas parcelas em prol do caminho global de menor energia. E uma vez que cada uma destas parcelas visa garantir um tipo de ordenamento específico distinto, fato este que exemplifica a existência de competição entre as interações, temos que tais características analisadas em conjunto nos levam a crer que neste ponto em que o modelo assume o valor de $J_a = -4.0$, o sistema é dito frustrado de acordo com o que foi discutido na seção 2.1. Este aspecto do modelo é extremamente interessante, pois em geral os modelos usam o acoplamento spin rede como um fator capaz de atenuar a frustração a ponto de filtrar uma determinada estrutura magnética de interesse [99, 100]. No entanto, o modelo aqui proposto com $J_a = -4.0$ nos mostra exatamente o contrário, pois esta intensidade de acoplamento busca favorecer a

frustração ao invés de atenuá-la. Desse modo, a busca por um mínimo energético acessível deve fazer com que cada célula dotada de um sítio escolhido, juntamente com os seus vizinhos, assumam aleatoriamente a configuração correspondente ao ordenamento proposto pela 1ª parcela ou pela 2ª parcela em virtude da igualdade do módulo dos coeficientes de cada uma delas. Então, de forma análoga ao que é informado por Anderson e G. Toulouse [46] (autoridades de destaque no assunto de sistemas frustrados), a provável dinâmica associada a equação (3.11) deverá nos mostrar que haverá uma alternância de sinais (positivo e negativo vinculado a cada parcela) capaz de estabelecer o tipo de ordenamento que deverá ser respeitado pelas ligações associadas ao spin escolhido da rede magnética. Assim espera-se que a manifestação deste comportamento não só expresse um mínimo energético acessível de $-3J$ como também faça com que o sistema seja conduzido a um tipo de fase extremamente particular.

O último par estratégico a ser discutido aqui consiste nos valores de $J = 1.0$ e $J_a = -5.0$ de modo que a equação (3.3) deverá se ajustar à expressão:

$$\mathcal{H}_{i,j} = \sigma_{i,j} \left[4J(\sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1}) - \frac{7}{2}J(\sigma_{i-1,j-1} + \sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j+1} + \sigma_{i+1,j}) \right]. \quad (3.12)$$

Novamente nos deparamos com uma situação em que a busca pela minimização integral da equação (3.12) nos conduzirá às mesmas condições de configurações apresentadas pela figura 3.7 e também às mesmas impossibilidades elencadas pela figura 3.8 conforme também já havíamos mencionado para os casos de $J_a = -3.0$ e $J_a = -4.0$. Mas diferentemente do caso anterior em que tínhamos $J_a = -4.0$ e de forma similar a situação em que tínhamos $J_a = -3.0$, podemos perceber que em virtude da diferença dos coeficientes de cada parcela o sistema provavelmente irá satisfazer a condição de mínima energia daquela parcela que mais contribui para um mínimo acessível ao longo de toda a rede. Logo, diante desta circunstância temos a 1ª parcela como a melhor opção

Figura 3.9: Exemplos de possíveis orientações adotadas por um sítio arbitrário e seus spins vizinhos quando o sistema se encontra com $J = 1.0$ e $J_a = -5.0$.



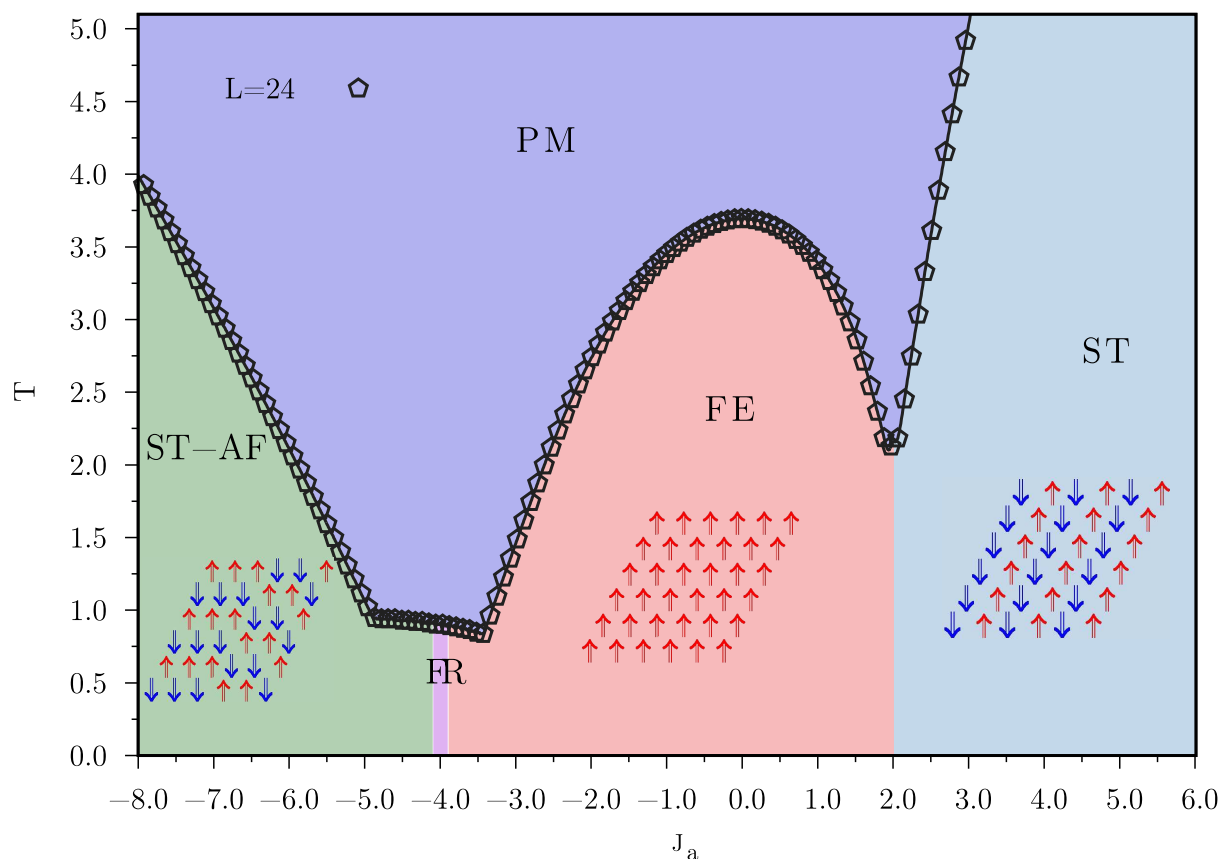
que além de fornecer uma energia equivalente a $-4J$, o que deve garantir com que a soma dos valores assumidos pelos spins da segunda parcela resulte em zero, temos também

que essa condição favorecerá um ordenamento antiferromagnético para todos os sítios que se encontram sob o eixo principal, ou seja, na direção do versor \hat{v} . Em função disso, não é possível afirmar que a rede como um todo obedecerá a este tipo de ordenamento pois a obrigatoriedade da característica antiferromagnética é apenas na direção do eixo principal. Em virtude disso, devemos ter um número maior de possíveis configurações para as células contendo o sítio selecionado e seus respectivos vizinhos conforme exemplifica a figura 3.9 que deverão representar uma rede dotada de listras antiferromagnéticas (*stripes* antiferromagnéticas) ao longo da direção do eixo principal.

RESULTADOS OBTIDOS

Neste capítulo, iniciamos nossa exposição dos resultados obtidos via simulação entrópica apresentando o diagrama de fases do modelo (figura 4.1) obtido para um tamanho de rede $L = 24$. Neste gráfico, temos o comportamento da temperatura correspondente aos máximos do calor específico para cada valor de J_a que o sistema pode assumir, entre valores positivos e negativos de destaque.

Figura 4.1: Diagrama de fases do modelo.



O diagrama de fases representa um resultado obtido através de uma construção

de uma densidade de estados conjunta $g(E_1, E_2)$, onde

$$E_1 = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (4.1)$$

$$E_2 = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \cos(2\phi_{i,j}) \quad (4.2)$$

de modo que o calor específico possa ser extraído da energia média por spin ($E/L^2 = JE_1 + J_a E_2$). Por intermédio dessa figura e das configurações avaliadas em temperaturas baixas, conseguimos identificar as fases do estado fundamental para cada região de interesse do sistema. Assim, conseguimos destacar as fases *stripe*-antiferromagnética (ST-AF) para $J_a \leq -4.03$, a fase ferromagnética (*FE*) que representa uma região intermediária compreendida entre $-3.994 < J_a < 2.0$, a fase *stripes* (*ST*) para $J_a > 2.0$ assim como o ponto de frustração máxima em $J_a = -4.0$ e seu entorno. Neste trabalho, o foco principal está direcionado para as regiões que envolvem $J_a < 0$ uma vez que já havíamos efetuado estudos iniciais acerca das regiões dispostas em $J_a \geq 0$ [96]. Deste modo, é com base no correspondente comportamento do sistema nesse espaço de fase que determinamos os pontos de maior interesse em nosso estudo conforme mencionamos na seção 3.3 e serão a partir de agora ainda mais discutidos com base nos resultados extraídos das simulações.

4.1 Propriedades do sistema para $J_a = -1.0$

Para o sistema com $J_a = -1.0$ podemos observar através do gráfico à esquerda na figura 4.2 a exposição da energia média por spin, onde podemos perceber que para baixas temperaturas o sistema se encontra em um estado ordenado cuja energia do estado fundamental corresponde a $-3.0J$. Este resultado inclusive já era previsto conforme havíamos discutido na seção 3.3 para este valor de J_a . Podemos observar que, na medida em que aumentamos a temperatura do sistema, este tipo de ordenamento começa a ser desfeito e o sistema vai evoluindo para níveis de energias maiores.

Após um certo valor de temperatura, as curvas para cada tamanho de rede começam a se comportar de maneira relativamente independente e adquirem um afastamento máximo uma das outras em uma temperatura que se encontra entre $3.4K_B T/J$ e $3.6K_B T/J$ conforme é destacado no gráfico em miniatura. Este comportamento fica ainda mais evidente quando tomamos a diferença da energia média por spin entre dois tamanhos de rede consecutivos para uma mesma faixa de temperatura, conforme é exibido pelo gráfico à direita da figura 4.2. Neste gráfico buscamos efetuar a diferença das energias médias dos maiores tamanhos de rede simulados, a saber $L = 84$ e $L = 78$. Através deste resultado podemos reforçar de forma mais clara a existência de uma região que indica uma maior sensibilidade do sistema a mudanças de temperatura, apontando para uma temperatura dentro do mesmo intervalo destacado pelo gráfico em miniatura. Esta

temperatura pode corresponder à temperatura de transição do sistema, que é responsável por apontar o momento em que o sistema sai de um estado ordenado e passa para um estado em que a probabilidade de encontrarmos os spins em posições aleatórias começa a ficar cada vez maior.

Figura 4.2: Energia média por spin em função da temperatura para vários tamanhos de rede (à esquerda) e a diferença da energia média por spin para os tamanhos de rede $L = 84$ e $L = 78$ em função da temperatura (à direita).

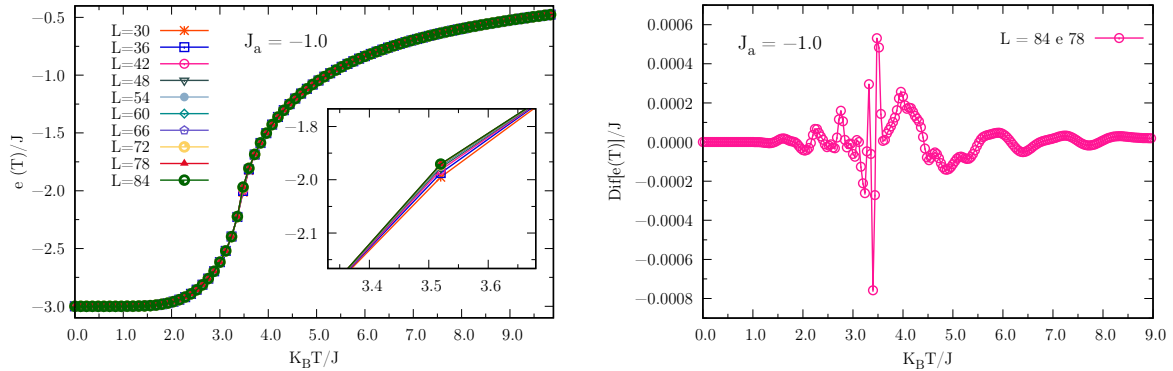
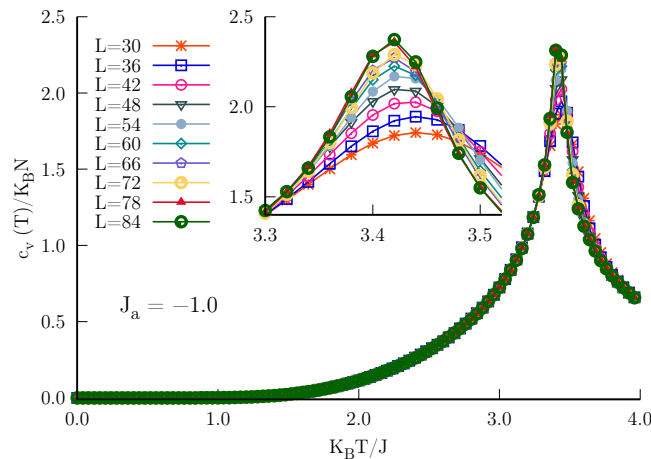


Figura 4.3: Calor específico em função da temperatura para vários tamanhos de rede.



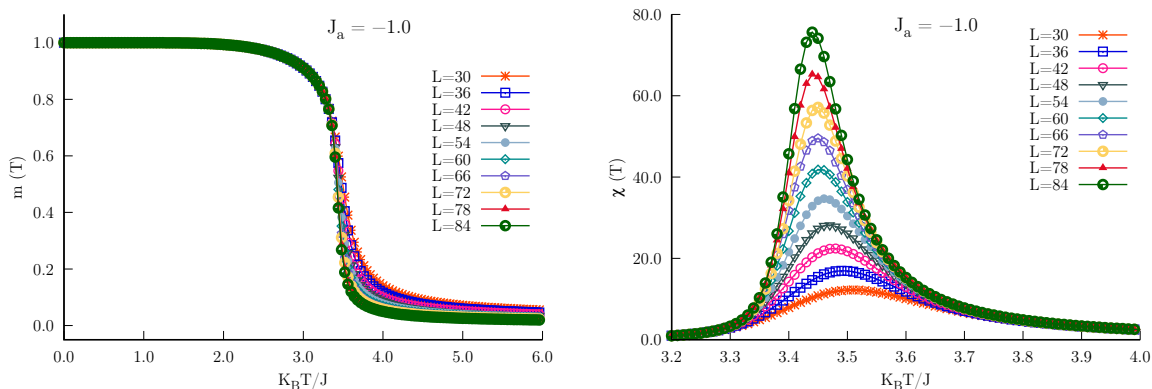
Na figura 4.3 temos o comportamento do calor específico (C_v) para todos os tamanhos de rede pré-dispostos para o J_a em questão. Neste gráfico, podemos observar que o valor de C_v começa a assumir valores diferentes de zero já próximo de $2.0K_B T/J$. Neste estágio, o sistema já começa a experimentar algumas mudanças em sua organização interna, o que pode indicar o início da desorganização do estado fundamental. Outro aspecto que vale mencionar diz respeito ao gráfico em miniatura do calor específico, que representa uma ampliação do gráfico padrão e torna nítida a evidência da existência de escala de acordo com os tamanhos de rede. Além disso, ele expõe os máximos do calor específico de maneira mais evidente e de forma mais precisa que o valor obtido pela energia

apontando também para uma temperatura de transição que se encontra entre $3.4K_B T/J$ e $3.5K_B T/J$.

Outras propriedades termodinâmicas relevantes para o nosso estudo são a magnetização e a susceptibilidade do sistema, que estão apresentadas na figura 4.4. Na imagem à esquerda, podemos observar o comportamento típico da magnetização em função da temperatura. Neste gráfico, temos a magnetização igual a 1 em baixas temperaturas, reforçando a existência de um estado ordenado correspondente à fase ferromagnética conforme também já havíamos mencionado na descrição do modelo abordada na seção 3.3 referente ao respectivo valor de J_a aqui em discussão. Na imagem à direita, temos as curvas correspondentes à susceptibilidade magnética, indicando a resposta magnética do sistema e trazendo com mais clareza a temperatura de transição correspondente a cada máximo associado a um dado tamanho de rede. Neste gráfico, podemos notar que a susceptibilidade assume um valor igual a zero em baixas temperaturas sendo consistente com o sistema no estado fundamental, pois um dado campo externo teria pouco efeito sobre o forte alinhamento marcado por este estado.

Na medida em que a flutuação térmica começa a ganhar proporções significantes, o sistema começa a apresentar uma resposta magnética não nula que cresce rapidamente com o tamanho da rede e atinge o seu ápice no máximo da susceptibilidade, onde a energia proveniente das flutuações térmicas se equivale à energia da interação de troca, favorecendo de forma proporcional a influência de algum campo externo. Após este ponto, a flutuação térmica se destaca e a resposta magnética começa a reduzir até se anular no regime de altas temperaturas. Outra característica marcante que também é mais nitidamente pronunciada em outras propriedades termodinâmicas como a magnetização e o calor específico, são os efeitos de tamanho finito garantindo a escalabilidade do sistema e no caso da susceptibilidade magnética, promovendo o estreitamento dos seus máximos na medida em que aumentamos o tamanho da rede.

Figura 4.4: Magnetização (à esquerda) e Susceptibilidade magnética (à direita) em função da temperatura para vários tamanhos de rede.



Para extrair resultados que melhor se ajustam ao comportamento do sistema no

limite termodinâmico, recorremos aos aspectos de transição de fase e fenômenos críticos conforme dispõe a seção A.3 do apêndice. Com base nisso, podemos avaliar melhor o comportamento do sistema próximo da criticalidade, classificar o tipo de transição e estabelecer qual classe de universalidade o sistema deve pertencer. Assim, iniciamos nossa investigação extraindo o expoente crítico ν onde podemos observar através da imagem à esquerda da figura 4.5, que obtemos o $\frac{1}{\nu} = 1.0351(6)$, então quando escrevemos $\nu = 1/\frac{1}{\nu}$ seremos capazes de obter o desvio padrão médio referente ao expoente ν de modo que tenhamos $\Delta\nu = \Delta(\frac{1}{\nu})/(\frac{1}{\nu})^2$. Por consequência disso, obtemos $\nu = 0.9661(5)$. De posse deste resultado, podemos obter uma projeção da temperatura crítica via extrapolação de L , extraindo os máximos do calor específico e da susceptibilidade tomando ($L \rightarrow \infty$) a ponto de obtermos $T_c = 3.40506(34)$, conforme é exibido pela imagem à direita da figura 4.5.

Figura 4.5: Gráficos dos expoentes críticos $\frac{1}{\nu}$ e T_c com $J_a = -1$.

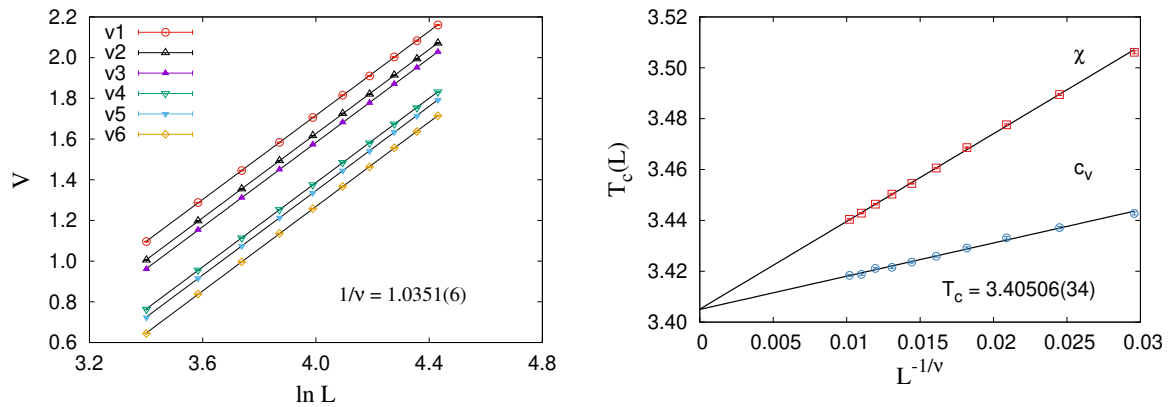
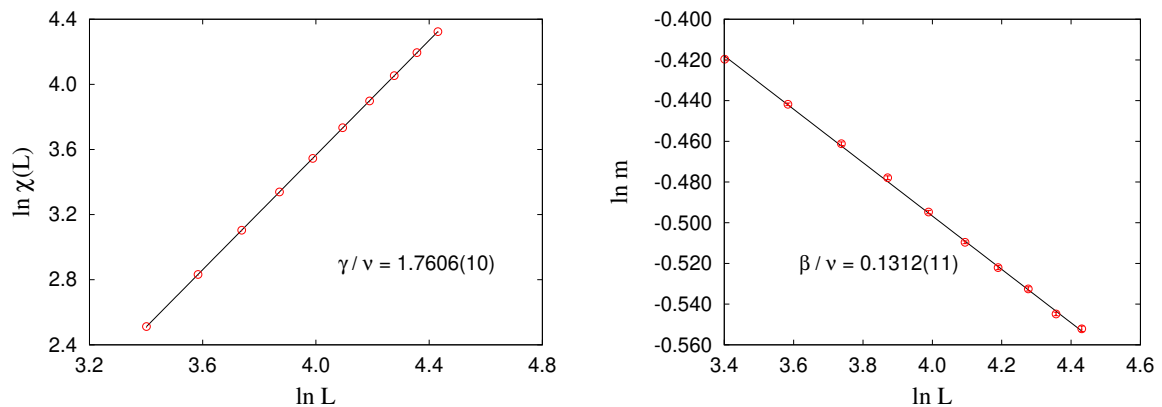


Figura 4.6: Gráficos dos expoentes críticos γ/ν e β/ν com $J_a = -1$.

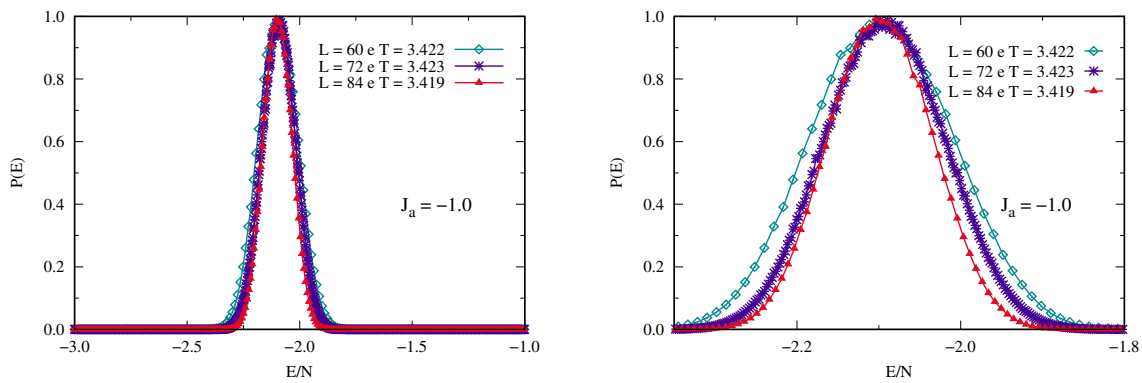


Na figura 4.6 mostramos os resultados correspondentes a $\gamma/\nu = 1.7606(10)$ e $\beta/\nu = 0.1312(11)$. Logo, se escrevermos $\gamma = \nu \frac{\gamma}{\nu}$, o erro associado é $\Delta\gamma = \Delta\nu(\frac{\gamma}{\nu}) + \nu\Delta(\frac{\gamma}{\nu})$, da mesma forma, para $\beta = \nu \frac{\beta}{\nu}$ temos $\Delta\beta = \Delta\nu(\frac{\beta}{\nu}) + \nu\Delta(\frac{\beta}{\nu})$. Assim, podemos verificar que $\gamma = 1.7009(18)$ e que $\beta = 0.1267(11)$. A validade desse conjunto de expoentes também

pode ser atestada pelas relações de escala, por exemplo, ao utilizarmos a relação de Josephson com o valor de ν obtido e com $d = 2$, obtemos $\alpha = 0,0678$ que juntamente com os valores de β e γ satisfazem adequadamente a relação de Rushbrooke. Além disso, em comparação com os expoentes críticos do modelo de Ising $2D$ [101], onde $\nu = 1.0$, $\gamma = 7/4$ e $\beta = 1/8$, também podemos perceber que os nossos resultados assumem valores muito próximos, indicando que o sistema com $J_a = -1.0$ provavelmente pertence a mesma classe de universalidade do modelo de Ising bidimensional. Isso também deve implicar que a influência da vibração da rede transmitida pelo valor de J_a aos spins não é forte o suficiente para alterar a classe de universalidade do sistema na criticalidade. Assim, mesmo com esta perturbação o sistema mantém o mesmo tipo de transição de 2ª ordem que o modelo de Ising $2D$ apresenta.

Outra característica do sistema que também reforça essa conclusão é apresentada pela figura 4.7, que corresponde à distribuição de probabilidade da energia do sistema na temperatura de transição, conforme também é mencionado no apêndice A.3. Nessa figura, temos o comportamento referente a cada tamanho de rede associado ao valor de J_a aqui em discussão. Nesse gráfico, percebe-se o comportamento do sistema sinalizando a ocorrência de um único máximo em torno da energia média para todos os tamanhos de rede em destaque. Esse fato, consiste em mais uma evidência de um comportamento típico de um sistema que sofre uma transição de fase de 2ª ordem [102, 103], conforme já havíamos mencionado.

Figura 4.7: Gráfico da distribuição de probabilidade da energia em função da energia por spin para alguns tamanhos de rede. (Gráfico original à esquerda e gráfico ampliado à direita).

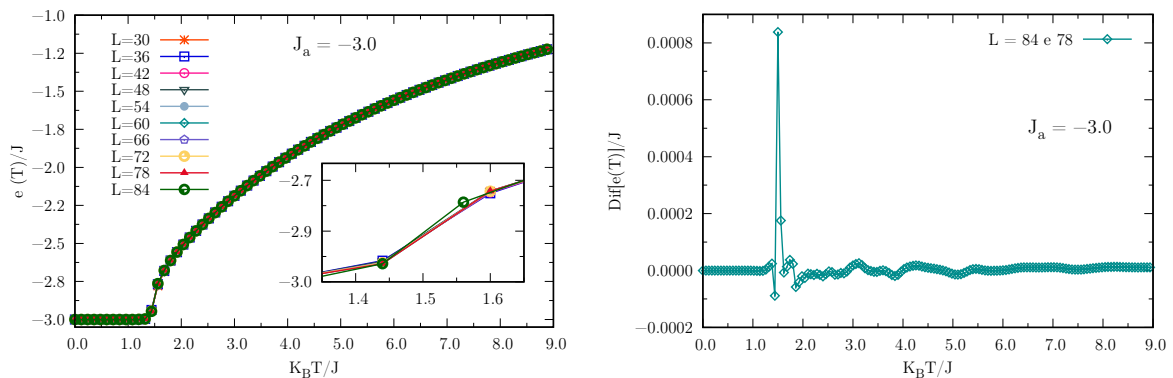


4.2 Propriedades do sistema para $J_a = -3.0$

Ao observarmos o gráfico da energia média por spin situado à esquerda da figura 4.8 já podemos notar assim como foi obtido para $J_a = -1.0$ uma energia do estado fundamental equivalente a $-3J$, cujo resultado também já era esperado conforme mencionado na seção 3.3. No entanto, podemos também observar que o sistema se mantém

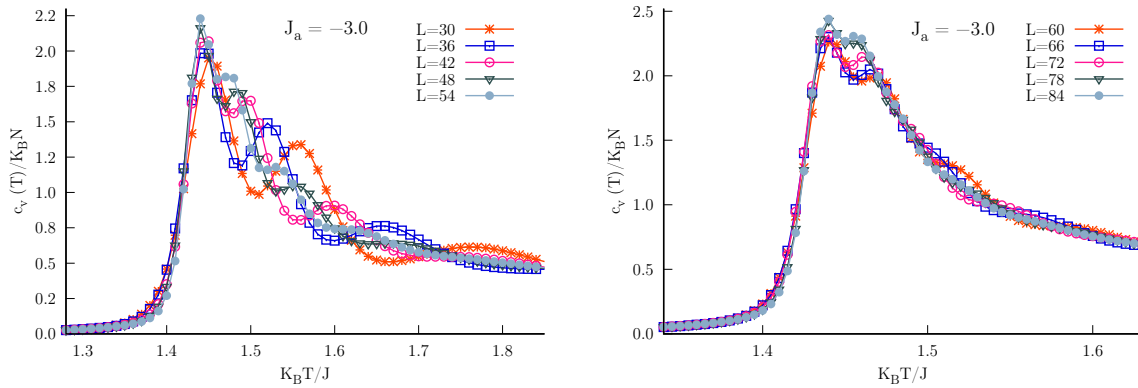
nesse estado por um intervalo de temperatura menor, que por consequência, aponta para uma temperatura de transição menor em relação à temperatura obtida para $J_a = -1.0$, trazendo assim o primeiro sinal do que este novo valor de J_a oferece para o sistema. O intervalo em que a temperatura de transição se encontra é estimado entre $1.4K_B T/J$ e $1.6K_B T/J$, assim como é exibido pelo gráfico em miniatura da energia. Para uma melhor precisão acerca do ponto onde a temperatura de transição possa ser mais provável, obtemos o gráfico à direita da figura 4.8, que mostra o comportamento da diferença das energias médias dos dois últimos tamanhos de rede simulados para uma mesma faixa de temperatura. Neste gráfico, a flutuação mais intensa sugere que a temperatura de transição deve estar próxima de $1.5K_B T/J$.

Figura 4.8: Energia média por spin em função da temperatura para vários tamanhos de rede (à esquerda) e a diferença da energia média por spin para os tamanhos de rede $L = 84$ e $L = 78$ em função da temperatura (à direita).



Na figura 4.9, mostramos o comportamento do calor específico para diversos tamanhos de rede, onde já podemos observar mais nitidamente através do gráfico do lado esquerdo o início da desordem interna acontecendo próximo de $1.35K_B T/J$, indicando o momento em que o calor específico começa a assumir valores diferentes de zero. Neste gráfico, exibimos o comportamento dessa grandeza termodinâmica para os tamanhos $L = 30, 36, 42, 48$ e 54 , onde podemos observar de maneira mais evidente a ocorrência de diversos picos do calor específico associado a cada tamanho de rede analisado. Tal aspecto pode estar associado a uma combinação da competição existente para o sistema (conforme foi sinalizado pela equação (3.10)) em conjunto com os efeitos de tamanho finito. Também podemos notar que na medida em que aumentamos o tamanho da rede, obtemos o primeiro pico cada vez mais elevado e pronunciado. Além disso, é possível observar que o segundo máximo tende a se aproximar cada vez mais do primeiro e os demais picos tendem a se desfazer com tamanhos de redes maiores. Estas últimas características são percebidas de forma mais acentuada quando admitimos tamanhos de rede ainda maiores como acontece no gráfico à direita pertencente à mesma figura 4.9, que neste caso foi obtido utilizando os tamanhos de rede $L = 60, 66, 72, 78$ e 84 .

Figura 4.9: Calor específico em função da temperatura para vários tamanhos de rede.



Para avaliar melhor a relação entre o primeiro e o segundo máximo do calor específico que se mostram mais proeminentes nos últimos tamanhos aqui simulados, efetuamos dois ajustes lineares com a intenção de obtermos alguma referência entre eles no limite termodinâmico. No gráfico à esquerda da figura 4.10, calculamos o módulo da diferença entre os primeiros e segundos máximos consecutivos do calor específico para todos os tamanhos de rede analisados na figura 4.9 e notamos que conforme L aumenta, a diferença entre os máximos diminui aproximando-se de zero no limite de $L^{-1} \rightarrow 0$. Isso significa que no limite termodinâmico os dois máximos deverão ter a mesma altura. De maneira análoga a isso, calculamos também o módulo da diferença das temperaturas correspondentes aos máximos avaliados do calor específico e obtemos o gráfico à direita da figura 4.10. A partir dele, também podemos perceber que a diferença entre as temperaturas se aproxima de zero quando $L^{-1} \rightarrow 0$, o que nos indica que os dois máximos provavelmente terão a mesma temperatura quando $L \rightarrow \infty$. Logo, com base no que foi exposto por cada gráfico da figura 4.10, podemos presumir que no limite termodinâmico haverá apenas um único máximo apontando para uma única transição de fase, que é sinalizada pelo primeiro pico vinculado a cada tamanho finito aqui simulado.

Figura 4.10: Gráficos do ajuste linear do módulo da diferença do primeiro e segundo máximo do calor específico (à esquerda) e do módulo da diferença da temperatura destes máximos (figura à direita) em função do inverso do tamanho da rede.

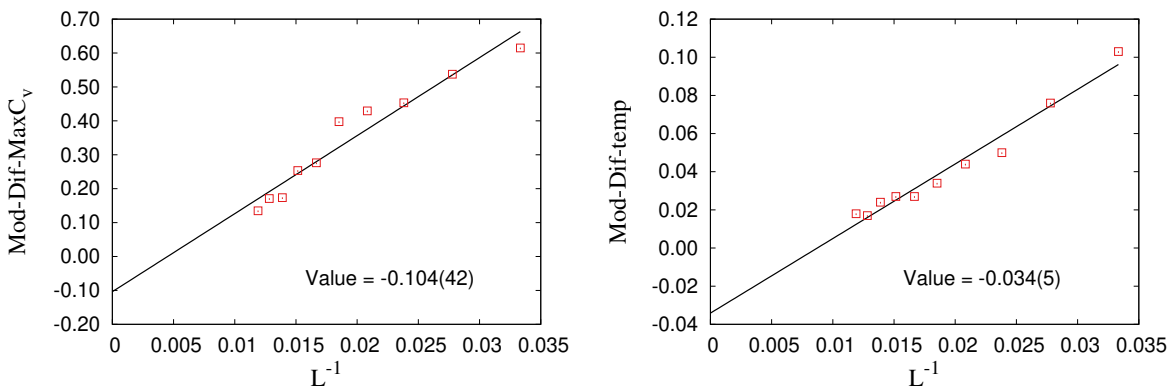
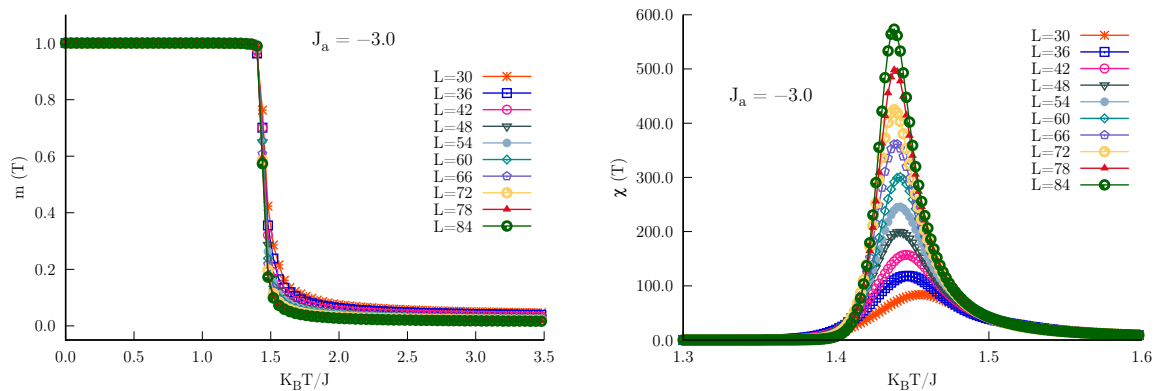


Figura 4.11: Magnetização (à esquerda) e Susceptibilidade magnética (à direita) em função da temperatura para vários tamanhos de rede.



No gráfico à esquerda da figura 4.11, temos o comportamento da magnetização, que em baixas temperaturas assume o seu valor igual a 1, reforçando a existência de um estado ordenado equivalente à fase ferromagnética, de acordo com o que foi estabelecido pela parcela dominante da equação (3.10). A saída do sistema dessa fase ordenada para uma de ordem menor não acontece de forma tão suave como ocorre em $J_a = -1.0$, o que pode sinalizar a ocorrência de um tipo de transição de fase diferente. No gráfico à direita desta mesma figura, mostramos o comportamento da susceptibilidade magnética, apresentando uma característica de como o sistema pode responder a influências magnéticas externas. Neste gráfico, podemos observar leves deslocamentos dos picos na medida em que aumentamos o tamanho da rede, onde inicialmente, para tamanhos de rede menores, os picos se deslocam para a esquerda. Para tamanhos intermediários, há um leve deslocamento para à direita e para os últimos tamanhos surge uma tendência mais estabilizada de suas posições. Esse comportamento peculiar e o fato desses máximos alcançarem valores tão elevados em comparação ao comportamento desta mesma grandeza quando o sistema se encontrava com $J_a = -1.0$, pode estar intimamente associado à existência de uma interação concorrente e aos fortes efeitos de tamanho finito que recaem sobre esta condição, podendo criar estados extremamente sensíveis ao tamanho.

Para entender um pouco mais acerca das nuances por trás das características da transição do sistema na região crítica, nós também buscamos extrair os expoentes críticos associados a $J_a = -3.0$. Assim, de maneira análoga ao caso em que o sistema se encontrava com $J_a = -1.0$, obtemos no gráfico à esquerda da figura 4.12 o valor de $\frac{1}{\nu} = 0.9357(11)$, que nos conduziu a um valor de $\nu = 1.0687(12)$. No gráfico à direita, a extrapolação simultânea que envolve as temperaturas de transição referentes aos máximos do calor específico e da susceptibilidade de cada tamanho simulado nos aponta para um valor de $T_c = 1.43076(67)$, que é significativamente menor que o valor de T_c estipulado para $J_a = -1.0$. Além disso, é possível perceber também que no limite termodinâmico

as retas correspondentes a cada grandeza termodinâmica não convergem para um único ponto, indicando uma temperatura ligeiramente diferente para o calor específico e para a susceptibilidade, como pode ser confirmado pelos gráficos da figura 4.13. Mesmo assim, a média aritmética desses valores nos conduz a um resultado de T_c condizente com o que é apresentado pela figura 4.12 (respeitando a sua margem de confiança).

Figura 4.12: Gráficos dos expoentes críticos $\frac{1}{\nu}$ e T_c com $J_a = -3.0$.

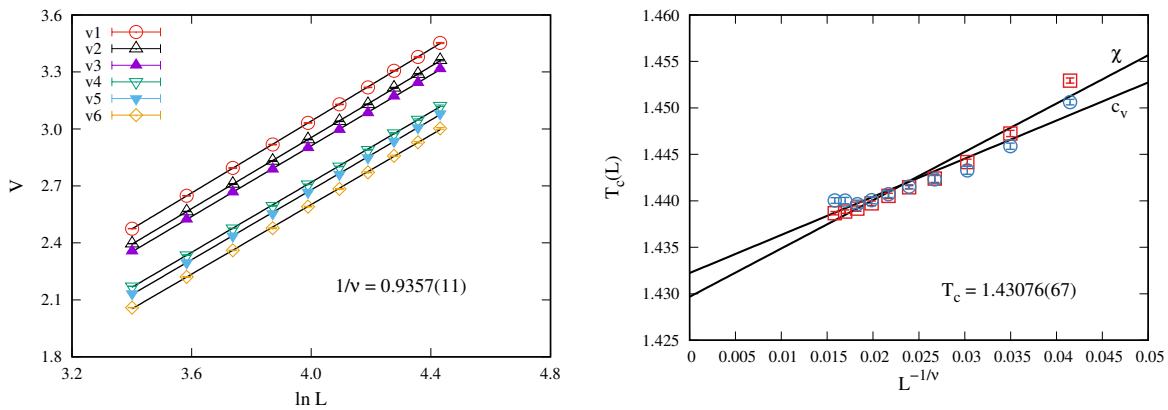


Figura 4.13: Gráficos individuais da temperatura crítica de c_v e χ com $J_a = -3.0$.

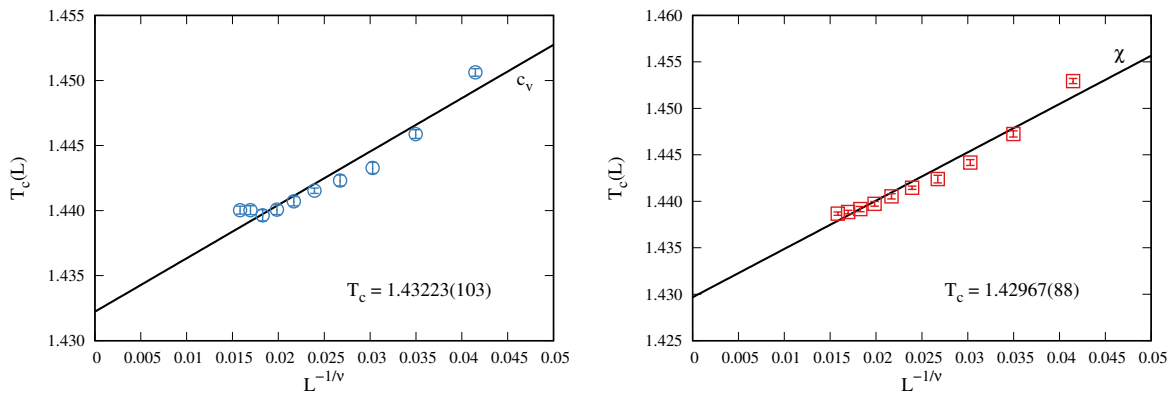
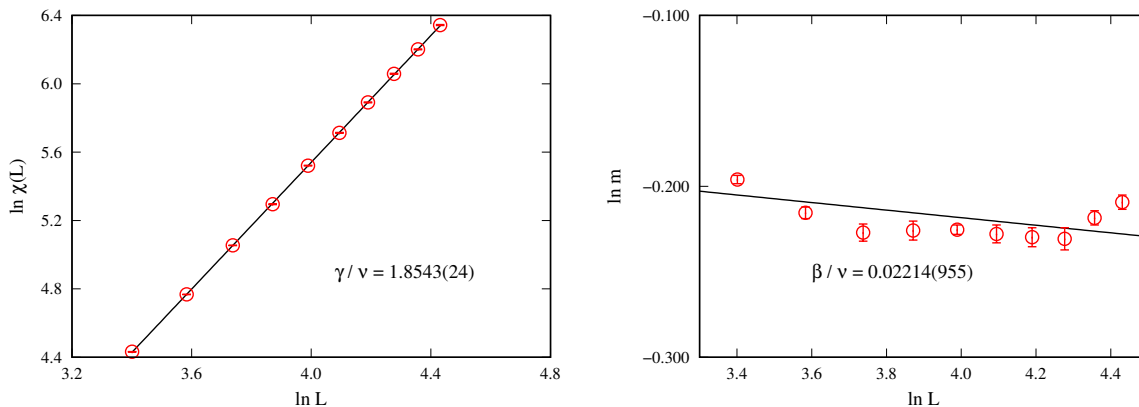


Figura 4.14: Gráficos dos expoentes críticos γ/ν e β/ν com $J_a = -3.0$.



Na figura 4.14, obtemos $\gamma/\nu = 1.8543(24)$ e $\beta/\nu = 0.02214(955)$, que nos levam aos valores de $\gamma = 1.9817(48)$ e $\beta = 0.02366(1020)$. Novamente de posse do valor de ν e utilizando a relação de Josephson nós chegamos no valor de $\alpha = -0.1374$. E neste caso, quando associamos o valor de α com os valores de β e γ , percebemos que a relação de Rushbrooke não é satisfeita, ou seja,

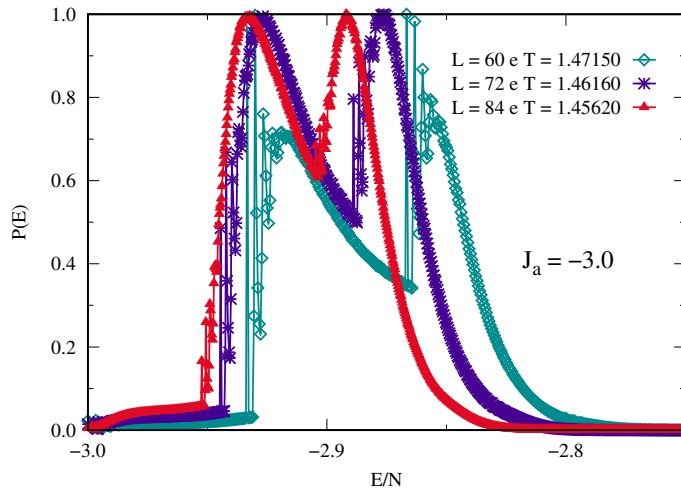
$$-0.1374 + 2 \times 0.02366 + 1.9817 = 1.8916 \neq 2. \quad (4.3)$$

E, embora nós tenhamos um erro relativo correspondente a

$$\frac{|2 - 1.8916|}{2} \approx 5.4\%, \quad (4.4)$$

que nos mostra um pequeno desvio possivelmente associado a incertezas numéricas. Essa característica, sendo tratada em conjunto de um $\alpha < 0$ (indicando a saturação precoce do calor específico [104]), de uma magnetização que não desaparece de forma contínua (conforme evidenciado pela figura 4.11) que impulsionou a obtenção de um valor de β quase nulo, nos leva a crer que o sistema está passando por um tipo de transição diferente da ocorrida em $J_a = -1.0$. Essa hipótese, ganha ainda mais força diante

Figura 4.15: Gráfico da distribuição de probabilidade da energia em função da energia por spin para alguns tamanhos de rede.



do comportamento apresentado pela figura 4.15, que dentro da margem de confiança estabelecida pelas estimativas da temperatura de transição apresentadas anteriormente, nos mostra a ocorrência de dois máximos (embora não regulares). Esse último gráfico também nos mostra que a barreira de energia entre os picos diminui conforme se aumenta o tamanho da rede. Esse comportamento é incompatível com uma transição genuinamente de 1^a ordem, pois a redução da barreira de energia entre os picos além de indicar uma latência decrescente também nos aponta para uma dificuldade do sistema em

tentar sustentar a separação entre as fases no limite termodinâmico. Tais características também já foram observadas em outros trabalhos [105, 106], os levando a crer que nessas circunstâncias o sistema estaria passando por uma transição reconhecida como de 1ª ordem “fraca”. Ainda com base na literatura, esse tipo de transição é extremamente sutil [107] e pode fazer com que numericamente as transições de 1ª ordem “fraca” se pareçam com uma transição de 2ª ordem devido à presença de uma região de coexistência extremamente pequena e de um comprimento de correlação grande o suficiente a ponto de “quase” imitar uma divergência. E embora o comprimento de correlação não tenha sido calculado diretamente, nós podemos caracterizá-lo através do comportamento da susceptibilidade [108, 109], uma vez que a função de correlação de dois pontos pode ser expressa em termos das variáveis de dois spins arbitrários S_i e S_j através da expressão

$$g(r_i, r_j) = \langle (S_i - \langle S_i \rangle) \cdot (S_j - \langle S_j \rangle) \rangle \quad (4.5)$$

$$= \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle. \quad (4.6)$$

A relação com a susceptibilidade pode também ser estabelecida a partir da relação de flutuação, onde:

$$\chi = \frac{\beta}{N} (\langle \mathcal{M}^2 \rangle - \langle \mathcal{M} \rangle^2) \quad (4.7)$$

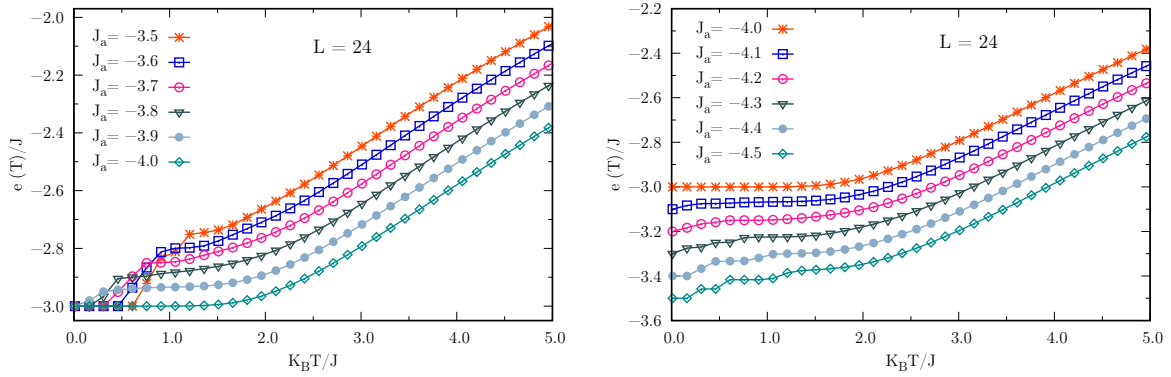
$$= \frac{\beta}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle) \quad (4.8)$$

$$= \frac{\beta}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N g(r_i, r_j) \quad (4.9)$$

com $\beta = 1/K_B T$ e N indicando o número de spins. Dessa forma, se verifica que os altos valores obtidos pela susceptibilidade exibidos na figura 4.11 sugere também a presença de um comprimento de correlação de elevada magnitude o que corrobora com o que é apontado pela literatura referente a ocorrência de uma transição de 1ª ordem “fraca”.

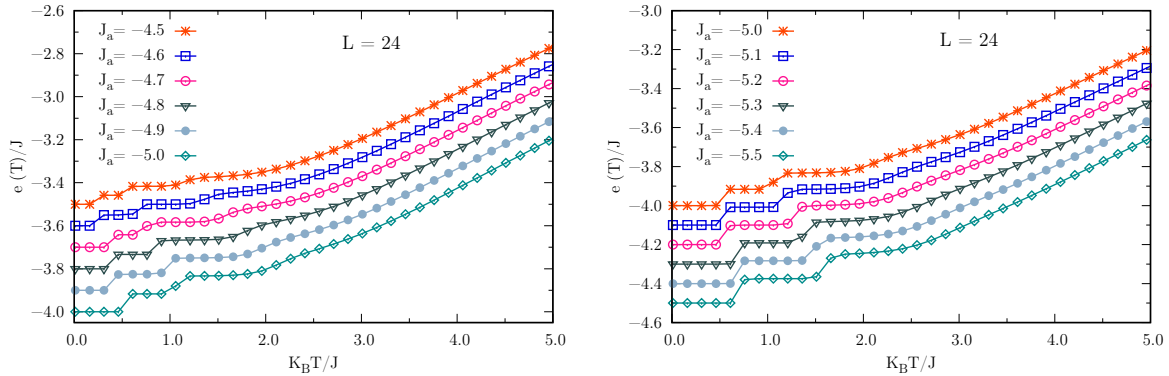
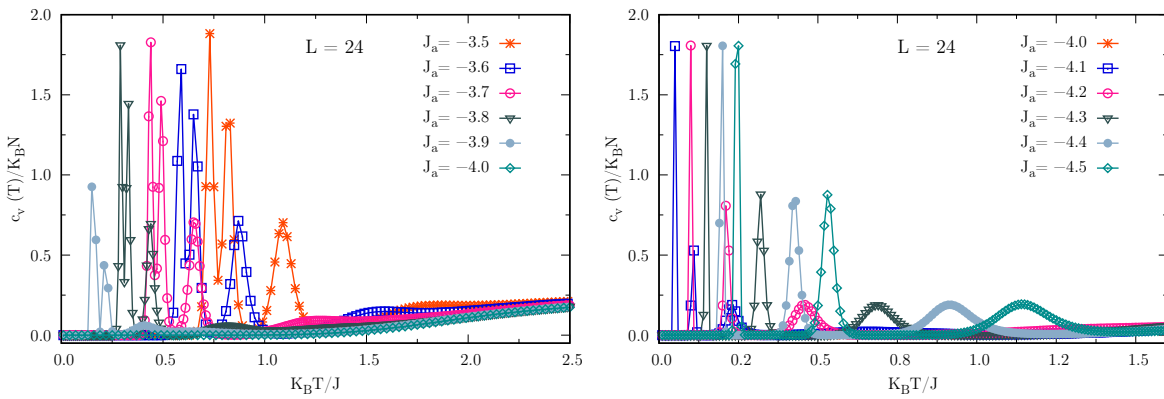
4.3 Propriedades do sistema em torno de $J_a = -4.0$

Para compreender melhor as regiões do diagrama de fase próximas do ponto de frustração máxima, em $J_a = -4.0$, avaliamos o comportamento do sistema para uma série de valores de J_a situados em torno desse ponto. Essa estratégia nos permite destacar os impactos sofridos em cada propriedade termodinâmica em função dos diferentes valores de J_a , tanto à esquerda quanto à direita do ponto de frustração máxima, bem como para outros pontos de interesse. Para isso, realizamos uma simulação via densidade de estados conjunta, atribuindo pequenas variações entre um valor e outro de J_a para um tamanho de rede fixa de valor $L = 24$.

Figura 4.16: Energia média por spin para $L = 24$ com J_a variando de -3.5 a -4.5 .

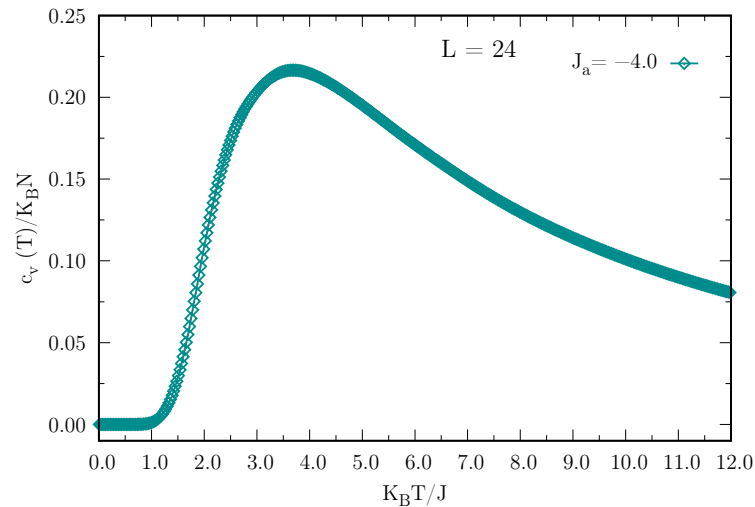
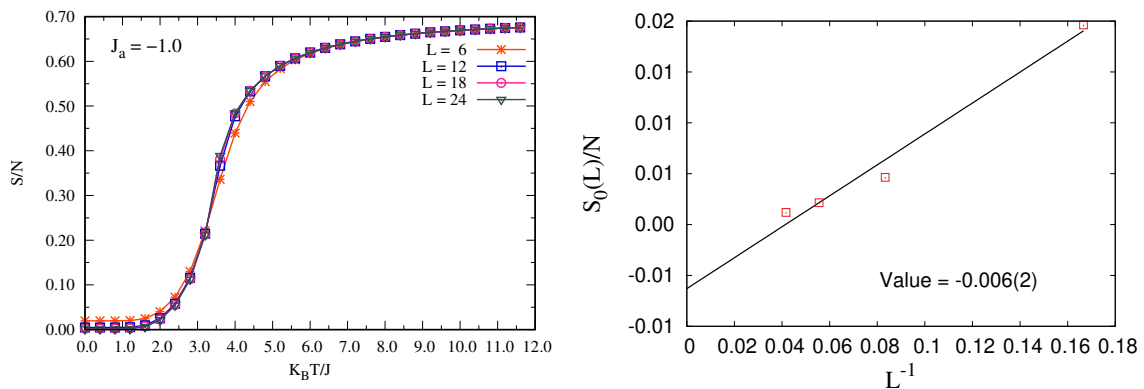
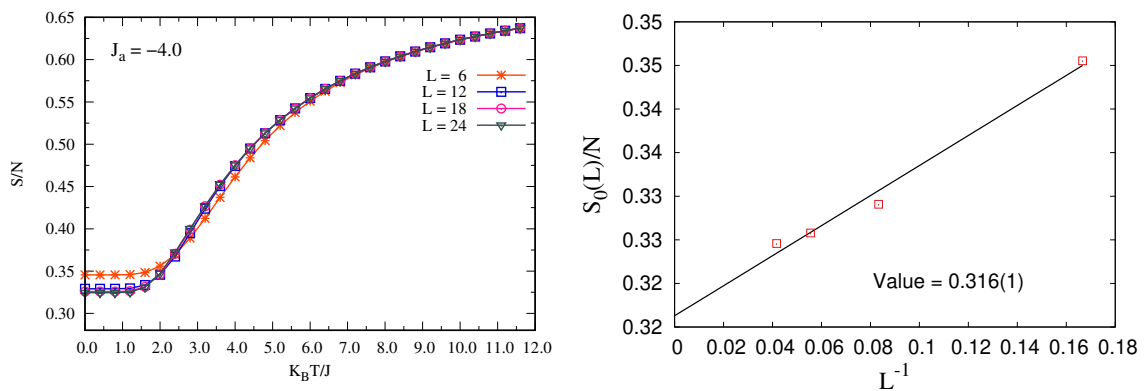
Os primeiros resultados associados a essa proposta correspondem aos gráficos da energia média por spin apresentados pelas figuras 4.16 e 4.17, onde já é possível observar que para $-4.0 \leq J_a \leq -3.5$ temos uma energia de estado fundamental equivalente a $-3J$. No entanto, a curva referente a $J_a = -4.0$ não segue o mesmo padrão comportamental das curvas anteriores, sugerindo um novo estado de mínima energia, que é consistente com o que foi demonstrado pela equação (3.11), pois neste ponto o sistema é completamente frustrado. Percebe-se também que a energia do estado fundamental não se sustenta para valores menores que $J_a = -4.0$, pois, para cada decremento de apenas 0.1, obtém-se um valor de estado fundamental nitidamente mais baixo. Isso pode estar associado à saída do sistema da condição de equilíbrio entre as forças de acoplamento concorrentes (que existe em $J_a = -4.0$), de modo que o sistema passe a favorecer a intensidade das interações antiferromagnéticas (situadas ao longo do eixo principal) para valores de J_a cada vez mais negativos. Outro aspecto interessante é a formação de um comportamento em escada da curva energética no regime de baixas temperaturas, que é mais nítido após $J_a = -4.2$ e se torna cada vez mais evidente até o valor de J_a correspondente a -5.5 . O que pode corresponder à formação de transições sucessivas que vão se tornando cada vez mais bem definidas garantindo assim a formação de um estado fundamental mais estável e distinto de $J_a = -4.0$.

Outra propriedade relevante para a nossa compreensão é o calor específico apresentado pelas figuras 4.18 e 4.22. Inicialmente, já podemos notar a marcante multiplicidade de máximos apontados pelo calor específico em todos os gráficos. No entanto, há alguns detalhes que os distingue uns dos outros e que vale a pena discutir. Para o gráfico que apresenta $-4.0 \leq J_a \leq -3.5$ (onde se busca progressivamente uma situação de equilíbrio entre as interações concorrentes), é possível notar três picos do calor específico relativo a cada valor desse parâmetro. Este comportamento aponta para a existência de fases intermediárias entre o estado fundamental e o estado mais desordenado do sistema. Além disso, é possível observar que o segundo máximo se inicia antes que o anterior termine, o que sugere a ocorrência de transições muito próximas. Em adição a isso, percebe-se também

Figura 4.17: Energia média por spin para $L = 24$ com J_a variando de -4.5 a -5.5 **Figura 4.18:** Calor específico para $L = 24$ com J_a variando de -3.5 a -4.5 

o deslocamento para a esquerda desses picos na medida em que o valor de J_a se aproxima de -4.0 , indicando a existência de transições de fase acontecendo em temperaturas cada vez mais baixas.

Para destacar o comportamento do calor específico referente a $J_a = -4.0$, apontamos um gráfico exclusivo correspondente a figura 4.19, pois os valores que essa grandeza assume são muito pequenos em relação aos demais valores assumidos por J_a . Isso pode estar associado à alta degenerescência do estado fundamental, pois nessas condições o sistema transita entre esses estados degenerados sem um aumento significativo na energia interna, resultando em uma menor variação no calor específico. A degenerescência contribui para que a energia térmica não provoque mudanças drásticas na organização do sistema, mas sim que seja distribuída entre os muitos estados possíveis de maneira que a energia seja absorvida gradualmente sobre uma faixa de temperatura mais ampla. Isso pode acarretar em um pico mais largo e menos pronunciado conforme é observado no gráfico e em outros trabalhos associados ao comportamento de sistemas frustrados [110, 43]. Com o intuito de investigar melhor as características do sistema vinculadas a esse ponto enigmático, nós obtemos o gráfico da entropia por spin em função da temperatura e efetuamos um ajuste linear para obter a entropia residual no limite

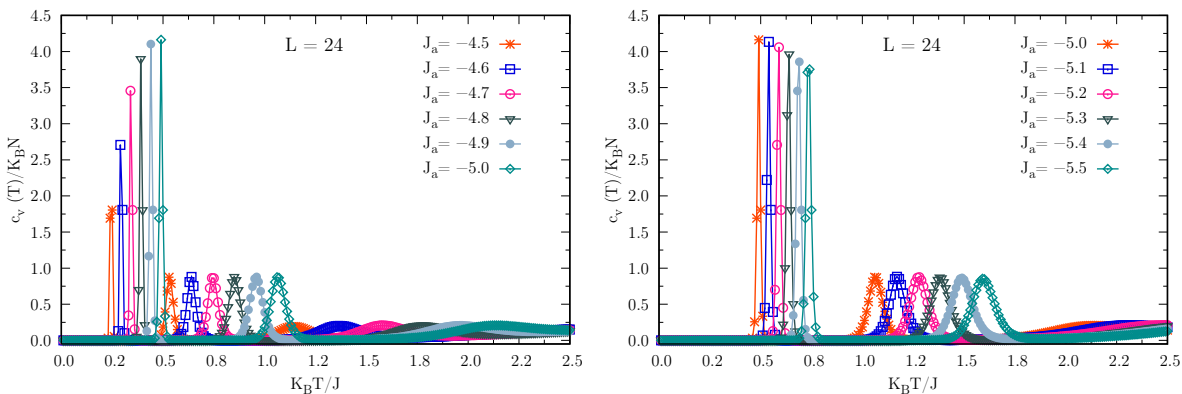
Figura 4.19: Calor específico para $L = 24$ com $J_a = -4.0$ **Figura 4.20:** Densidade da entropia (à esquerda) e ajuste linear da densidade da entropia residual (à direita) para $J_a = -1.0$ **Figura 4.21:** Densidade da entropia (à esquerda) e ajuste linear da densidade da entropia residual (à direita) para $J_a = -4.0$ 

termodinâmico. Esses gráficos foram gerados tanto para $J_a = -4.0$, que é o nosso ponto de maior interesse, quanto para $J_a = -1.0$ visando garantir a validade dos nossos resultados. Diante disso, podemos observar através da figura 4.20, associada ao sistema

dotado de um estado fundamental ferromagnético, que no gráfico à esquerda a entropia inicialmente assume um valor quase nulo. O que é justificável já que nessas condições o sistema possui dupla degenerescência, ou seja, $S_0 = \ln(2)$ que por consequência teremos $S_0/N = \ln(2)/L^2$ de modo que ao aumentarmos o tamanho da rede surja uma tendência da entropia residual se aproximar cada vez mais de zero conforme é sugerido pelo gráfico à direita dessa mesma figura. Esse resultado garante a consistência das simulações, pois reproduz corretamente o comportamento previsto para sistemas não frustrados e valida a normalização da densidade de estados utilizada nos cálculos.

Dessa maneira, nos sentimos confiantes em avaliar o comportamento entrópico do sistema diante de $J_a = -4.0$ cujas características podem ser observadas pela figura 4.21. Inicialmente, já podemos perceber que o gráfico à esquerda apresenta as curvas de entropia exibindo um comportamento marcante e distinto de $J_a = -1.0$ onde observa-se um platô em baixas temperaturas maior que zero e que se mantém praticamente invariante com o tamanho da rede. Esse resultado, além de apresentar um indicativo incontestável da presença de uma entropia residual no estado fundamental, também demonstra o comportamento das curvas no regime de altas temperaturas convergindo para o limite de $\ln(2)$ conforme é esperado para as variáveis de Ising [111, 112, 113]. O gráfico à direita traz um reforço ainda maior para a entropia residual estimando o seu valor no limite termodinâmico de modo que $S_0/N \approx 0.316$ que é um valor que se enquadra adequadamente no conjunto de valores apresentados em modelos altamente frustrados como o da rede triangular antiferromagnética [114] e o de spin-ice [115]. Dessa forma, a comparação direta entre $J_a = -1.0$ e $J_a = -4.0$ não apenas valida a nossa metodologia, mas também fornece mais uma forte evidência de que o ponto $J_a = -4.0$ corresponde de fato a uma situação de frustração máxima, com degenerescência macroscópica do estado fundamental, ausência de transição de fase aparente e dotado de entropia residual não nula no limite termodinâmico. De modo que todo esse conjunto de características nos leve a considerar esse ponto como um potencial candidato representativo de um líquido de spin clássico.

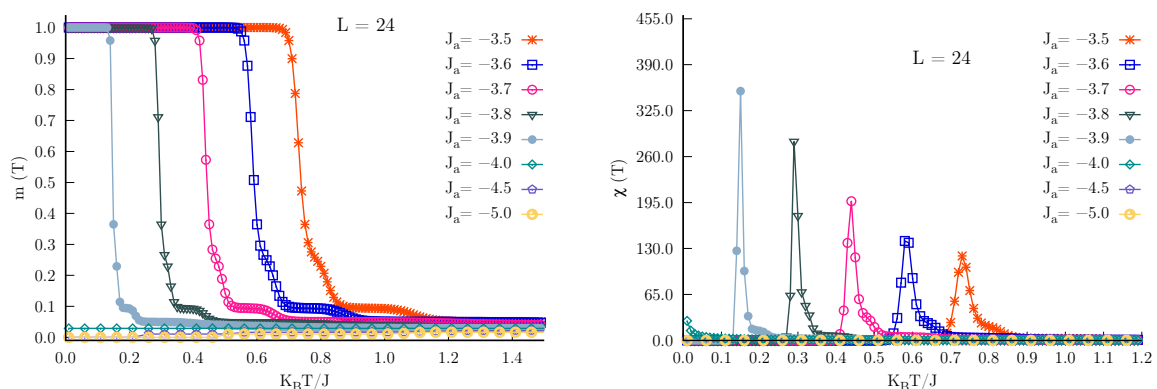
Figura 4.22: Calor específico para $L = 24$ com J_a variando de -4.5 a -5.5



Ao avaliarmos o comportamento do calor específico associado aos valores de $J_a < -4.0$ (conforme é destacado pela figura 4.18), notamos que os picos se deslocam para temperaturas cada vez maiores, indicando uma mudança de comportamento do sistema. Esse comportamento já era esperado, pois nessas condições o sistema deixa a situação de equilíbrio entre as interações concorrentes e passa a favorecer cada vez mais o alinhamento antiferromagnético dos spins situados sobre o eixo principal. Para valores ainda próximos de $J_a = -4.0$, como ocorre para $-4.5 \leq J_a \leq -4.1$, também é observado três máximos bem definidos para cada valor de J_a assim como acontece quando $-3.9 \leq J_a \leq -3.5$. No entanto, esses máximos estão mais afastados uns dos outros, sugerindo transições mais bem definidas. Apesar dos primeiros picos ainda se manterem extremamente agudos, eles apresentam alturas quase uniformes, sugerindo uma mesma natureza de transição. Os terceiros picos também apresentam alturas quase uniformes, mas são mais largos, indicando uma transição mais suave. E os segundos picos apresentam maior variabilidade em suas alturas, mas ainda apontam para transições bem definidas.

Agora, para os gráficos da figura 4.22, nota-se uma dinâmica ainda mais diferente do calor específico. Os primeiros máximos do gráfico à esquerda assumem alturas cada vez maiores, enquanto que os do gráfico à direita assumem um comportamento oposto. Isso sugere que a natureza do estado intermediário e os mecanismos para alcançá-lo estão mudando conforme o sistema assume valores de J_a cada vez mais negativos. Observa-se também que os segundos máximos em ambos os gráficos possuem a mesma altura, o que pode corresponder à existência de transições de mesma natureza. Essas transições também acontecem em temperaturas cada vez maiores e de forma mais suavizada conforme é apontado pela forma e posição desses máximos. Além disso, nota-se também que os

Figura 4.23: Magnetização e susceptibilidade para $L = 24$ com valores específicos de J_a



terceiros máximos já não apontam mais para uma transição bem definida e portanto a transição de fase final fica a cargo dos segundos máximos, o que condiz com o comportamento apontado pelo diagrama de fases mostrado na figura 4.1.

Para concluir a abordagem das propriedades termodinâmicas dessa complexa região que gira em torno de $J_a = -4.0$, passamos agora a avaliar o comportamento

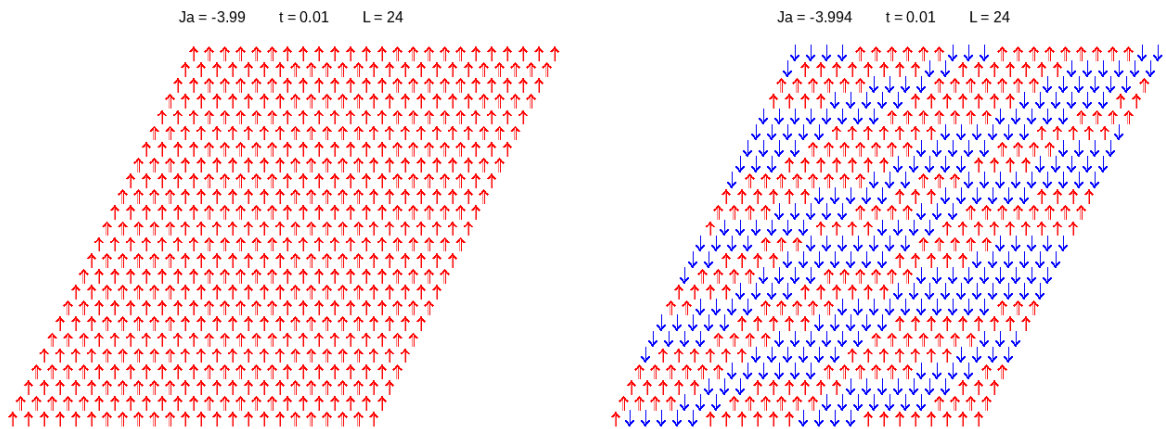
da magnetização e da susceptibilidade magnética para valores de J_a próximos desse ponto conforme expõe a figura 4.23. Na magnetização, apresentada à esquerda, podemos observar a presença de um estado ordenado ferromagnético se mantendo por intervalos de temperaturas cada vez menores no regime de baixas temperaturas para $-4.0 < J_a \leq -3.5$. Também é possível notar que a curva de queda da magnetização sofre ligeiros desvios em sua trajetória que se suavizam gradualmente na medida em que o sistema se aproxima do ponto de frustração máxima. Essa característica pode estar reforçando a existência do estado intermediário que já havíamos mencionado, que por sua vez vai se intensificando e se mostra mais desordenado que o estado anterior. Essas características também podem ser perceptíveis no gráfico da susceptibilidade pelo comportamento final da sua curva e pelos picos avançando para temperaturas cada vez menores e se tornando ainda mais pronunciados.

Quando o sistema se encontra com $J_a = -4.0$, a magnetização já se inicia próximo de zero, o que condiz com a presença da alta degenerescência do estado fundamental para esse ponto e ela deve tender a zero no regime de altas temperaturas. Em virtude da ausência de sinais claros de transição por essa grandeza, temos a susceptibilidade assumindo um comportamento divergente. Na medida em que J_a vai ficando mais negativo, a magnetização vai se aproximando ainda mais de zero para qualquer faixa de temperatura, o que era esperado pois a parcela que influencia a existência do ordenamento antiferromagnético na direção do eixo principal vai adquirindo pesos maiores em relação à segunda parcela. Já em $J_a = -5.0$, podemos observar a magnetização igual a 0 e esse comportamento deve se estender para valores ainda mais negativos. Por consequência disso, não há uma clara manifestação da susceptibilidade, isso sugere que a magnetização já não é mais adequada como parâmetro de ordem para $J_a = -4.0$ e para os outros valores de J_a ainda mais negativos.

Podemos também sustentar as inferências obtidas pelas grandezas termodinâmicas calculadas e extrair outras informações relevantes observando as configurações do sistema no estado fundamental, variando J_a próximo do ponto de frustração máxima, mantendo fixo um pequeno incremento de temperatura com respeito ao tamanho de rede $L = 24$. Esta estratégia se mostra útil para entender como o estado fundamental está se alterando quando variamos J_a em torno do ponto de interesse e também nos deve ajudar na viabilidade da proposição de um parâmetro de ordem. Na figura 4.24, podemos observar à esquerda que ainda com $J_a = -3.99$ o sistema possui um estado fundamental ferromagnético, no entanto, quando o sistema se encontra com $J_a = -3.994$, o seu estado fundamental muda e apresenta indícios da influência da frustração, o que pode indicar o momento em que o sistema começa a entrar nessa região.

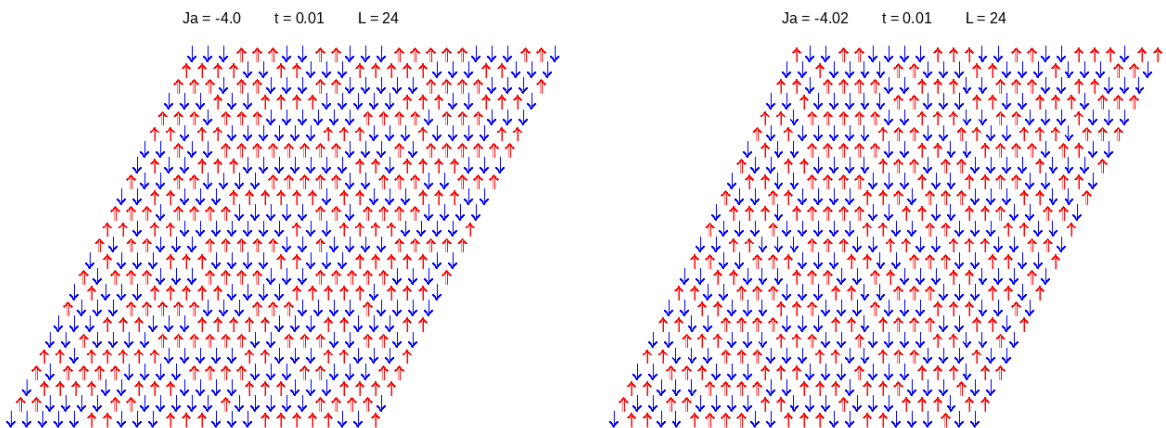
Como já sabemos, a característica de frustração é maximizada quando $J_a = -4.0$ e para este ponto podemos destacar uma das configurações do seu estado fundamental através do gráfico à esquerda da figura 4.25. Tal configuração já nos traz uma boa ideia

Figura 4.24: Configurações do estado fundamental para $J_a = -3.99$ (à esquerda) e para $J_a = -3.994$ (à direita).



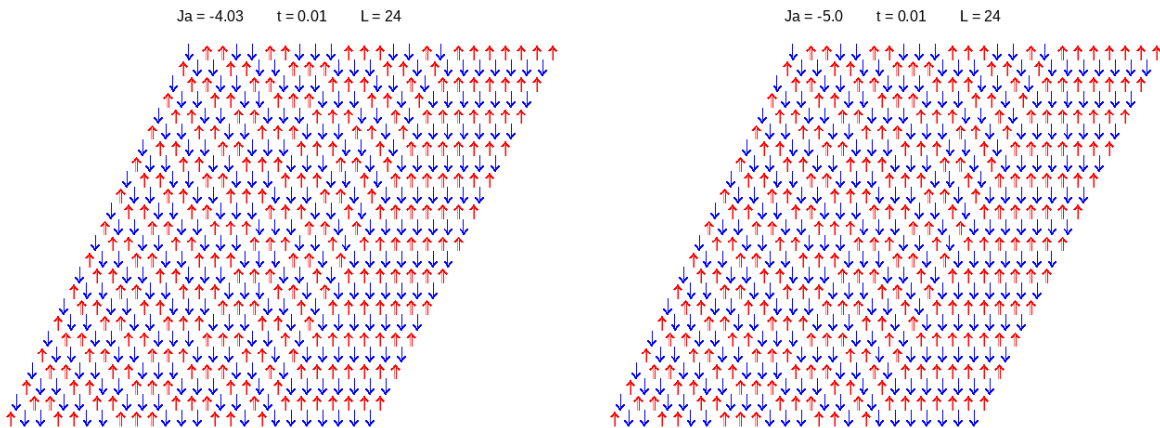
do porquê que a magnetização neste ponto é quase nula. No gráfico à direita desta mesma figura temos para $J_a = -4.02$ uma configuração representando o estado fundamental do sistema que ainda devido a sua proximidade com $J_a = -4.0$ se apresenta influenciado pela frustração, conforme é possível notar pela disposição dos spins. O vínculo com essa região

Figura 4.25: Configurações do estado fundamental para $J_a = -4.0$ (à esquerda) e para $J_a = -4.02$ (à direita).



de frustração é rompido em $J_a = -4.03$ conforme é mostrado pelo gráfico à esquerda da figura 4.26, pois o sistema adquire capacidade suficiente para estabelecer um tipo de ordenamento que condiz com um padrão que denominamos de *stripes* antiferromagnéticas, que sinaliza a dominância da parcela antiferromagnética sobre a ferromagnética, obrigando o sistema a assumir essa característica na direção do eixo principal por toda rede. Esta condição se estende para valores ainda menores de J_a , conforme podemos exemplificar pela configuração referente a $J_a = -5.0$, exibida à direita desta mesma figura. Aqui também vale ressaltar que o padrão formado por este estado ordenado não só deixa claro a existência de uma fase exótica, como também pode ser útil para uma proposição futura de um parâmetro de ordem que seja capaz de capturar o real comportamento do

Figura 4.26: Configurações do estado fundamental para $L = 24$ com valores específicos de J_a .



sistema nessa região e que ao mesmo tempo auxilie na compreensão do seu processo de evolução de fase. Portanto, a análise em torno de $J_a = -4.0$ evidencia duas contribuições fundamentais: (I) o próprio ponto crítico, que representa a máxima frustração, a alta degenerescência e ausência de parâmetros convencionais de ordem, e (II) os processos de aproximação e afastamento desse ponto, que revelam como o sistema entra na região de máxima competição (perdendo progressivamente a ordem ferromagnética) e como sai dela (adquirindo o ordenamento formado por *stripes* antiferromagnéticas). Esse cenário amplia a relevância do modelo não apenas para a caracterização de transições de fase não usuais, mas também como uma plataforma teórica de estudo de sistemas reais, onde a frustração geométrica e o acoplamento competem de forma intensa, oferecendo um paralelo direto com materiais complexos e novas fases emergentes na física da matéria condensada.

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Nesta tese, nós estabelecemos uma nova proposição formal, elegante e moderna de um modelo de acoplamento spin-rede com spins do tipo Ising que leva em conta a simetria da rede cristalina e uma direção preferencial de vibração da rede que acomoda esses spins. Como objeto de aplicação de tal proposta, escolhemos a rede triangular cujo foco principal dos resultados produzidos por este trabalho ficaram direcionados para quando o sistema assumisse valores de $J_a < 0$, uma vez que resultados importantes para $J_a > 0$ foram obtidos em um trabalho anterior de nossa autoria que, em conjunto com a nova formulação aqui apresentada, obteve uma validação por pares concretizada através de uma publicação efetuada em 2024 [116]. Tal publicação reforça a validade e a relevância desse novo modelo para a comunidade científica, o que nos trouxe ainda mais confiança para abordar as características do sistema quando o nosso parâmetro fenomenológico assume valores negativos.

Assim, ao abordarmos o comportamento do sistema com $J_a = -1.0$, percebemos que nessas condições a vibração da rede anula o efeito das interações envolvendo os spins que estão sobre o eixo principal e favorece energeticamente as ligações dos spins que estão fora desse eixo. Mesmo assim, diante do pequeno valor absoluto que esse parâmetro oferece ao sistema, não há uma mudança na característica do estado fundamental em relação ao que se observa em $J_a = 0.0$ (condição que isenta o sistema de qualquer influência vibracional da rede e expressa o modelo de Ising puro na rede triangular). Esse aspecto deixa evidente que a intensidade oferecida pela vibração da rede não é suficiente para perturbar a manutenção do estado ferromagnético no regime de baixas temperaturas. No entanto, na criticalidade, a intensidade correspondente a $J_a = -1.0$ mostrou-se suficiente para modificar a maioria dos expoentes críticos do modelo de Ising puro, resultando em valores sistematicamente menores que os reportados na literatura [117, 118]. Esse efeito é ainda mais evidente na temperatura crítica, que se desloca de aproximadamente 3.6 para 3.4. Apesar disso, tais alterações não foram capazes de modificar o caráter da transição, nem a classe de universalidade, que permanecem consistentes com o Ising 2D.

Em $J_a = -3.0$, o sistema já se encontra com o valor em módulo três vezes maior

que no caso anterior. Cujas intensidade, embora também não suficiente para alterar o estado de mínima energia, mostrou-se capaz de alterar o padrão exibido em $J_a = -1.0$ de grandezas termodinâmicas importantes como a energia, a magnetização e o calor específico. Os comportamentos de tais grandezas se mostraram inconsistentes com uma transição típica de 2ª ordem, o que foi reforçado pela violação das relações de escala pelos expoentes críticos. Ainda assim, os dados também não apontavam para uma transição genuinamente de 1ª ordem. De modo que a resolução desse impasse só foi possível mediante uma análise adicional e minuciosa de características chave como o fato do expoente crítico α ter assumido um valor negativo, do expoente β ter se mostrado praticamente nulo, da susceptibilidade ter indicado a presença de um comprimento de correlação elevado e do gráfico da distribuição de probabilidade de energia ter revelado uma barreira pouco pronunciada entre dois máximos irregulares. Assim, a avaliação conjunta de todos esses elementos nos permitiu verificar que essa intensidade de vibração da rede afeta a criticalidade, não apenas alterando os expoentes críticos mas também conduzindo o sistema para um novo tipo de transição reconhecida como transição de 1ª ordem “fraca”, em contraste com o que ocorre em $J_a = -1.0$.

O comportamento do sistema é ainda mais diferente em $J_a = -4.0$, onde evidenciamos um marco central na caracterização do modelo, pois este valor se revelou como um ponto singular de frustração máxima, onde o equilíbrio entre as interações concorrentes é completamente estabelecido devido a essa intensidade de vibração da rede. Nessas condições, o sistema perde a capacidade de sustentar um estado fundamental único, fazendo com que grandezas tradicionais como a magnetização não funcione mais como parâmetro de ordem e o calor específico deixe de apontar para uma clara transição de fase, refletindo as consequências da distribuição gradual de energia térmica entre os inúmeros estados equivalentes presentes na fase de mínima energia. Dessa forma, $J_a = -4.0$ assume um papel essencial no qual o sistema deixa de apresentar uma ordem convencional e passe a refletir o limite da competição máxima entre as interações, consolidando-se em um cenário de grande relevância para a física de sistemas frustrados. Outra característica marcante que foi verificada, foi a presença de uma entropia residual extensiva, que em conjunto com as demais características levou os nossos resultados a sugerir que esse ponto compartilha sinais típicos de líquidos de spins clássicos. Aprofundar a análise deste ponto em trabalhos futuros permitirá estabelecer uma classificação ainda mais segura, por exemplo, mediante a avaliação das correlações de curto alcance nos estados do nível fundamental, por meio da investigação de possíveis excitações coletivas e demais comportamentos emergentes.

A necessidade de investigar a vizinhança imediata de $J_a = -4.0$ também foi atendida nesta tese visando esclarecer como o sistema entra e sai da região crítica. Ao nos aproximarmos desse valor crítico, tanto pela esquerda ($-4.0 < J_a \leq -3.5$) quanto pela direita ($-4.5 \leq J_a < -4.0$), o sistema revela uma sensibilidade extrema às variações de J_a . Em uma análise pela esquerda, verificamos que mesmo as pequenas alterações como de

-3.99 para -3.994 já se mostraram suficientes para modificar substancialmente o estado fundamental, o que impulsionou o sistema a sair de um regime ferromagnético residual para um arranjo progressivamente mais desordenado, cujo caminho ficou marcado pela presença de múltiplos picos no calor específico e pela intensificação da susceptibilidade. Esse processo configurou a entrada do sistema na frustração máxima, no qual se perde gradualmente a ordem ferromagnética e se atinge a degenerescência plena em $J_a = -4.0$. Por outro lado, à direita desse ponto, a evolução do sistema segue para uma direção voltada para o rompimento gradual do equilíbrio das interações, passando a favorecer cada vez mais o ordenamento antiferromagnético ao longo do eixo principal. Dessa maneira, um padrão exótico de *stripes* antiferromagnéticas com múltiplas transições bem definidas e magnetização nula destacou a saída do sistema do regime de frustração máxima e o estabelecimento de uma nova fase. Esses caminhos mostram que as regiões em torno de $J_a = -4.0$ não apenas conecta dois regimes distintos de ordenamento, mas também concentra as condições mais ricas para o surgimento de fases intermediárias e fenômenos críticos sutis. A região que circunda o ponto de máxima frustração representa um terreno fértil para futuras investigações. Desafios como a caracterização de um parâmetro de ordem e o tipo de transição envolvendo a fase *stripe* antiferromagnética, a definição do tipo de transição que o sistema executa ao entrar e sair do ponto de máxima frustração e a otimização do algoritmo adotado aqui voltado especialmente para essa região e seu entorno são algumas perspectivas promissoras para aprofundar a compreensão dessa complexa região.

Diante de tudo que foi dito e comprovado até aqui, acreditamos que todos esses dados se mostraram suficientes para demonstrar a capacidade do modelo em analisar como a intensidade da vibração da rede pode afetar a dinâmica de interação dos spins sob a ótica de uma direção preferencial de vibração. Vale ressaltar que um dos aspectos centrais dessa proposta diz respeito ao fato de que ela se exime da necessidade de mapear explicitamente os deslocamentos atômicos individuais para representar o acoplamento spin-rede, pois ao introduzir o parâmetro J_a em conjunto com a perspectiva de uma direção de vibração preferencial, já se captura de maneira eficaz os impactos da rede sobre as interações magnéticas. Essa estratégia, além de oferecer uma clareza conceitual, ela também implica em agilidade de processamento, pois permite explorar o comportamento do sistema sem demandar um alto custo computacional para os seus cálculos. Outro ponto de destaque desse modelo fica a cargo da simplicidade exposta pela sua hamiltoniana, que, por não depender de termos extremamente complexos ou intratáveis, proporciona um alto potencial para que se torne o primeiro modelo de acoplamento spin-rede passível de solução analítica. Tal característica o torna particularmente valioso como plataforma de referência para a comunidade, permitindo confrontar resultados numéricos, aproximações analíticas e até hipóteses experimentais em torno do papel da frustração e do acoplamento dinâmico da rede. Por fim, embora a formulação inicial esteja apoiada em spins do tipo Ising, o

modelo pode ser estendido de forma natural para spins com maior grau de liberdade, como os do tipo Heisenberg. Tal adaptação tem potencial para oferecer novas perspectivas sobre fenômenos magnéticos coletivos, além de abrir espaço para a descoberta de fases exóticas ainda não exploradas. Dessa forma, o presente trabalho não só aprofunda a compreensão das consequências do acoplamento spin-rede em sistemas frustrados, mas também demonstra que o modelo aqui proposto é uma ferramenta teórica versátil e promissora, com potencial para impulsionar investigações futuras nos campos teórico, simulacional e experimental.

APÊNDICE

A.1 Simulações entrópicas com o Método de Wang-Landau

Inseridas no rol de técnicas via método Monte Carlo, as simulações entrópicas vem alcançando posições de destaque cada vez mais relevantes no estudo dos mais variados sistemas [119]. Uma das maiores motivações para sua adoção é devido à possibilidade de investigar sistemas termodinâmicos com diversos níveis de complexidade sem a necessidade de lidar diretamente com a temperatura (diferentemente do que acontece com o algoritmo de Metropolis [120]) de maneira que o processo aconteça de forma mais rápida e concisa. Entre as diversas maneiras de se aplicar este procedimento no caso concreto, destaca-se o algoritmo de Wang-Landau [121, 122]. De acordo com a literatura, esta abordagem se desenvolve por meio de um passeio aleatório que parte de E_{min} à E_{max} no espaço de energia do sistema. Seu foco consiste na construção de uma densidade de estados otimizada $g(E)$ através de uma função $S(E)$ que também é conhecida como entropia microcanônica e por $H(E)$ designado como o histograma de energia que ao ser nivelado sofre uma atualização ($H(E) \rightarrow H(E) + 1$) sempre que um nível de energia E for visitado.

Logo, o algoritmo está pautado na eficiência de se estimar a densidade de estados $g(E)$, de maneira que possamos modelar a equação (1.8) e assim possamos também estimar o cálculo de qualquer quantidade termodinâmica de interesse A pela expressão

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_E A_E g(E) e^{-\beta E}}{\sum_E g(E) e^{-\beta E}}, \quad (\text{A.1.1})$$

onde A_E é a média microcanônica acumulada durante a simulação. Geralmente, a densidade de estados é representada por valores exorbitantes [16]. Nesse sentido, o seu tratamento se torna mais adequado através da relação

$$S(E) = \ln g(E). \quad (\text{A.1.2})$$

A sistemática dessa metodologia se inicia escolhendo $g(E) = 1 \Rightarrow S(E) = 0$, uma vez que a densidade de estados no estágio inicial se mostra plenamente desconhecida. A convergência

de $g(E)$ para o seu devido valor é assegurada através do aprimoramento da densidade de estados devido aos ajustes sofridos pelo fator modificador f a cada aceite de uma dada configuração, de maneira que

$$g(E) \rightarrow f.g(E). \quad (\text{A.1.3})$$

A evolução do sistema no espaço energético que se encontra em um estado A para um estado B acontece mediante a alteração do sinal de um spin que obedeça a condição de probabilidade representada por

$$P(E_A \rightarrow E_B) = \begin{cases} e^{S(E_A)-S(E_B)}, & \text{se } S(E_A) \leq S(E_B) \\ 1, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (\text{A.1.4})$$

Sempre que uma nova configuração atende a esse critério, atualiza-se o histograma e a densidade de estados que de acordo com as equações (A.1.3) e (A.1.2) equivale a tomar $S(E_B) \rightarrow S(E_B) + F_i$. Nesse caso, $F_i = \ln f_i$, onde f_i é o fator modificador inicial correspondente a $f_0 \equiv e = 2.71828\dots$. Nesse processo, toda vez que a condição de nivelamento é atendida o histograma é zerado e ocorre uma atualização de f_i de modo que $f_{i+1} = \sqrt{f_i}$. Estas etapas são repetidas por vários passos de Monte Carlo até se verificar que $H(E) > r\langle H \rangle$, onde $\langle H \rangle$ corresponde a média de todas as energias e r é um parâmetro multiplicativo que se vincula ao nível de estimativa da densidade de estados de maneira que sua escolha em geral equivale a 0.8 [123]. Vale também ressaltar que Wang-Landau afirma em seu trabalho original que a simulação deve ser encerrada quando $f \sim 1 + 10^{-8}$ [124].

No entanto, o trabalho de Caparica [125] não só enriqueceu a condição de finalização como também propôs que se atualize a densidade de estados e o histograma apenas após cada passo de Monte Carlo (que corresponde a L^2 tentativas de se obter um novo estado), ele também demonstrou que as médias microcanônicas devem ser acumuladas após f_7 (oitavo nível de Wang-Landau) e que a simulação deve ser finalizada em um f_{final} caracterizado pela média canônica obtida pela simulação. Para que essa última consideração se torne efetiva, após o nivelamento do histograma a partir de f_7 calcula-se primeiramente a temperatura $T_c(0)$ referente ao máximo do calor específico por intermédio da equação

$$C = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{K_B T^2}, \quad (\text{A.1.5})$$

de maneira que as médias energéticas sejam obtidas pelo $g(E)$ corrente. Imediatamente após o f_7 , para cada f superior associado a uma $g(E)$ específica calcula-se também $T_c(t)$ para que se obtenha o parâmetro ε

$$\varepsilon = |T_c(t) - T_c(0)| \quad (\text{A.1.6})$$

a fim de verificar se $\varepsilon < 10^{-4}$ para um dado f . Desse modo, Caparica consegue demonstrar em seu trabalho que é mais adequado finalizar a simulação quando essa condição se

mostrar satisfeita. Até que isso aconteça, $T_c(0)$ sempre será atualizada com a última $g(E)$ de modo que $T_c(t)$ também fique sempre a cargo do f seguinte. Essas considerações otimizaram o algoritmo de Wang-Landau, especialmente o critério de finalização que além de promover a estabilidade da densidade de estados se adequa melhor ao processo estocástico inerente à simulação permitindo que cada modelo simulado possa ser finalizado em um f que melhor se ajuste a sua complexidade [126].

Podemos sintetizar a sequência de etapas percorrida pelo algoritmo em uma simulação da seguinte maneira:

1. Inicie a simulação com uma configuração qualquer (convenientemente pode ser a configuração de mais baixa energia) e estabeleça $i = 0$, $\ln g(E) = 0$, $\ln f_i = 1$ e $H(E) = 0$;
2. Proponha uma nova configuração.
3. Aceite a configuração proposta se $P(E_A \rightarrow E_B) = \min(e^{S(E_A) - S(E_B)}, 1)$;
4. Atualize $\ln g(E)$ e $H(E)$ a cada passo de Monte Carlo, fazendo $\ln g(E) \rightarrow \ln g(E) + \ln f_i$ e $H(E) \rightarrow H(E) + 1$;
5. Se $H(E) > 0.8\langle H \rangle$ para todos os níveis de energia, reduza o fator modificador $f_{i+1} = \sqrt{f_i}$ e volte ao passo 2;
6. Comece a acumular as médias microcanônicas após o nível de Wang-Landau f_7 ;
7. Se $f = f_{final}$ finalize a simulação.

A.2 Densidade de estados conjunta

Uma outra maneira também de se estudar sistemas complexos é por meio de uma construção de uma densidade de estados conjunta, que nessas circunstâncias irá depender de outros parâmetros além da energia. Por exemplo, ao definirmos dois parâmetros como a energia E e a magnetização M podemos construir uma densidade de estados do tipo $g(E, M)$. Desta forma, teremos também um histograma bidimensional $H(E, M)$ referente aos estados visitados. E de maneira similar ao que foi proposto quando tínhamos apenas $g(E)$, agora iniciamos a simulação com $g(E, M) = 1$ para todos os valores de energia. Desse modo, o passeio aleatório no espaço de energias nessas condições deverá acontecer de maneira que a probabilidade do sistema sair de um estado A e ir para um estado B seja equivalente a

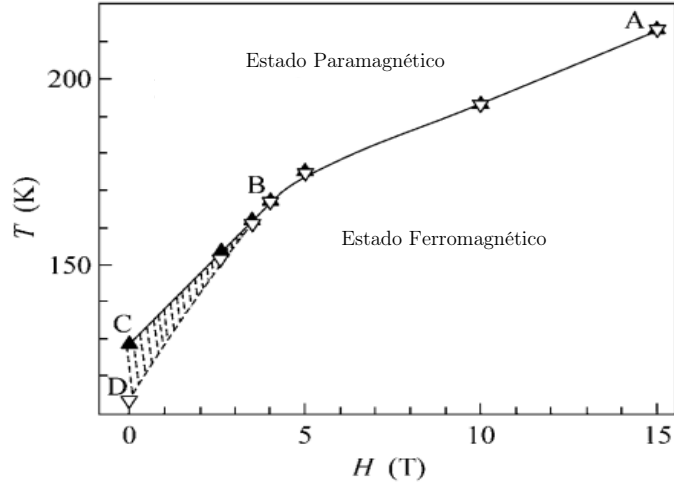
$$P((E_A, M_A) \rightarrow (E_B, M_B)) = \min(e^{S(E_A, M_A) - S(E_B, M_B)}, 1). \quad (\text{A.2.1})$$

Com base nisso, a densidade de estados e o histograma são atualizados a cada passo de Monte Carlo conforme $S(E_B, M_B) \rightarrow S(E_B, M_B) + F_i$ e $H(E_B, M_B) \rightarrow H(E_B, M_B) + 1$, onde se mantém a definição de F_i e a condição de nivelamento do histograma para todos os números de ocupação, que neste caso corresponde a $H(E, M) > 0.8\langle H \rangle$ com $\langle H \rangle$ correspondendo a média sobre todas essas entradas. Compreendido todo esse processo, podemos calcular qualquer quantidade termodinâmica de interesse remodelando a equação (A.1.1) com base na dependência dos novos parâmetros e considerando também que o acúmulo das médias microcanônicas continuem sendo realizadas a partir de f_7 . Apesar desta metodologia nos permitir alcançar um conjunto maior de configurações para cada conjunto de parâmetros definido, ela também demanda um tempo computacional elevado para a sua execução. Por conta disso, a busca por um tempo de simulação mais aceitável nos obriga a simular tamanhos de redes menores finalizando-a em f_{15} .

A.3 Transições de fase e fenômenos críticos

É notável que no equilíbrio termodinâmico a matéria possa se apresentar em diferentes tipos de fases. Em condições normais de temperatura e pressão estamos acostumados a observá-la na fase sólida, líquida ou gasosa. Contudo, em condições atípicas, a matéria revela uma diversidade ainda maior, exibindo fases exóticas como a supercondutora [127] e a superfluida [128, 129], além de outras ainda menos convencionais que desafiam nossa compreensão e impulsionam diversas linhas de pesquisa. Uma fase termodinâmica pode ser caracterizada como um estado homogêneo da matéria que é definida por suas propriedades físicas, tais como a temperatura, a pressão, a densidade, entre outras. Uma maneira simples de apresentar o conjunto de fases que compõe um dado sistema físico é por meio do seu diagrama de fases. Nele, podemos representar cada fase por regiões do espaço formadas por pontos associados a parâmetros de controle. Para um dado ferromagneto [4], por exemplo, os parâmetros de controle podem ser a temperatura e o campo externo conforme pode ser demonstrado pela figura 1.

Para caracterizar se um dado sistema se encontra em uma fase ou em outra seguimos a proposta introduzida por Lev Landau [130] onde se define um parâmetro de ordem que assume um valor não nulo em uma fase e um valor nulo em outra. Por exemplo, para materiais ferromagnéticos o parâmetro de ordem é a magnetização, para fluidos o parâmetro de ordem pode ser a diferença na densidade entre as duas fases, mas nem sempre a proposição deste parâmetro é estabelecida de forma simples pois dependendo da complexidade do sistema sua proposição pode ser desafiadora. Quando um dado sistema físico é motivado a mudar de uma fase para outra dizemos que ele sofreu uma transição de fase. Ao longo desse processo, nota-se um aspecto fascinante identificado como ponto crítico, que corresponde a uma etapa intermediária onde as fases coexistem [131]. Esse

Figura 1: Diagrama de fases do ferromagneto $Sm_{0.55}Sr_{0.45}MnO_3$ [4].

ponto é caracterizado pela temperatura crítica que marca um comportamento único do sistema.

Tal temperatura ocupa um papel fundamental especialmente no magnetismo, pois em decorrência do trabalho de Pierre Curie [132] podemos demonstrar que um material magnético perde a sua magnetização acima de uma dada temperatura crítica cuja nomenclatura atual é reconhecida como temperatura de Curie. Para contribuir ainda mais com este processo descritivo podemos diante de uma visão mais moderna classificar o tipo de transição em contínuas (ou de segunda ordem) e em descontínuas (ou de primeira ordem) [133]. Nas transições contínuas, não há calor latente e o parâmetro de ordem altera-se de maneira suave e progressiva. Já nas transições descontínuas, observa-se um calor latente diferente de zero e uma mudança abrupta no parâmetro de ordem. Todos estes aspectos contribuem para uma descrição mais detalhada do complexo processo que envolve a transição de fase que em geral se encontra associada a variações contínuas promovidas por parâmetros externos como a temperatura, pressão, campo magnético, entre outros.

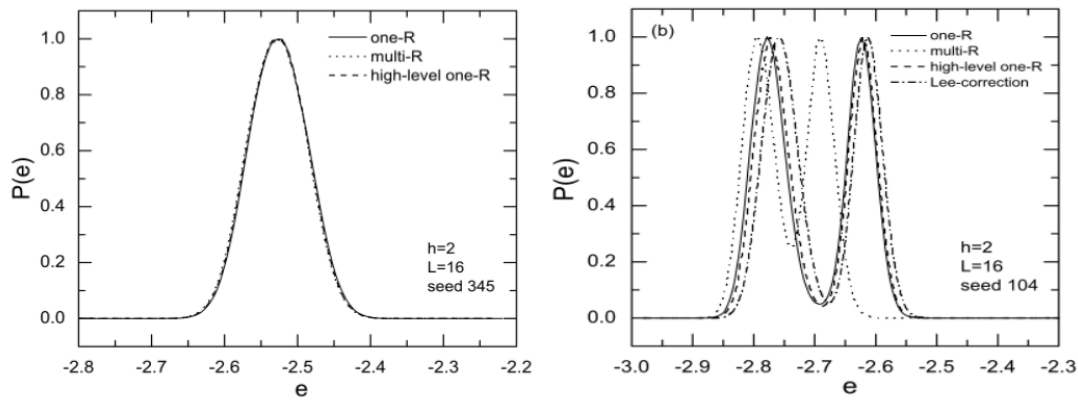
A análise acerca do tipo de transição de fase pode também ser estabelecida por intermédio do comportamento da distribuição canônica de probabilidades da energia em uma dada temperatura $P(E, T)$. Essa informação pode ser extraída diretamente de uma densidade de estados de modo que se possa obter

$$P(E, T) = \frac{g(E)e^{-\frac{E}{k_B T}}}{\sum_E g(E)e^{-\frac{E}{k_B T}}}, \quad (\text{A.3.1})$$

esse método que teve como precursor o trabalho de Lee e Kosterlitz [134, 135], que nos permite, dentre outras características, avaliar o tipo de transição através do comportamento

gráfico resultante da equação A.3.1 conforme pode ser apresentado pela figura 2. Se na temperatura de transição o gráfico apontar para uma curva que sinalize um único máximo teremos um indicativo de uma transição de segunda ordem representando a passagem suave da fase ordenada para a fase desordenada. Agora, se na temperatura de transição for observado uma curva representando dois máximos de mesma altura a transição provavelmente será de primeira ordem e neste caso, o sistema revela uma coexistência entre as fases ordenada associada ao primeiro pico (à esquerda) e a fase desordenada associada ao segundo pico (à direita).

Figura 2: Possíveis estruturas da distribuição de probabilidade [5].



No estudo de transição de fase há também um interesse ainda mais proeminente nos fenômenos que ocorrem em regiões próximas do ponto crítico [136]. Estudos apontam que nas vizinhanças do ponto crítico certas grandezas termodinâmicas assumem um comportamento regido por leis de potência [137]. Para investigar esta região se define uma temperatura reduzida t correspondente a

$$t \equiv \frac{T - T_c}{T_c}, \quad (\text{A.3.2})$$

esta quantidade permite informar o quão próximo o sistema está da sua temperatura crítica onde em $T = T_c$ ela assume um valor nulo. Na região crítica, quando tomamos o limite termodinâmico considerando o campo magnético externo $H = 0$ verifica-se que a magnetização M , a susceptibilidade χ , o calor específico C e o comprimento de correlação ξ se relacionam com t da seguinte forma [108]

$$M \sim |t|^\beta, \quad (\text{A.3.3})$$

$$\chi \sim |t|^{-\gamma}, \quad (\text{A.3.4})$$

$$C \sim |t|^{-\alpha}, \quad (\text{A.3.5})$$

$$\xi \sim |t|^{-\nu}. \quad (\text{A.3.6})$$

Os expoentes críticos também se associam através de relações de escala e hiperescala como é demonstrado pela relação de Rushbrooke

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (\text{A.3.7})$$

pela relação de Griffiths

$$\alpha + \beta(\delta + 1) = 2, \quad (\text{A.3.8})$$

pela relação de Widom

$$\gamma = \beta(\delta - 1), \quad (\text{A.3.9})$$

e pela relação de Josephson

$$d\nu = 2 - \alpha. \quad (\text{A.3.10})$$

Ao determinarmos os expoentes críticos para um dado sistema físico poderemos agrupá-lo a outros sistemas que possuem os mesmos expoentes nos permitindo definir a sua classe de universalidade [138]. Com essa classe definida poderemos extrair informações relevantes de sistemas complexos a partir de sistemas simples que pertencem à mesma classe.

Uma maneira mais factível de se determinar os expoentes críticos pode ser alcançada pela teoria de escala de tamanho finito ou *finite size scaling*. Através dela poderemos estabelecer uma relação entre o sistema finito estudado e o seu correspondente no limite termodinâmico. Tal artifício é extremamente útil para simulações, pois por maiores que sejam as redes simuladas sempre estaremos lidando com tamanhos finitos. Desta forma, para que a correspondência seja de fato bem estabelecida podemos partir da equação (A.3.6) de onde podemos verificar também que $|t| \sim \xi^{-1/\nu}$ e uma vez que para um sistema finito o comprimento de correlação ξ não diverge para o infinito pois se limita ao tamanho L , teremos $\xi(T_c) \sim L$ de modo que $|t| \sim L^{-1/\nu}$. Ao substituírmos esta última relação nas equações (A.3.3), (A.3.4) e (A.3.5) devemos obter

$$M \sim L^{-\beta/\nu}, \quad (\text{A.3.11})$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad (\text{A.3.12})$$

$$C \sim L^{\alpha/\nu}. \quad (\text{A.3.13})$$

Também podemos estimar a temperatura pseudocrítica através dos máximos do calor específico e da susceptibilidade por meio da expressão

$$T_c(L) = T_c + a_q L^{-1/\nu} \quad (\text{A.3.14})$$

com a_q representando uma constante a ser determinada [139]. Agora, as variáveis de interesse variam através de uma lei de potência com o tamanho L do sistema. No entanto, a dependência direta das variáveis de interesse com o expoente ν nos obriga a calculá-

lo primeiramente. Uma maneira de fazer isso é tomando o logaritmo das derivadas de potências de enésima ordem do parâmetro de ordem, que para um sistema ferromagnético consiste na magnetização de modo que exista uma escala com $L^{1/\nu}$ [140, 141]. Assim, poderemos obter

$$V_1 \equiv 4[M^3] - 3[M^4], \quad (\text{A.3.15})$$

$$V_2 \equiv 2[M^3] - [M^4], \quad (\text{A.3.16})$$

$$V_3 \equiv 3[M^2] - 2[M^3], \quad (\text{A.3.17})$$

$$V_4 \equiv (4[M] - [M^4])/3, \quad (\text{A.3.18})$$

$$V_5 \equiv (3[M] - 3[M^3])/3, \quad (\text{A.3.19})$$

$$V_6 \equiv 2[M] - [M^2], \quad (\text{A.3.20})$$

desde que

$$[M^n] \equiv \ln \frac{\partial \langle M^n \rangle}{\partial T} \quad (\text{A.3.21})$$

e que $M \approx L^{-\beta/\nu} \mathcal{M}(tL^{1/\nu})$ onde \mathcal{M} é uma função de escala universal que se torna constante quando a temperatura se aproxima da região crítica ($t = 0$). Desta forma, ao combinar esta última relação com as equações anteriores poderemos mostrar que

$$V_i \approx (1/\nu) \ln L + \mathcal{V}_i(tL^{1/\nu}), \quad (\text{A.3.22})$$

para $i = 1, \dots, 6$, onde em $t = 0$ os \mathcal{V}_i deixam de depender do tamanho L do sistema e passam a assumir o papel de simples constantes. Logo, sob estas condições, ao efetuarmos um ajuste linear V_j x L poderemos extrair $1/\nu$ que é equivalente ao coeficiente angular da reta e a partir disso obter os demais expoentes críticos de interesse.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] WANG, Q. H. et al. The magnetic genome of two-dimensional Van der Waals materials. **ACS nano**, ACS Publications, v. 16, n. 5, p. 6960–7079, 2022.
- [2] BRUCE, D. W.; O'HARE, D.; WALTON, R. I. **Functional oxides**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2011.
- [3] AOYAMA, K.; GEN, M.; KAWAMURA, H. Effects of spin-lattice coupling and a magnetic field in classical Heisenberg antiferromagnets on the breathing pyrochlore lattice. **Physical Review B**, APS, v. 104, n. 18, p. 184411, 2021.
- [4] ABDULVAGIDOV, S. B. et al. Specific heat of $Sm_{0.55}Sr_{0.45}MnO_3$ manganite in magnetic fields up to 15 T: An anomalous critical behavior of the ferromagnet in magnetic field and the observation of a tricritical point.
- [5] FYTAS, N. G.; MALAKIS, A.; EFTAXIAS, K. First-order transition features of the 3d bimodal random-field Ising model. **Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment**, IOP Publishing, v. 2008, n. 03, p. P03015, 2008.
- [6] KAHN, O. **Molecular magnetism**. [S.l.]: Courier Dover Publications, 2021.
- [7] ANTROPOV, V.; HARMON, B.; SMIRNOV, A. Aspects of spin dynamics and magnetic interactions. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, Elsevier, v. 200, n. 1-3, p. 148–166, 1999.
- [8] SANDRATSKII, L. et al. Complex interplay of magnetic interactions in 5 f-electron systems: the case of U_2Ni_2Sn . **Physical Review B**, APS, v. 101, n. 18, p. 184433, 2020.
- [9] NEWMAN, M.; BARKEMA, G. **Monte Carlo methods in statistical physics chapter 1-4**. [S.l.]: Oxford University Press: New York, USA, 1999.
- [10] SCHRAM, R. D.; BARKEMA, G. T. Monte carlo methods beyond detailed balance. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 418, p. 88–93, 2015.
- [11] RUBINSTEIN, R. Y.; KROESE, D. P. **Simulation and the Monte Carlo method**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2016.
- [12] BINDER, K. et al. **Monte Carlo methods in statistical physics**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. v. 7.
- [13] BAUMGÄRTNER, A. et al. **Applications of the Monte Carlo method in statistical physics**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. v. 36.

- [14] DIEP, H. T. **Statistical physics: fundamentals and application to condensed matter**. [S.l.]: World Scientific, 2015.
- [15] BRYAN, G. **Elementary principles in statistical mechanics**. [S.l.]: Nature Publishing Group UK London, 1902.
- [16] JORGE, L. N. et al. **Simulações entrópicas do modelo de Baxter-Wu**. Tese (Doutorado), 2017.
- [17] PATHRIA, R. K. **Statistical mechanics**. [S.l.]: Elsevier, 2016.
- [18] SALINAS, S. R. **Introdução à física estatística**. [S.l.]: Edusp, 1999.
- [19] TOKDAR, S. T.; KASS, R. E. Importance sampling: a review. **Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics**, Wiley Online Library, v. 2, n. 1, p. 54–60, 2010.
- [20] EVANS, R. F. L. et al. Atomistic spin model simulations of magnetic nanomaterials. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 26, n. 10, p. 103202, feb 2014.
- [21] CASTELVECCHI, D. The stern–gerlach experiment at 100. **Nature Reviews Physics**, Nature Publishing Group UK London, v. 4, n. 3, p. 140–142, 2022.
- [22] MALRIEU, J. P. et al. Magnetic interactions in molecules and highly correlated materials: physical content, analytical derivation, and rigorous extraction of magnetic hamiltonians. **Chemical reviews**, ACS Publications, v. 114, n. 1, p. 429–492, 2014.
- [23] CIPRA, B. A. An introduction to the Ising model. **American Mathematical Monthly**, v. 94, n. 10, p. 937–959, 1987.
- [24] OITMAA, J.; BORNILLA, E. High-temperature-series study of the spin-1/2 Heisenberg ferromagnet. **Physical Review B**, APS, v. 53, n. 21, p. 14228, 1996.
- [25] COEY, J. M. **Magnetism and magnetic materials**. [S.l.]: Cambridge university press, 2010.
- [26] PEIERLS, R. On Ising’s model of ferromagnetism. In: CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS. **Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society**. [S.l.], 1936. v. 32, n. 3, p. 477–481.
- [27] ONSAGER, L. Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition. **Physical Review**, APS, v. 65, n. 3-4, p. 117, 1944.
- [28] MA, S.-k. Introduction to the renormalization group. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 45, n. 4, p. 589, 1973.
- [29] PELISSETTO, A.; VICARI, E. Critical phenomena and renormalization-group theory. **Physics Reports**, Elsevier, v. 368, n. 6, p. 549–727, 2002.
- [30] WU, F.-Y. The potts model. **Reviews of modern physics**, APS, v. 54, n. 1, p. 235, 1982.

- [31] BAXTER, R. Ising model on a triangular lattice with three-spin interactions. I. Free energy and correlation length. **Australian Journal of Physics**, CSIRO Publishing, v. 27, n. 3, p. 369–382, 1974.
- [32] DOMB, C. **Phase transitions and critical phenomena**. [S.l.]: Elsevier, 2000.
- [33] MAJEWSKI, J.; LI, H.; OTT, J. The Ising model in physics and statistical genetics. **The American Journal of Human Genetics**, Elsevier, v. 69, n. 4, p. 853–862, 2001.
- [34] DAS, T. et al. Highlighting the structure-function relationship of the brain with the Ising model and graph theory. **BioMed research international**, Hindawi, v. 2014, 2014.
- [35] STAUFFER, D. Social applications of two-dimensional Ising models. **American Journal of Physics**, AIP Publishing, v. 76, n. 4, p. 470–473, 2008.
- [36] DIEP, H. et al. **Frustrated spin systems**. [S.l.]: World Scientific, 2013.
- [37] ŽUKOVIČ, M. Critical properties of the frustrated Ising model on a honeycomb lattice: A monte carlo study. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 404, p. 127405, 2021.
- [38] NGUYEN, V.-D. et al. Competing interactions in artificial spin chains. **Physical Review B**, APS, v. 96, n. 1, p. 014402, 2017.
- [39] MURTAZAEV, K. S. et al. Phase diagram of the antiferromagnetic Ising model on a body-centered cubic lattice with competing exchange interactions under a magnetic field. **Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures**, Elsevier, v. 148, p. 115646, 2023.
- [40] GREEDAN, J. E. Geometrically frustrated magnetic materials basis of a presentation given at materials discussion no. 3, 26–29 september, 2000, University of Cambridge, UK. **Journal of Materials Chemistry**, Royal Society of Chemistry, v. 11, n. 1, p. 37–53, 2001.
- [41] MOESSNER, R.; RAMIREZ, A. P. Geometrical frustration. **Physics Today**, AIP Publishing, v. 59, n. 2, p. 24–29, 2006.
- [42] MOHANTA, N.; DAGOTTO, E. Interfacial phase frustration stabilizes unconventional skyrmion crystals. **npj Quantum Materials**, Nature Publishing Group UK London, v. 7, n. 1, p. 76, 2022.
- [43] TAKENGNY, F. S. et al. Frustration in 2d anti-ferromagnetic triangular Ising spin lattice: a monte carlo study. **The African Review of Physics**, v. 7, 2012.
- [44] KIM, K. et al. Quantum simulation of frustrated Ising spins with trapped ions. **Nature**, Nature Publishing Group UK London, v. 465, n. 7298, p. 590–593, 2010.
- [45] SCHNACK, J. Effects of frustration on magnetic molecules: a survey from Olivier Kahn until today. **Dalton Transactions**, Royal Society of Chemistry, v. 39, n. 20, p. 4677–4686, 2010.
- [46] ANDERSON, P. The concept of frustration in spin glasses. **Journal of the Less Common Metals**, Elsevier, v. 62, p. 291–294, 1978.

- [47] FERREY, G.; VARRET, F.; COEY, J. Amorphous FeF₃: a non-crystalline magnet with antiferromagnetic interactions. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, IOP Publishing, v. 12, n. 13, p. L531, 1979.
- [48] MIYAZAWA, S.; HOMMA, S. Monte carlo calculation of the quantum J₁- J₂ model on the square lattice. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 193, n. 4, p. 370–374, 1994.
- [49] KOSTERLITZ, J. The critical properties of the two-dimensional XY model. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, IOP Publishing, v. 7, n. 6, p. 1046, 1974.
- [50] LÖW, U. et al. Study of an Ising model with competing long-and short-range interactions. **Physical Review Letters**, APS, v. 72, n. 12, p. 1918, 1994.
- [51] NAKATSUJI, S.; NAMBU, Y.; ONODA, S. Novel geometrical frustration effects in the two-dimensional triangular-lattice antiferromagnet NiGa₂S₄ and related compounds. **journal of the physical society of japan**, The Physical Society of Japan, v. 79, n. 1, p. 011003, 2010.
- [52] WALDTMANN, C. et al. First excitations of the spin 1/2 Heisenberg antiferromagnet on the kagomé lattice. **The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems**, Springer, v. 2, n. 4, p. 501–507, 1998.
- [53] NOCERA, D. G. et al. Spin frustration in 2d kagomé lattices: A problem for inorganic synthetic chemistry. **Chemistry—A European Journal**, Wiley Online Library, v. 10, n. 16, p. 3850–3859, 2004.
- [54] NAKATSUJI, S. et al. Spin disorder on a triangular lattice. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 309, n. 5741, p. 1697–1700, 2005.
- [55] BORDELON, M. M. et al. Spin excitations in the frustrated triangular lattice antiferromagnet NaYbO₂. **Physical Review B**, APS, v. 101, n. 22, p. 224427, 2020.
- [56] COLLINS, M.; PETRENKO, O. Review/synthèse: triangular antiferromagnets. **Canadian journal of physics**, NRC Research Press Ottawa, Canada, v. 75, n. 9, p. 605–655, 1997.
- [57] KURUMAJI, T. et al. Skyrmion lattice with a giant topological Hall effect in a frustrated triangular-lattice magnet. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 365, n. 6456, p. 914–918, 2019.
- [58] KALMEYER, V.; LAUGHLIN, R. Equivalence of the resonating-valence-bond and fractional quantum hall states. **Physical Review Letters**, APS, v. 59, n. 18, p. 2095, 1987.
- [59] MOESSNER, R.; SONDHI, S. L. Resonating valence bond phase in the triangular lattice quantum dimer model. **Physical Review Letters**, APS, v. 86, n. 9, p. 1881, 2001.
- [60] SAVARY, L.; BALENTS, L. Quantum spin liquids: a review. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 80, n. 1, p. 016502, 2016.
- [61] KITAEV, A. Anyons in an exactly solved model and beyond. **Annals of Physics**, Elsevier, v. 321, n. 1, p. 2–111, 2006.

- [62] KITAEV, A. Y. Fault-tolerant quantum computation by anyons. **Annals of physics**, Elsevier, v. 303, n. 1, p. 2–30, 2003.
- [63] VRIES, M. A. de; MCLAUGHLIN, A.; BOS, J.-W. Valence bond glass on an fcc lattice in the double perovskite Ba_2YMoO_6 . **Physical Review Letters**, *APS*, v. 104, n. 17, p. 177202, 2010.
- [64] SEZE, L. D. Antiferromagnetic dilute bond ising model exhibiting a spin-glass phase transition. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, IOP Publishing, v. 10, n. 12, p. L353, 1977.
- [65] EDWARDS, S. F.; ANDERSON, P. W. Theory of spin glasses. **Journal of Physics F: Metal Physics**, IOP Publishing, v. 5, n. 5, p. 965, 1975.
- [66] BINDER, K.; YOUNG, A. P. Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions. **Reviews of Modern physics**, *APS*, v. 58, n. 4, p. 801, 1986.
- [67] GARDNER, J. S.; GINGRAS, M. J.; GREEDAN, J. E. Magnetic pyrochlore oxides. **Reviews of Modern Physics**, *APS*, v. 82, n. 1, p. 53, 2010.
- [68] HARRIS, M. J. et al. Geometrical frustration in the ferromagnetic pyrochlore $Ho_2Ti_2O_7$. **Physical Review Letters**, *APS*, v. 79, n. 13, p. 2554, 1997.
- [69] RAMIREZ, A. P. et al. Zero-point entropy in ‘spin ice’. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 399, n. 6734, p. 333, 1999.
- [70] GIANNI, S. et al. Fuzziness and frustration in the energy landscape of protein folding, function, and assembly. **Accounts of chemical research**, ACS Publications, v. 54, n. 5, p. 1251–1259, 2021.
- [71] FERREIRO, D. U.; KOMIVES, E. A.; WOLYNES, P. G. Frustration in biomolecules. **Quarterly reviews of biophysics**, Cambridge University Press, v. 47, n. 4, p. 285–363, 2014.
- [72] GHARA, M. et al. Frustrated Lewis pairs: Bonding, reactivity, and applications. **The Journal of Physical Chemistry A**, ACS Publications, 2023.
- [73] LI, J. et al. Nature of spin-lattice coupling in two-dimensional CrI_3 and $CrGeTe_3$. **Science China Physics, Mechanics & Astronomy**, Springer, v. 64, n. 8, p. 286811, 2021.
- [74] OITMAA, J.; BARBER, M. N. On the critical behaviour of an Ising system with lattice coupling. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, IOP Publishing, v. 8, n. 21, p. 3653, 1975.
- [75] BLOEMBERGEN, N. On the ferromagnetic resonance in nickel and supermalloy. **Physical Review**, American Physical Society, v. 78, p. 572–580, Jun 1950.
- [76] KONDO, J. Spin-lattice interaction of a Mn^{++} ion in MgO. **Progress of Theoretical Physics**, Oxford University Press, v. 28, n. 6, p. 1026–1032, 1962.
- [77] SEARS, V. Theory of the Schottky anomaly for strong spin-lattice coupling. **Proceedings of the Physical Society**, IOP Publishing, v. 84, n. 6, p. 951, 1964.

- [78] TUCKER, E. Spin-lattice coupling of a kramers doublet: Co^{2+} in MgO. **Physical Review**, APS, v. 143, n. 1, p. 264, 1966.
- [79] KRANENDONK, J. V.; LEE, Y. Theory of the spin-lattice interaction in paramagnetic salts of iron-group ions. **Canadian Journal of Physics**, NRC Research Press Ottawa, Canada, v. 44, n. 7, p. 1613–1630, 1966.
- [80] CASTO, L. D. et al. Strong spin-lattice coupling in CrSiTe₃. **APL Materials**, v. 3, n. 4, p. 041515, 03 2015. ISSN 2166-532X.
- [81] FUH, H.-R. et al. Newtype single-layer magnetic semiconductor in transition-metal dichalcogenides VX_2 ($X = S, Se$ and Te). **Scientific reports**, Nature Publishing Group UK London, v. 6, n. 1, p. 32625, 2016.
- [82] EGAMI, T. et al. Spin-lattice coupling and superconductivity in Fe pnictides. **Advances in Condensed Matter Physics**, Hindawi, v. 2010, 2010.
- [83] BIROL, T.; FENNIE, C. J. Origin of giant spin-lattice coupling and the suppression of ferroelectricity in $EuTiO_3$ from first principles. **Physical Review B**, APS, v. 88, n. 9, p. 094103, 2013.
- [84] BURSILL, R. J.; MCKENZIE, R. H.; HAMER, C. J. Phase diagram of a Heisenberg spin-peierls model with quantum phonons. **Physical Review Letters**, APS, v. 83, n. 2, p. 408, 1999.
- [85] YIN, J. et al. Effect of longitudinal degree of freedom of magnetic moment in body-centered-cubic iron. **Journal of Applied Physics**, AIP Publishing, v. 113, n. 17, 2013.
- [86] BERGMAN, D. L. et al. Models of degeneracy breaking in pyrochlore antiferromagnets. **Physical Review B**, APS, v. 74, n. 13, p. 134409, 2006.
- [87] WANG, F.; VISHWANATH, A. Spin phonon induced collinear order and magnetization plateaus in triangular and kagome antiferromagnets: Applications to $CuFeO_2$. **Physical Review Letters**, APS, v. 100, n. 7, p. 077201, 2008.
- [88] AOYAMA, K.; KAWAMURA, H. Spin-lattice-coupled order in Heisenberg antiferromagnets on the pyrochlore lattice. **Physical Review Letters**, APS, v. 116, n. 25, p. 257201, 2016.
- [89] TCHERNYSHYOV, O.; CHERN, G.-W. Spin-lattice coupling in frustrated antiferromagnets. In: **Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory**. [S.l.]: Springer, 2010. p. 269–291.
- [90] PENC, K.; SHANNON, N.; SHIBA, H. Half-magnetization plateau stabilized by structural distortion in the antiferromagnetic Heisenberg model on a pyrochlore lattice. **Physical Review Letters**, APS, v. 93, n. 19, p. 197203, 2004.
- [91] GEN, M.; SUWA, H. Nematicity and fractional magnetization plateaus induced by spin-lattice coupling in the classical kagome-lattice Heisenberg antiferromagnet. **Physical Review B**, APS, v. 105, n. 17, p. 174424, 2022.

- [92] MCGUIRE, M. A. et al. Magnetic behavior and spin-lattice coupling in cleavable Van der Waals layered $CrCl_3$ crystals. **Physical Review Materials**, APS, v. 1, n. 1, p. 014001, 2017.
- [93] CHOE, J. et al. Electron–phonon and spin–lattice coupling in atomically thin layers of $MnBi_2Te_4$. **Nano Letters**, ACS Publications, v. 21, n. 14, p. 6139–6145, 2021.
- [94] MANKOVSKY, S. et al. Angular momentum transfer via relativistic spin-lattice coupling from first principles. **Physical Review Letters**, APS, v. 129, n. 6, p. 067202, 2022.
- [95] MOESSNER, R.; SONDHI, S. L. Ising models of quantum frustration. **Physical Review B**, APS, v. 63, n. 22, p. 224401, 2001.
- [96] NASCIMENTO, R. M. L. et al. **Frustração magnética em um modelo de Ising triangular com anisotropia rotacional**. Dissertação (Mestrado), 2020.
- [97] SHEPPARD, D.; TERRELL, R.; HENKELMAN, G. Optimization methods for finding minimum energy paths. **The Journal of chemical physics**, AIP Publishing, v. 128, n. 13, 2008.
- [98] BRANDUARDI, D.; GERVASIO, F. L.; PARRINELLO, M. From A to B in free energy space. **The Journal of chemical physics**, AIP Publishing, v. 126, n. 5, 2007.
- [99] FABRÈGES, X. et al. Spin-lattice coupling, frustration, and magnetic order in multiferroic $RMnO_3$. **Physical review letters**, APS, v. 103, n. 6, p. 067204, 2009.
- [100] YE, F. et al. Spontaneous spin-lattice coupling in the geometrically frustrated triangular lattice antiferromagnet $CuFeO_2$. **Physical Review B**, APS, v. 73, n. 22, p. 220404, 2006.
- [101] KADANOFF, L. P. Scaling laws for Ising models near T_c . **Physics Physique Fizika**, APS, v. 2, n. 6, p. 263, 1966.
- [102] BADIEV, M. et al. The critical properties of the Ising model in a magnetic field. **Low Temperature Physics**, AIP Publishing, v. 46, n. 7, p. 693–696, 2020.
- [103] MURTAZAEV, A. et al. Phase transitions in the Ising model on a layered triangular lattice in a magnetic field. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 555, p. 124530, 2020.
- [104] MALAKIS, A. et al. Strong violation of critical phenomena universality: Wang-Landau study of the two-dimensional Blume-Capel model under bond randomness. **Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics**, APS, v. 79, n. 1, p. 011125, 2009.
- [105] GANGAT, A. A. Weak first-order phase transitions in the frustrated square lattice $J_1 - J_2$ classical Ising model. **Physical Review B**, APS, v. 109, n. 10, p. 104419, 2024.
- [106] FERNÁNDEZ, L. et al. Weak first order transitions. The two-dimensional Potts model. **Physics Letters B**, Elsevier, v. 277, n. 4, p. 485–490, 1992.
- [107] SCHÜLKE, L.; ZHENG, B. Dynamic approach to weak first-order phase transitions. **Physical Review E**, APS, v. 62, n. 5, p. 7482, 2000.

- [108] STANLEY, H. E. **Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena**. First edition. [S.l.]: Oxford University Press, 1971. (Monographs on Physics). ISBN 0198512570,9780198512578.
- [109] HUANG, K. **Statistical mechanics**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2008.
- [110] NATH, R. et al. Strong frustration due to competing ferromagnetic and antiferromagnetic interactions: magnetic properties of $M(VO)_2(PO_4)_2$ (M= Ca and Sr). **Physical Review B**, APS, v. 78, n. 2, p. 024418, 2008.
- [111] SHEVCHENKO, Y.; NEFEDEV, K.; OKABE, Y. Entropy of diluted antiferromagnetic Ising models on frustrated lattices using the Wang-Landau method. **Physical Review E**, APS, v. 95, n. 5, p. 052132, 2017.
- [112] FERREYRA, M. V. et al. Thermodynamics of the classical spin-ice model with nearest neighbour interactions using the Wang-Landau algorithm. **The European Physical Journal B**, Springer, v. 89, n. 2, p. 51, 2016.
- [113] AZHARI, M.; JANG, H.; YU, U. The Wang–Landau study of the frustrated $J_1 - J_2$ Ising model on the honeycomb lattice: Phase diagrams and residual entropy. **Results in Physics**, Elsevier, p. 108412, 2025.
- [114] WANNIER, G. Antiferromagnetism. the triangular Ising net. **Physical Review**, APS, v. 79, n. 2, p. 357, 1950.
- [115] LACROIX, C.; MENDELS, P.; MILA, F. **Introduction to frustrated magnetism: materials, experiments, theory**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2011. v. 164.
- [116] NASCIMENTO, R. et al. 2d triangular Ising model with bond phonons: an entropic simulation study. **The European Physical Journal B**, Springer, v. 97, n. 6, p. 73, 2024.
- [117] ZHI-HUAN, L. et al. Critical behaviour of the ferromagnetic Ising model on a triangular lattice. **Chinese Physics B**, IOP Publishing, v. 18, n. 7, p. 2696, 2009.
- [118] VATANSEVER, E. Dynamically order–disorder transition in the kinetic Ising model on a triangular lattice driven by a time dependent magnetic field. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 511, p. 232–239, 2018.
- [119] CAGNIN, R. L. **Método de Wang-Landau para sequenciamento de aminoácidos em estrutura nativa de proteínas em modelos de rede**. Dissertação (Mestrado), 2010.
- [120] BHANOT, G. The metropolis algorithm. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 51, n. 3, p. 429, 1988.
- [121] LANDAU, D.; TSAI, S.-H.; EXLER, M. A new approach to Monte Carlo simulations in statistical physics: Wang-Landau sampling. **American Journal of Physics**, AAPT, v. 72, n. 10, p. 1294–1302, 2004.
- [122] PENNA, T.; HERRMANN, H. Broad histogram method. **arXiv preprint cond-mat/9610041**, 1996.

- [123] FERREIRA, L. d. S. et al. **Simulações entrópicas do modelo de Ashkin-Teller**. Dissertação (Mestrado), 2016.
- [124] WANG, F.; LANDAU, D. Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states. **Physical Review Letters**, APS, v. 86, n. 10, p. 2050, 2001.
- [125] CAPARICA, Á. d. A.; CUNHA-NETTO, A. G. d. Wang-Landau sampling: improving accuracy. **Physical Review E**, APS, v. 85, n. 4, p. 046702, 2012.
- [126] FERREIRA, L. d. S. et al. **Simulações entrópicas do modelo de Bell-Lavis para a água**. Tese (Doutorado), 2020.
- [127] PFLEIDERER, C. Superconducting phases of f-electron compounds. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 81, n. 4, p. 1551, 2009.
- [128] OSHEROFF, D.; RICHARDSON, R.; LEE, D. Evidence for a new phase of solid He^3 . **Physical Review Letters**, APS, v. 28, n. 14, p. 885, 1972.
- [129] TILLEY, D. R. Superfluidity and superconductivity. Routledge, 2019.
- [130] LANDAU, L. The theory of phase transitions. **Nature**, Nature Publishing Group UK London, v. 138, n. 3498, p. 840–841, 1936.
- [131] NISHIMORI, H.; ORTIZ, G. **Elements of phase transitions and critical phenomena**. [S.l.]: Oxford university press, 2011.
- [132] MOULD, R. F. Pierre curie, 1859–1906. **Current oncology**, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 14, n. 2, p. 74–82, 2007.
- [133] HERBUT, I. **A modern approach to critical phenomena**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2007.
- [134] LEE, J.; KOSTERLITZ, J. New numerical method to study phase transitions. **Physical Review Letters**, APS, v. 65, n. 2, p. 137, 1990.
- [135] LEE, J.; KOSTERLITZ, J. Finite-size scaling and Monte Carlo simulations of first-order phase transitions. **Physical Review B**, APS, v. 43, n. 4, p. 3265, 1991.
- [136] GOLDENFELD, N. **Lectures on phase transitions and the renormalization group**. [S.l.]: CRC Press, 2018.
- [137] KADANOFF, L. P. et al. Static phenomena near critical points: theory and experiment. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 39, n. 2, p. 395, 1967.
- [138] PRIVMAN, V. **Finite size scaling and numerical simulation of statistical systems**. [S.l.]: World Scientific, 1990.
- [139] CAPARICA, A.; BUNKER, A.; LANDAU, D. Classical ferromagnet with double-exchange interaction: High-resolution Monte Carlo simulations. **Physical Review B**, APS, v. 62, n. 14, p. 9458, 2000.
- [140] CAPARICA, A.; LEÃO, S. A.; DASILVA, C. J. Static critical behavior of the q-states Potts model: High-resolution entropic study. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 438, p. 447–453, 2015.

- [141] MÓL, L.; COSTA, B. Anisotropic Heisenberg model with dipolar interactions: Monte Carlo simulations of the planar-to-paramagnetic phase transition in a bilayer system. **Physical Review B**, APS, v. 79, n. 5, p. 054404, 2009.