

Ricardo Mayckon Lopes Nascimento

Frustração magnética em um modelo de Ising triangular com anisotropia rotacional

Goiânia

Março de 2020



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

2. Nome completo do autor

Ricardo Mayckon Lopes Nascimento

3. Título do trabalho

Frustração magnética em um modelo de Ising triangular com anisotropia rotacional

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 **RICARDO MAYCKON LOPES NASCIMENTO, Discente**, em 21/05/2020, às 13:56, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Álvaro de Almeida Caparica, Usuário Externo**, em 25/05/2020, às 13:20, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



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 **1341418** e o código CRC **BF9F5B98**.

Ricardo Mayckon Lopes Nascimento

Frustração magnética em um modelo de Ising triangular com anisotropia rotacional

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

Universidade Federal de Goiás

Instituto de Física

Área de concentração: Física Estatística.

Orientador: Prof. Dr. Álvaro de Almeida Caparica

Coorientador: Prof. Dr. Cláudio José da Silva

Goiânia

Março de 2020

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

Mayckon Lopes Nascimento, Ricardo

Frustração magnética em um modelo de Ising triangular com anisotropia rotacional [manuscrito] / Ricardo Mayckon Lopes Nascimento. - 2020.

XLVIII, 48 f.: il.

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

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Goiás, Instituto de Física (IF), Programa de Pós-Graduação em Física, Goiânia, 2020. Bibliografia.

Inclui siglas, abreviaturas, símbolos, gráfico, algoritmos, lista de figuras.

1. Sistemas magnéticos frustrados. 2. Simulações entrópicas. 3. Transições de fase. I. de Almeida Caparica, Álvaro, orient. II. Título.

CDU 53



UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS

INSTITUTO DE FÍSICA

ATA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO

Ata nº 181 da sessão de Defesa de Dissertação de Ricardo Mayckon Lopes Nascimento, que confere o título de Mestre em Física, na área de concentração em Física.

Aos 16 dias do mês de março de 2020, a partir das 10h00min, no Anfiteatro I do Instituto de Física, realizou-se a sessão pública de Defesa de Dissertação intitulada “Frustração magnética em um modelo de Ising triangular com anisotropia rotacional”. 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 Luis Cesar Branquinho (IFG), 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 Dissertação, 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 16 dias do mês de março de 2020.

TÍTULO SUGERIDO PELA BANCA



Documento assinado eletronicamente por **Álvaro de Almeida Caparica, Usuário Externo**, em 16/03/2020, às 12:30, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Luis Cesar Branquinho, Usuário Externo**, em 16/03/2020, às 12:30, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Hermann Freire Ferreira Lima E Silva**,
Professor do Magistério Superior, em 16/03/2020, às 12:31, conforme horário oficial de
Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



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 **1219771** e o código CRC **A6669500**.

Referência: Processo nº 23070.012421/2020-15

SEI nº 1219771

Agradecimentos

Em primeiro lugar, eu agradeço a Deus pela minha vida e pelas oportunidades a mim concedidas ao longo dessa trajetória. À minha família, pelo amor, apoio, compreensão e por sempre me motivar a explorar os meus limites. À minha namorada Jossiele, pelo companheirismo, pela paciência e pela sua dedicação a nós e aos nossos objetivos em comuns.

Aos professores do programa de pós-graduação do Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás pelo conhecimento e troca de experiências, aos amigos do Instituto, especialmente aos que pertencem ao grupo de Física Estatística como o Lucas e o Rhayson, pelas discussões e auxílios prestados que contribuíram muito para minha formação profissional e pessoal.

Sou imensamente grato ao meu co-orientador Cláudio José da Silva e ao meu orientador Álvaro de Almeida Caparica, pela atenção e paciência, pelas orientações e por ambos serem tão dedicados à pesquisa e ao desenvolvimento pessoal e profissional dos seus orientandos.

E por fim, eu agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pelo apoio financeiro direcionado a essa pesquisa e à minha formação.

Resumo

Neste trabalho, nós apresentamos um novo modelo para o estudo de sistemas magnéticos frustrados proposto para uma rede triangular dotada de spins do tipo Ising que leva em conta não apenas a interação entre os spins mas também a interação devida à simetria de um dado substrato que corresponde a uma rede hospedeira do sistema magnético. Essa última interação é relacionada a um parâmetro fenomenológico que é responsável por controlar a intensidade dessa interação e que é proporcional a uma função representativa da simetria do material hospedeiro em questão. Os interesses por trás desse estudo buscam caracterizar a influência dessa interação no comportamento dos spins através das avaliações das suas principais propriedades termodinâmicas associadas a uma transição de fase que implicam numa nova maneira de modelar esses sistemas apontando para uma visão complementar a respeito do que pode promover a frustração em sistemas magnéticos em geral. Para o desenvolvimento dessa pesquisa, nós adotamos as simulações de amostragem entrópica baseadas no método de Wang-Landau, onde é realizado um passeio aleatório no espaço de energia, permitindo estimar a densidade de estados $g(E)$ enquanto a distribuição de energia é gerada no histograma. Por meio dessa metodologia, nós calculamos algumas propriedades termodinâmicas de interesse e conseguimos representar um diagrama de fases que ilustra as diversas formas que o sistema assume em função de um parâmetro de controle que é responsável por ajustar as diferentes fases magnéticas do modelo. Adotamos também a teoria de escala de tamanho finito que nos permitiu estimar os expoentes críticos correspondentes a uma determinada classe de universalidade que o sistema possa pertencer. Por consequência disso, nós conseguimos estabelecer as devidas conclusões a respeito da dinâmica do sistema e nos tornamos aptos para formular os possíveis desdobramentos decorrentes deste trabalho.

Palavras-chave: sistemas magnéticos frustrados. simulações entrópicas. transições de fase.

Abstract

In this work, we present a new model for the study of frustrated magnetic systems proposed for a triangular lattice equipped with Ising type spins that takes into account not only the interaction between the spins but also the interaction due to the symmetry of a given substrate that corresponds to a host lattice of the magnetic system. This last interaction is related to a phenomenological parameter that is responsible for controlling the intensity of this interaction and that is proportional to a function representative of the symmetry of the host material in question. The interest behind this study seeks to characterize the influence of this interaction on the behavior of the spins through the evaluation of their main thermodynamic properties associated with a phase transition that imply a new way of modeling these systems pointing to a complementary view of what can promote frustration in magnetic systems in general. For the development of this research, we adopted entropic sampling simulations based on the Wang-Landau method, where a random walk in the energy space is performed, allowing to estimate the density of states $g(E)$ while the energy distribution is generated in the histogram. Through this methodology, we calculated some thermodynamic properties of interest and managed to represent a phase diagram that illustrates the various forms that the system takes in function of a control parameter that is responsible for adjusting the different magnetic phases of the model. We also adopted the finite-size scale theory that allowed us to estimate the critical exponents corresponding to a certain class of universality that the system may belong to. As a result of this, we were able to establish the proper conclusions regarding the dynamics of the system and we became able to formulate the possible developments resulting from this work.

Keywords: magnetic frustrated systems. entropic simulations. phase transitions.

Lista de ilustrações

Figura 1 – (a) Numa rede quadrada antiferromagnética, todos os spins podem ter alinhamento antiparalelo com seus vizinhos, não apresentando frustração. (b) Em uma rede triangular, este alinhamento não é possível: três spins vizinhos não podem ser alinhados de forma antiparalela simultaneamente e, assim, gera frustração. (c) Os estados fundamentais de um conjunto de spins de Heisenberg tem spin total nulo, assim a soma vetorial de um grupo elementar de spins é nula. Um grupo de três spins forma uma estrutura única (nenhum grau de liberdade), ao passo que um grupo de quatro spins forma uma família de estados degenerados (dois graus de liberdade θ e φ).	17
Figura 2 – (a) A rede <i>kagomé</i> consiste de triângulos compartilhando seus vértices. (b) A rede <i>pirocloro</i> consiste de um arranjo de tetraedros compartilhando seus vértices. (c) Estrutura hexagonal do gelo consistindo de prótons (esferas menores) que residem nas ligações entre dois átomos de oxigênio (esferas maiores). As posições do oxigênios são determinadas univocamente, mas há uma miríade de configurações para os prótons.	18
Figura 3 – (Esquerda) Rede Kagomé com interações J_1 e J_2 . (Direita) Rede favo de mel centrada com interações J_1 , J_2 e J_3	20
Figura 4 – (Esquerda) Representação esquemática da rede triangular sobre o substrato com simetria ortorrômbica. (Direita) Célula unitária do modelo de Ising triangular com respeito ao hamiltoniano do modelo.	22
Figura 5 – Diagrama de fases da água.	24
Figura 6 – (Esquerda) Energia em função da temperatura para vários valores de J_a . (Direita) Calor específico em função da temperatura para vários valores de J_a	33
Figura 7 – (Figura superior) Representação do diagrama de fases do sistema para $J_a \geq 0$. (Figura inferior) Representação da Magnetização para vários tamanhos de rede com J_a fixo.	34
Figura 8 – (Esquerda) Configuração correspondente à fase ferromagnética para $J_a = 1, 0$. (Centro) Configuração correspondente à fase de <i>stripes</i> para $J_a = 3, 0$. (Direita) Configuração correspondente à fase paramagnética para $J_a = 3, 0$	35
Figura 9 – Representação de algumas configurações correspondentes à $J_a = 2, 0$ ilustrando a degenerescência do ground state.	36
Figura 10 – Magnetização e susceptibilidade magnética em função da temperatura para vários valores de J_a	37

Figura 11 – Magnetização e susceptibilidade magnética em função da temperatura para valores de $J_a \geq 2$ com o novo parâmetro de ordem.	37
Figura 12 – Comportamento da susceptibilidade magnética para J_a fixo para vários tamanhos de rede.	38
Figura 13 – Gráfico dos expoentes críticos para $J_a = 1.0$	39
Figura 14 – Gráfico dos expoentes críticos para $J_a = 1.0$	40
Figura 15 – Gráfico dos expoentes críticos para $J_a = 4.0$	41
Figura 16 – Gráfico dos expoentes críticos para $J_a = 4,0$	42

Sumário

	Introdução	13
1	SISTEMAS MAGNÉTICOS FRUSTRADOS	16
1.1	Introdução	16
1.2	O magnetismo frustrado	16
1.3	Anisotropia rotacional	20
2	TRANSIÇÕES DE FASE E FENÔMENOS CRÍTICOS	23
2.1	Introdução	23
2.2	Escala de tamanho finito	25
3	SIMULAÇÕES ENTRÓPICAS	28
3.1	Densidade de estados conjunta	30
4	RESULTADOS	32
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	43
	REFERÊNCIAS	44

Introdução

O estudo de sistemas magnéticos é um dos temas que mais desperta atenção na física da matéria condensada. Esse interesse pode ser atribuído ao comportamento peculiar dos seus constituintes microscópicos e à sua extensa aplicabilidade na tecnologia moderna, cujas aplicações vão desde dispositivos simples àqueles extremamente complexos e sofisticados da indústria eletroeletrônica[1] e spintrônica[2]. Grande parte dessa atenção é dedicada a sistemas onde os graus de liberdade das interações magnéticas em uma rede de íons são incompatíveis com a estrutura cristalina da rede hospedeira¹, impossibilitando a minimização da energia local dos spins dos íons via alinhamento, mas por sua vez dando origem a fases magnéticas exóticas como gelos de spin[3] e líquidos de spin[4], as quais tem sido intensamente investigadas nas últimas duas décadas[5, 6]. Esse fenômeno é conhecido como frustração geométrica e foi introduzido formalmente por P. W. Anderson para o estudo do comportamento de vidros de spin [7]. Além da frustração geométrica, alguns sistemas magnéticos podem ser incapazes de minimizar todos os seus termos de interação individuais devido a presença de impurezas ou a competição² entre interações de troca[8]. Além disso, frustração pode ser estudada em cristais isolantes bem como em metais e materiais desordenados. Algumas características especiais desses sistemas tais como estado fundamental altamente degenerado e a possível ordem não colinear (incomensurável) dos spins oferecem um amplo e desafiador campo de investigação para questões fundamentais para ambos sistemas clássicos e quânticos[9]. Para citar um exemplo, uma questão importante é encontrar um elo entre cupratos supercondutores e sistemas magnéticos quânticos bidimensionais frustrados[10]. Além de tudo isso, essas e outras fases apresentadas por essa classe de sistemas magnéticos também são responsáveis por provocar um profundo impacto nos métodos empregados para o estudo da nematicidade do spin e da supercondutividade [11].

O estudo de sistemas magnéticos frustrados tem se desenvolvido através de vários métodos analíticos usando as ideias de Onsager, tratamentos via teoria de Landau-Ginzburg e análises mais gerais de simetrias e propriedades topológicas, técnicas de campo médio, grupo de renormalização, expansão em série de baixas e altas temperaturas, simulações de Monte Carlo e investigações experimentais[12]. Entretanto, o comportamento crítico desses sistemas não tem se mostrado trivial diante de certas inconsistências apresentadas por algumas das técnicas citadas acima. Por sua vez, uma abordagem relevante para compreender o magnetismo em cristais isolantes, onde spins isolados se localizam nos vértices de uma rede, é a derivação de hamiltonianas de spin localizados partindo do modelo

¹ Sítios atômicos sobre os quais estão localizados os íons.

² Ferromagnética *versus* antiferromagnética

de Hubbard, por exemplo. Dependendo do grau de liberdade do spin, tais hamiltonianas serão tipo Ising, XY ou Heisenberg. Para o caso com interações de pares de spins, a frustração magnética surge tanto por causa da competição entre diferentes interações (normalmente, entre primeiros e segundos vizinhos) quanto devido à topologia da rede. O primeiro caso já foi estudado exhaustivamente através do modelo $J_1 - J_2$ [13]. O segundo caso ocorre quando blocos elementares (células unitárias) triangulares se rearranjam num padrão compartilhando tanto vértices (rede *kagomé*) quanto arestas (rede triangular), em duas ou três dimensões. Há também os blocos elementares tetraédricos, através dos quais se constrói uma rede conhecida como *pirocloro*, onde tetraedros vizinhos compartilham suas arestas. Há vários materiais que podem ser encontrados com tais características geométricas[14]. O estudo de transições de fase em sistemas magnéticos com frustração geométrica apresenta uma vantagem pois esses podem ser modelados através de hamiltonianas simples sem que haja necessidade de se preocupar com questões topológicas complicadas.

Basicamente, um grande número de materiais contendo camadas atômicas de íons de transição pode ser observado experimentalmente em compostos com a fórmula ATM_2As_2 , onde $A=\{Ca, Sr, Ba\}$ e $TM=\{Mn, Fe, Co, Ni\}$. Esses materiais podem ser considerados bidimensionais (2D) uma vez que as interações intra-camada é muito menor que a interação inter-camada [15]. E diante do fato de que os seus graus de liberdade magnéticos podem ser modelados em sítios de uma rede de Bravais 2D, um número enorme de modelos foi proposto para a descrição de anisotropias espaciais. Entretanto, é sabido que vibrações mecânicas da rede cristalina (fônons) modulam o campo elétrico cristalino dos íons magnéticos e, por sua vez, induzem uma relaxação direta entre diferentes estados de spin[16, 17]. Mesmo diante disso, nenhum modelo de rede considera o acoplamento entre spins e as excitações da rede hospedeira (substrato) da camada de íons. Diante do exposto, o presente trabalho apresenta uma metodologia para explorar um terceiro tipo de frustração magnética em sistemas de spin. Essa é baseada no fato da rede de íons magnéticos interagir com os fônons da rede cristalina do substrato. Partindo de uma hamiltoniana simples para o modelo de Ising numa rede triangular, adicionamos uma interação extra a fim de atenuar a interação de troca devido a simetria da rede cristalina do substrato. Isso produz uma anisotropia rotacional capaz de reorientar fases magnéticas, destruir a ordem ferromagnética de longo alcance e formar estruturas magnéticas exóticas, como a fase de *stripes*. Para explorar as propriedades termodinâmicas e a criticalidade do modelo proposto utilizamos simulações numéricas entrópicas baseadas no algoritmo de Wang-Landau[18]. O trabalho apresentado aqui segue uma estrutura que se inicia no Capítulo 1 com a exposição de conceitos associados a sistemas magnéticos frustrados, onde são apresentados modelos relativos ao tema juntamente com o modelo proposto nesta pesquisa. Em seguida, no Capítulo 2 fazemos uma breve abordagem sobre o fenômeno das transições de fase e fenômenos críticos, essenciais para a compreensão dos resultados obtidos. No Capítulo 3, descrevemos o método de simulação utilizado. No Capítulo 4,

apresentamos alguns resultados e discussões que reforçam e destacam as características do modelo por meio de propriedades termodinâmicas e da análise da criticalidade do sistema. Na sequência, no Capítulo 5 apresentamos as conclusões associadas ao trabalho onde também abrimos espaço para comentar sobre as expectativas futuras dos possíveis desdobramentos decorrentes desta pesquisa.

1 Sistemas magnéticos frustrados

1.1 Introdução

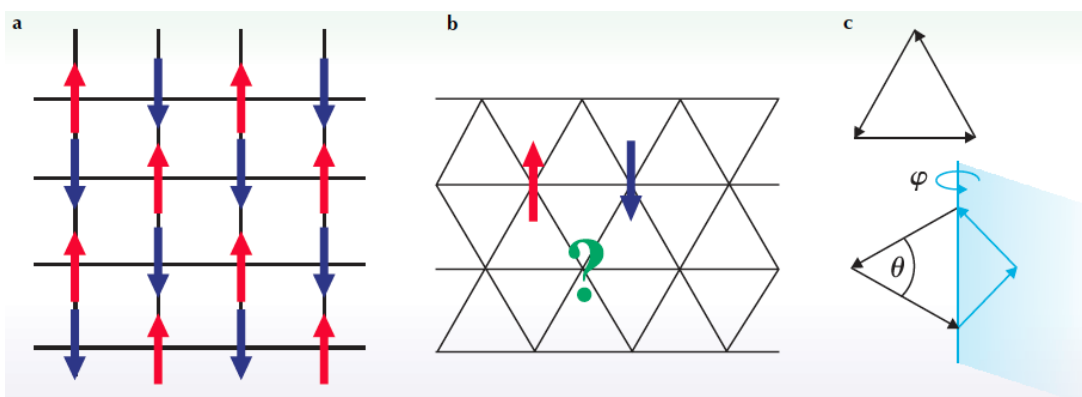
O estudo do magnetismo busca compreender os campos magnéticos, as propriedades magnéticas da matéria e as interações que a matéria possui com os campos. Na busca por um entendimento melhor sobre as propriedades magnéticas de um dado sistema, devemos conhecer alguns tópicos básicos a respeito da magnetização. Esse conceito é importante porque as propriedades magnéticas da matéria tem sua origem nos momentos magnéticos dos átomos. Materiais que apresentam momentos magnéticos permanentes são vistos como materiais magnéticos, cuja ordem de longo alcance se manifesta espontaneamente. Tal ordem ocorre devido à interação de origem eletrostática e de natureza quântica chamada de interação de troca. Essa interação que promove a ordem magnética, pode ser uma interação de troca direta, ou seja, de curto alcance ou uma interação indireta correspondente a de longo alcance. Esse entendimento se faz útil por exemplo no momento de avaliar as regiões ordenadas (conhecidas como domínios magnéticos) das amostras magnéticas quando em contato com outras materiais ou quando são submetidas a campos externos[19].

Um outro tópico interessante diz respeito à classificação de sistemas magnéticos como diamagnéticos (que produzem um momento magnético oposto ao campo aplicado de modo que estes sejam repelidos, como é o caso dos gases nobres como He e Ne), paramagnéticos (que na ausência de um campo magnético externo seus momentos magnéticos apontam em direções aleatórias cancelando uns aos outros e resultando em uma magnetização nula e quando o campo é aplicado, os momentos magnéticos tendem a se orientar na direção do campo gerando uma pequena atração que aumenta na medida que aumentamos o campo, como pode ser observado em materiais como FeSO_4 e MnCl_2) e ferromagnéticos (que respondem a um campo aplicado com uma magnetização intensa de modo que se mantenha mesmo quando o campo é retirado, como acontece com Fe, Co e Ni). Outras nomenclaturas incluem os ferrimagnéticos, os antiferromagnéticos e os superparamagnéticos[20].

1.2 O magnetismo frustrado

O estudo de sistemas magnéticos frustrados se tornou um fértil campo de pesquisa no meio científico. Seminários, congressos e artigos publicados em revistas de grande impacto sustentam a importância e a necessidade de se estudar esses tipos de sistemas. Como ponto de partida, G. H. Wannier estudou o primeiro sistema magnético frustrado em 1950[21]. O sistema em questão era composto por uma rede triangular com spins do tipo

Figura 1 – (a) Numa rede quadrada antiferromagnética, todos os spins podem ter alinhamento antiparalelo com seus vizinhos, não apresentando frustração. (b) Em uma rede triangular, este alinhamento não é possível: três spins vizinhos não podem ser alinhados de forma antiparalela simultaneamente e, assim, gera frustração. (c) Os estados fundamentais de um conjunto de spins de Heisenberg tem spin total nulo, assim a soma vetorial de um grupo elementar de spins é nula. Um grupo de três spins forma uma estrutura única (nenhum grau de liberdade), ao passo que um grupo de quatro spins forma uma família de estados degenerados (dois graus de liberdade θ e φ).



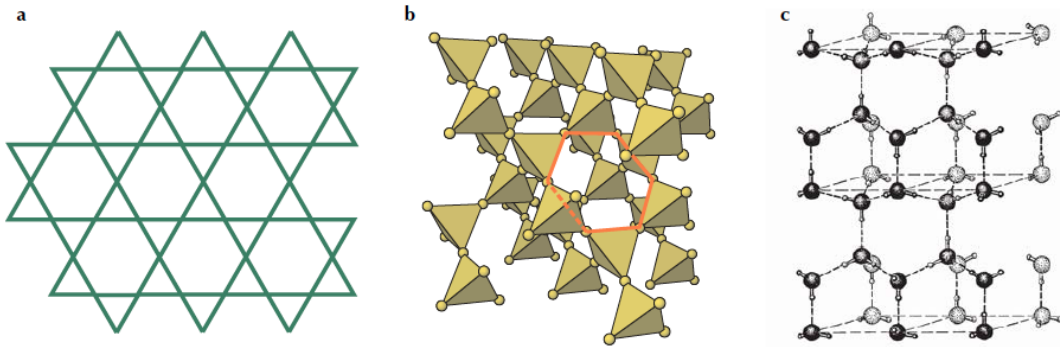
Fonte: [22]

Ising, interagindo entre os primeiros vizinhos por meio de uma interação antiferromagnética. Posteriormente, a característica de frustração foi realocada para sistemas compostos por vetores de spins como a estrutura helicoidal de Heisenberg descoberta independentemente por A. Yoshimori e J. Villain em 1959[14].

A palavra frustração foi introduzida no meio científico quase que ao mesmo tempo por G. Toulouse e J. Villain em 1977 no contexto de vidro de spins, onde de acordo com o modelo de Edwards-Anderson, uma pequena concentração de material magnético é diluído em sítios aleatórios de um material não magnético de modo que o sistema evolua para um estado onde os momentos magnéticos se mantêm fixos em direções aleatórias, imitando assim um comportamento vítreo[7]. Nesse contexto, é importante ressaltar que a característica associada ao termo frustração foi inserida para representar a incapacidade do spin, ou de um número de spins do sistema, em encontrar uma orientação que satisfaça todas as orientações com os seus spins vizinhos. Efetivamente, isso significa que o mínimo da energia total ou estado fundamental não corresponde ao mínimo de cada ligação.

Na maioria desses sistemas, a frustração é causada pela competição entre diferentes tipos de interação de troca (ferro ou antiferro) ou pela geometria da rede que contém os momentos magnéticos, como pode ser percebido pela Figura 1 e pela Figura 2. Essas e outras observações a respeito dessa classe de sistemas magnéticos, permitiu apontar como principal característica de um sistema magnético frustrado a alta degenerescência do seu estado fundamental, fato este que pode ter a sua origem nas flutuações térmicas ou quânticas, nas correlações dentro dos estados fundamentais, na dinâmica de baixa

Figura 2 – (a) A rede *kagomé* consiste de triângulos compartilhando seus vértices. (b) A rede *pirocloro* consiste de um arranjo de tetraedros compartilhando seus vértices. (c) Estrutura hexagonal do gelo consistindo de prótons (esferas menores) que residem nas ligações entre dois átomos de oxigênio (esferas maiores). As posições do oxigênio são determinadas univocamente, mas há uma miríade de configurações para os prótons.



Fonte: [22]

temperatura, etc[12].

Devido a essa alta degenerescência, vários estados magnéticos exóticos são observados, tais como o estado parcialmente desordenado, que é frequentemente encontrado em sistemas eletrônicos e em redes triangulares compostas por cadeias de spin. Nesses sistemas compostos por sub-redes, esse estado em uma temperatura específica é geralmente caracterizado por uma parcela dos momentos magnéticos das sub-redes serem paramagnéticos em uma célula unitária magnética[23, 24]. Outro fenômeno intrigante associado à degenerescência do estado fundamental é o da reentrância que geralmente surge quando há uma variação monotônica de uma quantidade termodinâmica responsável por mais de uma transição de fase de maneira que os estados final e inicial são macroscopicamente os mesmos. Esse comportamento, apesar de ser desconhecida a sua condição necessária e suficiente para ocorrer, já foi observado no estudo de buracos negros, vidros de spins, organelas sem membranas, entre outros[25, 26, 27, 28].

Um outro fato interessante é a de um antiferromagneto frustrado, que pode evoluir para uma fase onde os spins vizinhos são fortemente correlacionados de maneira que o comportamento do sistema se assemelhe a um líquido, caracterizando assim a fase líquido de spin[29]. Nesse caso, um comportamento curioso é observado quando os spins ocupam posições similares aos átomos de hidrogênio presentes no gelo, caracterizando a fase gelo de spins[30]. Essas e outras características ilustram bem as diversas peculiaridades relacionadas ao comportamento, à complexidade de compreensão e às possíveis aplicações que o universo enigmático dos sistemas magnéticos frustrados podem apresentar.

De forma geral, sistemas magnéticos podem ser modelados em sítios de uma rede de Bravais 2D e uma hamiltoniana efetiva de baixa energia pode ser formulada em termos

da interação entre spins. O exemplo mais famoso é o da hamiltoniana de Heisenberg:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.1)$$

onde \mathbf{S} é o operador de spin e J_{ij} é a constante de troca, que nesse caso descreve uma interação isotrópica entre spins localizados nos sítios i e j . Para esse modelo, existe uma fase paramagnética a altas temperaturas ($T \gg J$), de modo que esta condição satisfaça a simetria de invariância da hamiltoniana sob uma rotação total do spin, visto que devido as flutuações térmicas, cada spin rotaciona livremente e $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$. Por outro lado, uma fase com ordem de longo alcance pode ser observada para baixas temperaturas ($T \approx J$), resultando em $\langle \mathbf{S} \rangle \neq 0$. Assim, $\langle \mathbf{S} \rangle$ pode ser escolhido como parâmetro de ordem no caso ferromagnético, já que ele é capaz de descrever a quebra espontânea de simetria rotacional da hamiltoniana de spin. Mais especificamente, $\langle \mathbf{S} \rangle$ é nulo na fase simétrica e não nulo quando a simetria é quebrada no surgimento da fase ordenada de longo alcance. Fica evidenciado, então, que analisar a quebra de simetria é uma técnica poderosa para o estudo de ordens de longo alcance em materiais magnéticos. Porém, há estados fundamentais de sistemas de spins interagentes que não quebram a simetria da hamiltoniana, como o caso dos líquidos de spin. Há, então, um parâmetro de ordem capaz de classificar estes estados? Um número imenso de trabalhos dedicados a responder essa questão vem sendo publicados[31].

Esse problema fica mais difícil de ser analisado quando há competição entre diferentes interações de troca e quando a geometria da rede é complexa. O exemplo mais analisado quando trata-se da competição entre interações é o $J_1 - J_2$ com spin- $\frac{1}{2}$ de Heisenberg numa rede quadrada:

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.2)$$

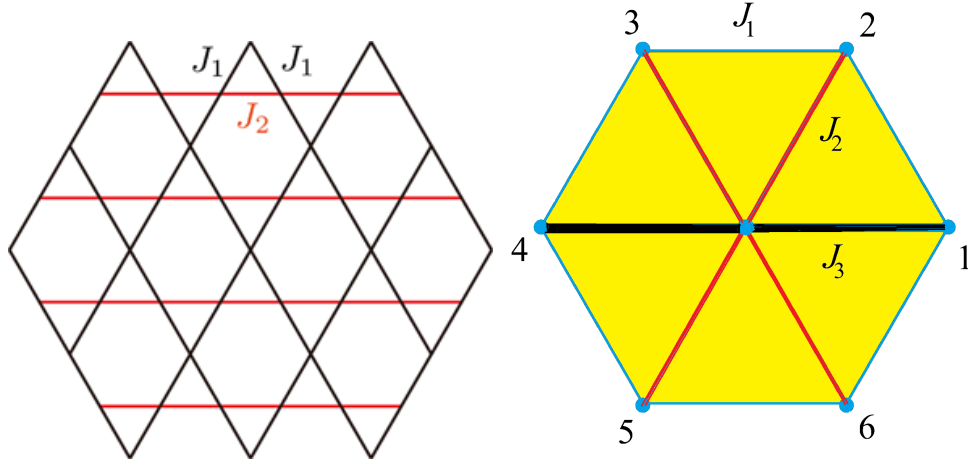
onde $J_1, J_2 < 0$, $\langle i, j \rangle$ representa uma soma sobre primeiros vizinhos e $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ sobre segundos. J_1 e J_2 competem porque favorecem diferentes configurações de spin. Observa-se que os estados fundamentais para os casos $J_2/J_1 \ll 1$ e $J_2/J_1 \gg 1$ são as fases de Néel e *stripes*, respectivamente[32, 8]. Para $J_2/J_1 = 0, 5$, o modelo é totalmente frustrado e as fase de Néel e *stripes* tornam-se degeneradas¹ e a ordem de longo alcance é destruída. Esse modelo também é muito explorado considerando spins tipo Ising ($\sigma = \pm 1$), destacando-se a identificação de fases nemáticas[33].

Outro modelo bastante explorado é o modelo de Ising definido sobre uma rede Kagomé (veja Figura 3):

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (1.3)$$

¹ Degenerescência no sentido clássico.

Figura 3 – (Esquerda) Rede Kagomé com interações J_1 e J_2 . (Direita) Rede favo de mel centrada com interações J_1 , J_2 e J_3 .



Fonte: [35]

onde $\sigma_i = \pm 1$. Estudos revelaram que quando $J_1 < 0$, não há transição de fase em uma temperatura finita e quando a interação J_2 é considerada, este modelo pode ser transformado para um modelo exatamente solúvel de férmions livres[34, 8].

Outro modelo onde destaca-se o efeito geométrico na ordem magnética é o com estrutura de favo de mel centrada (veja Figura 3):

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_3 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (1.4)$$

onde $J_1 > J_2 > J_3$. Um fato curioso deste modelo é que podemos observar uma fase parcialmente desordenada próxima de uma fase ordenada no estado fundamental. Estudos apontaram que para $J_2 = J_3 = 0$, é possível recuperar a estrutura de favo de mel, mas quando temos $J_1 = J_2 = J_3$ a estrutura resultante corresponde à rede triangular[35].

Esses e diversos outros modelos foram propostos para o estudo do magnetismo frustrado considerando a competição entre interações ou o efeito da geometria da rede. Porém, nenhum modelo considera o acoplamento entre a interação de troca e as excitações da rede hospedeira (substrato) dos spins. Tal acoplamento é razoável, visto que vibrações mecânicas da rede cristalina (fônons) modulam o campo elétrico cristalino dos íons magnéticos e, por sua vez, induzem uma relaxação direta entre diferentes estados de spin[16]. Na seção a seguir, veremos uma metodologia para considerar a interação entre os spins e os fônons da rede cristalina do substrato.

1.3 Anisotropia rotacional

Sistemas interagentes de baixa dimensionalidade compartilham uma característica em comum, a saber, são afetados pela simetria da rede cristalina do substrato sobre o

qual são *construídos*. Consequentemente, haverá uma modulação de suas energias com a orientação relativa ao substrato[36]. Baseado nisso, E. Ya. Shermann propôs uma nova forma de estudar as interações de sistemas eletrônicos bidimensionais sinalizando a existência de uma interação adicional devida à simetria do substrato[37]. Ele demonstrou que essa interação se manifesta por meio das propriedades dos sistemas eletrônicos bidimensionais, afetando consideravelmente a região de um sólido eletrônico 2D, conhecido como cristal de Wigner e que possui extrema relevância para o estudo de semicondutores. Nesse artigo, o autor propõe que a energia elétron-fônon acústico depende da orientação do vetor de onda e que a ancoragem dos elétrons ao substrato pode ser associada a um potencial descrito pela soma dos invariantes de simetria de grupo T_d [38]. Esse potencial complementa a representação do potencial puramente coulombiano de modo que a simetria do substrato seja levada em consideração. Dessa forma, atreladas ao potencial de Coulomb, para um substrato com simetria *ortorrômbica* deve-se adicionar um termo proporcional a $\cos(2\phi)$, onde ϕ é o ângulo entre a orientação do vetor de onda e um dado eixo cristalino do substrato. Da mesma forma, para um substrato com simetria *tetragonal* o termo a ser somado é proporcional a $\cos(4\phi)$ e para a simetria *hexagonal* proporcional a $\cos(6\phi)$. Essa ideia foi verificada através de simulações numéricas de Dinâmica Molecular para testar a estabilidade de um cristal de Wigner sobre um substrato com simetria tetragonal[39]:

$$U(r) = \frac{e^2}{\chi r} (1 + a \cos 4\phi). \quad (1.5)$$

Nesta equação, r corresponde à distância entre os elétrons, χ representa a constante dielétrica, a indica a intensidade do acoplamento elétron-fônon acústico e ϕ é o ângulo entre um eixo preferencial do substrato e o vetor que liga dois elétrons.

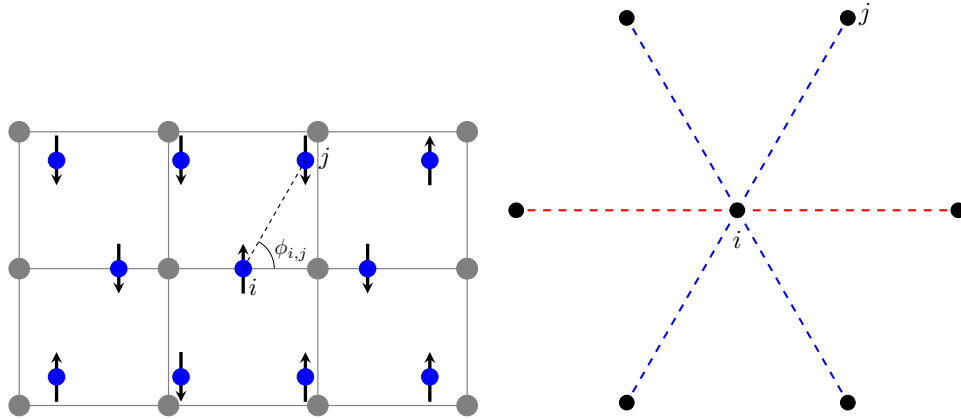
Nesta dissertação, consideraremos a existência de um substrato e sua influência nas interações entre os spins da rede magnética, semelhante ao que é observado em compostos supercondutores a base de ferro, onde o acoplamento entre a rede e a nematicidade de spin é responsável pela ordem magnética do estado fundamental[17]. Dessa forma, a hamiltoniana do modelo de Ising numa rede triangular com uma anisotropia rotacional pode ser escrita como:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} [J + J_a \cos(2\phi_{ij})] \sigma_i \sigma_j, \quad (1.6)$$

onde σ_i são os spins de Ising. J é a interação de troca, J_a é um parâmetro fenomenológico que fornece o grau de interação da rede de spins com o substrato e ϕ_{ij} é o ângulo formado entre o vetor que liga dois sítios e uma direção transversal ou longitudinal definida sobre a rede do substrato (veja Figura 4). Neste trabalho, estamos considerando apenas o caso de um substrato com simetria ortorrômbica, isto é, somamos um termo adicional proporcional a $\cos(2\phi_{ij})$.

Na Figura 4, ilustramos também o comportamento dos spins com os seus vizinhos e como a interação entre eles é influenciada por J_a . Nesta representação, a linha vermelha

Figura 4 – (Esquerda) Representação esquemática da rede triangular sobre o substrato com simetria ortorrômbica. (Direita) Célula unitária do modelo de Ising triangular com respeito ao hamiltoniano do modelo.



Fonte: os autores

(horizontal) corresponde à interação $J + J_a$ e a linha azul à interação $J - J_a/2$. Neste caso, as interações sobre o eixo principal (linha vermelha) do spin selecionado serão sempre positivas e intensificadas para valores de J_a maiores que 0, no entanto, as demais interações sofrem uma influência negativa para cada valor tomado de J_a de maneira que a interação possa ser positiva ou negativa.

Como veremos mais adiante, esse modelo é capaz de produzir fases magnéticas exóticas apenas controlando o valor de J_a . Para determinados valores de J_a , foi identificada a fase de *stripes* que possui grande aplicação em supercondutores e sistemas de transporte em geral[40, 41]. Além disso, demonstraremos que a adição do termo de atenuação da interação de troca resulta na quebra de ordem ferromagnética de longo alcance.

2 Transições de fase e fenômenos críticos

2.1 Introdução

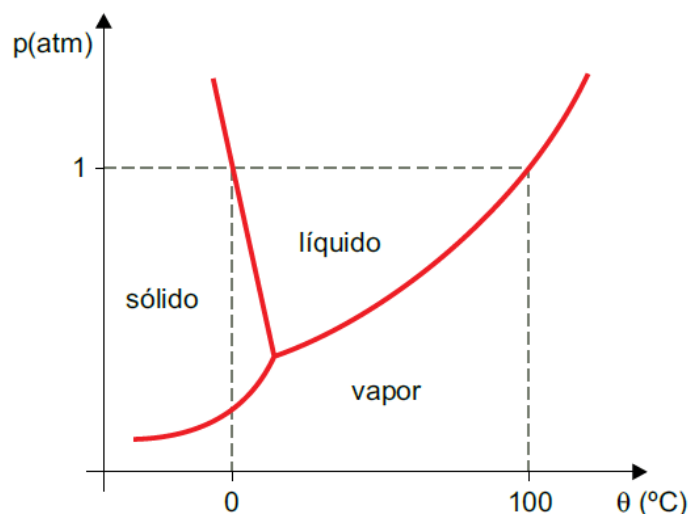
De acordo com a termodinâmica e a mecânica estatística, uma fase pode ser caracterizada por um sistema homogêneo, ou seja, um estado da matéria que possui propriedades físicas uniformes em uma escala de comprimento macroscópico[42, 43]. De um ponto de vista macroscópico, em geral, estamos habituados a observar a natureza em três estados físicos, a saber, sólido, líquido e gasoso. Esses estados possuem propriedades físicas diferentes como a densidade, a capacidade térmica, a pressão, a temperatura, etc. Mas quando avaliamos o comportamento da matéria em situações atípicas, podemos observar estados de agregação diferentes, por exemplo, quando submetemos uma amostra de gelo a altas pressões, nós podemos obter diversas formas cristalinas que compõe uma certa variedade de gelo. De forma mais geral, distintos arranjos moleculares ou atômicos correspondentes a uma mesma substância sólida ou líquida apresentam propriedades distintas que caracterizam novos estados, o que por sua vez amplia o nosso leque de conhecimento sobre as fases de um determinado material. Desse modo, com base no exemplo anterior, ao aumentarmos a pressão poderemos constatar uma evolução de fases associadas a arranjos diferentes para uma mesma amostra de gelo, esse fenômeno é conhecido como uma *transição de fase*.

Uma maneira de apresentarmos um “mapa” das fases de um material é por meio do seu *diagrama de fases*, que consiste em uma representação gráfica dotada de eixos associados a parâmetros de controle capazes de delimitar as regiões equivalentes às respectivas fases de um dado sistema. Como exemplo disso, podemos explicitar o digrama de fases da água conforme representado na Figura 5.

Nesse diagrama, três fases são claramente apresentadas por meio dos pontos associados a cada par ordenado do gráfico definido pela pressão e pela temperatura. Nota-se que quando mantemos a pressão constante e aumentamos a temperatura o sistema caminha para uma linha de transição que representa o limite de fase, por exemplo a linha que separa a fase sólida da líquida, onde sobre esta linha a fase anterior e a fase posterior a este limite são indistinguíveis e portanto ambas coexistem.

Uma apresentação moderna a respeito das classificações das transições de fase nos diz que uma transição de fase pode ser *contínua* ou *descontínua*[44]. Uma transição de fase contínua, ou seja, que não é acompanhada de calor latente, representa uma *transição de segunda ordem*, como é o caso do sistema que avança ao longo da linha de coexistência líquido-vapor aumentando a sua pressão e temperatura. Em contrapartida, uma transição

Figura 5 – Diagrama de fases da água.



Fonte: os autores

descontínua ou de *primeira ordem* é acompanhada pelo calor latente, como é o caso do congelamento da água.

Vale lembrar que uma fase também pode ser caracterizada por um *parâmetro de ordem*. Este é capaz de medir como os elementos microscópicos que representam uma fase macroscópica estão ordenados ou em algum outro estado semelhante. O parâmetro de ordem é responsável por medir o grau de assimetria do sistema em consideração, ou seja, ele é diferente de zero em uma fase ordenada (um estado de baixa simetria) e igual a zero numa fase desordenada (uma fase simétrica).

Por exemplo, para materiais magnéticos, o parâmetro de ordem adequado é a magnetização, para sólidos, é a periodicidade espacial dos átomos ou moléculas e para supercondutores, é a função de onda.

Os estudos feitos em torno de um ponto crítico (como no caso do ponto de intersecção das três curvas da Figura 5) são descritos pela teoria de fenômenos críticos, que busca desenvolver um formalismo capaz de caracterizar o fenômeno crítico por intermédio do cálculo de expoentes críticos. Tais expoentes são responsáveis por medir o grau de singularidade ou divergência de uma certa quantidade física que é calculada próximo do ponto crítico. Por exemplo, verifica-se que quando avaliamos o comportamento de sistemas magnéticos na região crítica, experimentos mostram que quando a temperatura do sistema magnético se iguala à temperatura crítica ($T = T_c$) a magnetização m é proporcional a $h^{1/\delta}$ ($1/\delta < 1$)[45], onde h é um campo magnético pequeno mas finito e δ é um expoente crítico. Outros expoentes críticos são observados de forma análoga em relação a quantidades termodinâmicas diferentes ao serem avaliadas na criticalidade. De maneira geral, a maior parte dos expoentes críticos obedecem a uma lei de escala capaz de determinar um expoente

por intermédio do valor de outro [42].

2.2 Escala de tamanho finito

Uma abordagem sucinta capaz de contornar o problema de trabalharmos com sistemas reais que são extremamente grandes e que engloba o uso dos expoentes críticos é a técnica da escala de tamanhos finitos, capaz de nos dar uma visão macroscópica do comportamento do sistema a partir do estudo de uma pequena porção do mesmo[46]. Segundo este formalismo, a energia livre de Helmholtz molar pode ser representada por uma forma de escala universal

$$f(t, H; L) = L^{-d}Y(atL^{1/\nu}, bHL^{\Delta/\nu}), \quad (2.1)$$

onde a temperatura reduzida t corresponde a $(T - T_c)/T_c$, o campo externo é representado por H , os fatores métricos e a dimensão espacial do sistema são respectivamente representados por a , b e d , além disso, a expressão anterior também engloba os expoentes críticos estáticos ν e Δ e a dimensão linear do sistema L . Uma vez obtida a energia livre, podemos calcular quantidades termodinâmicas de interesse tais como magnetização, susceptibilidade e calor específico[45, 47]. Com o campo nulo, essas quantidades obedecem as relações de escala

$$m \approx L^{-\beta/\nu}m'(tL^{1/\nu}), \quad (2.2)$$

$$\chi \approx L^{\gamma/\nu}\chi'(tL^{1/\nu}), \quad (2.3)$$

$$c \approx c_\infty + L^{\alpha/\nu}c'(tL^{1/\nu}). \quad (2.4)$$

Nessas expressões identificamos as funções de escala universal m' , χ' e c' que assumem valores constantes quando a temperatura se aproxima da região crítica ($t = 0$) e os expoentes críticos estáticos β , γ e α que integram a base que caracteriza a classe de universalidade a qual o sistema possa pertencer[48]. Tais expoentes devem obedecer as relações de escala e hiperescala representadas matematicamente por

$$\gamma = \nu(2 - \eta), \quad (2.5)$$

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (2.6)$$

$$\gamma = \beta(\delta - 1), \quad (2.7)$$

$$d\nu = 2 - \alpha. \quad (2.8)$$

As relações anteriores são respectivamente conhecidas na literatura como a relação de Fisher, Rushbrooke, Widom e Josephson[49]. Essas equações também estabelecem uma conexão com o expoente Δ observado na energia livre, pois ao substituirmos o valor de γ obtido pela equação (2.7) na relação (2.6), nós chegamos na relação de Griffiths[50] representada por

$$\alpha + \beta(\delta + 1) = 2, \quad (2.9)$$

de maneira que quando subtraímos da equação (2.6) a relação (2.9) nós facilmente verificamos que $\beta\delta = \beta + \gamma$ onde esta última relação é equivalente ao expoente Δ [51, 49].

Apesar de obtermos diversas relações envolvendo os expoentes críticos, percebe-se que elas não se mostram suficientes para eliminar a dependência que os expoentes associados a cada quantidade termodinâmica de interesse tem com o expoente crítico ν . Uma forma de calculá-lo separadamente é por meio do logaritmo da derivada da magnetização de maneira que possamos obter as relações

$$V_1 \equiv 4[m^3] - 3[m^4], \quad (2.10)$$

$$V_2 \equiv 2[m^3] - [m^4], \quad (2.11)$$

$$V_3 \equiv 3[m^2] - 2[m^3], \quad (2.12)$$

$$V_4 \equiv (4[m] - [m^4])/3, \quad (2.13)$$

$$V_5 \equiv (3[m] - 3[m^3])/3, \quad (2.14)$$

$$V_6 \equiv 2[m] - [m^2], \quad (2.15)$$

onde

$$[m^n] \equiv \ln \frac{\partial \langle m^n \rangle}{\partial T}. \quad (2.16)$$

Aqui é interessante notar que quando tomamos o logaritmo da equação (2.2), obtemos $\ln m = -\beta/\nu \ln L + \ln m'$, de maneira que tenhamos relações similares para as demais equações precedentes. Então com base nesse raciocínio, podemos obter o expoente ν e as equações descritas anteriormente através de uma equação compacta representada por

$$V_j \approx (1/\nu) \ln L + V'_j(tL^{1/\nu}), \quad (2.17)$$

para $j = 1, \dots, 6$, onde V'_j são contantes que independem do tamanho do sistema de modo que na temperatura crítica T_c ($t = 0$) as funções possam convergir para o seu valor na rede infinita. Com base nisso, podemos verificar que ao efetuarmos um ajuste linear do gráfico

$V_j \times L$, torna-se possível calcular o coeficiente angular da reta que corresponde a $1/\nu$. Calculado o expoente ν , podemos através dos picos do calor específico e da susceptibilidade estimar T_c , tal estimativa pode ser estabelecida através da relação

$$T_c(L) \approx T_c + a_q L^{-1/\nu}, \quad (2.18)$$

onde a_q representa uma constante[47, 52].

3 Simulações entrópicas

Para auxiliar no estudo e na investigação de modelos estatísticos, foram desenvolvidos métodos computacionais capazes de explorar os mais diversos e complexos modelos. Ocupando um papel de destaque, há o Método Monte Carlo (MC) que com o apoio de uma adequada técnica de amostragem se torna capaz de calcular as médias termodinâmicas de um sistema interagente levando em conta as flutuações estatísticas e seus respectivos efeitos[53].

Entre as técnicas de amostragem mais utilizadas em simulações de MC podemos citar o algoritmo de Metropolis que ao manter uma temperatura fixa é capaz de produzir uma distribuição canônica $P(E, T) = g(E)e^{-E/K_B T}$, no entanto apesar de suas enormes contribuições, esta técnica apresenta dificuldades em explorar os sistemas em regiões próximas às transições de fase e na obtenção de informações importantes tais como energia livre e entropia. Com o intuito de suprir essas dificuldades novas técnicas surgiram como o método desenvolvido por Ferrenberg e Swendsen[54], a amostragem entrópica de Lee[55], o método do “*broad histogram*”[56] e o método de Wang-Landau[57, 18], dando origem aos métodos de simulação entrópica, que opta por uma distribuição de probabilidade proporcional ao recíproco da densidade de estados microcanônica

$$p(E) \propto \frac{1}{g(E)}. \quad (3.1)$$

Aqui $g(E)$ indica a quantidade de estados com uma dada energia E de modo que a probabilidade de escolhermos uma configuração com esta energia corresponda a

$$g(E)p(E) = \frac{1}{K}. \quad (3.2)$$

Uma vez que K é uma constante, verificamos que a probabilidade de uma configuração com energia E ser selecionada é constante para todo o conjunto de energias. Esta abordagem modifica o procedimento do MC, pois, uma vez que este se baseia na escolha de um subconjunto de estados aleatórios de alguma distribuição de probabilidade p_μ , ao escolhermos M estados do total disponível, uma melhor estimativa de uma quantidade termodinâmica de interesse A é representada por

$$A_M = \frac{\sum_{i=1}^M p_{\mu_i}^{-1} A_{\mu_i} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^M p_{\mu_j}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_j}}}. \quad (3.3)$$

Onde A_M é uma estimativa de A de modo que ao aumentarmos o valor de M , a média passa a evoluir para valores cada vez mais próximos do real, e assim, ao tomarmos $M \rightarrow \infty$ obtemos $A_M = \langle A \rangle$. No entanto, ao efetuarmos a abordagem entrópica, a densidade de estados estimada elimina a dependência da média com a quantidade M de estados visitados

de modo que ela passe a depender agora da eficiência do algoritmo adotado para o cálculo da densidade de estados $g(E)$.

E no que diz respeito à eficiência de algoritmos aplicáveis a essa abordagem, um excelente candidato é o algoritmo de Wang-Landau, que se desenvolve por meio do acompanhamento de um histograma de energia que ao se mostrar nivelado apresenta uma boa estimativa da densidade de estados. Ao adotarmos esta metodologia, podemos estimar qualquer quantidade termodinâmica A por meio da expressão

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_E A_E g(E) e^{-\beta E}}{\sum_E g(E) e^{-\beta E}}. \quad (3.4)$$

Onde A_E é a média microcanônica acumulada durante a simulação. E uma vez que buscamos obter o número de configurações correspondentes a uma dada energia, é conveniente efetuarmos a simulação utilizando o logaritmo da densidade de estados $S(E)$, que é conhecida como entropia microcanônica e matematicamente representada por

$$S(E) = \ln g(E). \quad (3.5)$$

Diante do fato de desconhecermos a densidade de estados inicial do nosso sistema consideramos que $S(E)$ seja igual a zero, o que significa que todos os níveis de energia possuem um valor unitário. A partir disso, iniciamos nossa simulação escolhendo convenientemente a configuração de mais baixa energia de modo que a alteração em sua configuração seja feita modificando o sinal de um spin de maneira que o aceite desta mudança obedeça a condição de

$$P(E_\mu \rightarrow E_\nu) = \min(e^{S(E_\mu) - S(E_\nu)}, 1). \quad (3.6)$$

Assim, sempre que $g(E_\nu) \leq g(E_\mu)$ a nova configuração é aceita e teremos um nivelamento efetuado através de uma mudança no histograma e na densidade de estados, ou seja, $H(E_\nu) \rightarrow H(E_\nu) + 1$ e $S(E_\nu) \rightarrow S(E_\nu) + F_i$. Onde $F_i = \ln f_i$ e f_i é o fator modificador que inicialmente é identificado por $f_0 \equiv e = 2.71828\dots$ [57]. A cada condição de nivelamento atendida, f_i é atualizado com base no critério $f_{i+1} = \sqrt{f_i}$ e o histograma é zerado.

Uma vez que este procedimento é efetuado por diversos passos de MC, encerramos este ciclo quando $H(E) > r\langle H \rangle$ para todas as energias, a saber, $\langle H \rangle$ é a média obtida sobre todas as energias e o seu fator multiplicativo r é um parâmetro que geralmente depende do tamanho e da complexidade do sistema e do grau de precisão que se busca obter da densidade de estados correspondente. No entanto com o objetivo de obtermos uma boa estimativa de $g(E)$ em um tempo de simulação razoável optamos pela escolha de $r = 0.8$ [52].

Apesar do artigo original de Wang-Landau afirmar que a simulação deve ser finalizada quando $f \sim 1 + 10^{-8}$ [18], no artigo publicado por Caparica e Cunha-Neto [58], devemos atualizar $g(E)$ e $H(E)$ apenas depois de cada passo de MC. As médias microcanônicas devem ser acumuladas a partir de f_7 , pois nos níveis anteriores as configurações ainda

não correspondem ao máximo da entropia. Além disso, é recomendado que a simulação seja finalizada em um f_{final} correspondente à média canônica obtida durante a simulação. Esta última etapa merece um pouco mais da nossa atenção pois é neste estágio que avaliamos o comportamento do máximo do calor específico, obtido pela equação

$$C = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{K_B T^2}, \quad (3.7)$$

cujas médias energéticas são obtidas por intermédio da densidade de estados corrente. Então, ao alcançarmos f_7 calculamos a temperatura correspondente ao máximo valor do calor específico $T_c(0)$ e até obtermos o próximo f , calculamos o valor do parâmetro ε

$$\varepsilon = |T_c(t) - T_c(0)|. \quad (3.8)$$

Este cálculo é efetuado toda vez que a condição de nivelamento é satisfeita. Nesta expressão, $T_c(t)$ é a temperatura referente ao máximo do calor específico que é obtida pela $g(E)$ correspondente a cada f superior a f_7 . Se $\varepsilon < 10^{-4}$ para um mesmo f , encerramos a simulação salvando $g(E)$ e as médias microcanônicas calculadas. Caso contrário, o processo é reiniciado e a cada novo nível estabelecemos que $T_c(0)$ seja a nova temperatura do máximo do calor específico obtida com a última densidade de estados. Todas essas recomendações contribuem significativamente para uma maior eficiência do algoritmo reduzindo o tempo computacional a ponto de viabilizar sua aplicação ao estudo de sistemas cada vez mais complexos.

3.1 Densidade de estados conjunta

Uma outra rota de investigação a respeito de sistemas complexos pode ser tomada efetuando-se a construção de uma densidade de estados conjunta que além de depender da energia, também depende de outros parâmetros capazes de caracterizar o sistema a ponto de oferecer um ponto de vista mais nítido sobre o diagrama de fases e as possíveis transições que o sistema possa sofrer. Tal parâmetro pode ser por exemplo, responsável por averiguar o efeito de um campo magnético ou de uma constante anisotrópica sobre o sistema. Nessa perspectiva é construída uma densidade de estados bidimensional $g(E, M)$ e um histograma $H(E, M)$ também de mesma dimensão referente aos estados visitados. O procedimento para a estimativa de uma densidade de estados desse tipo é feita de maneira análoga ao procedimento anterior, onde agora a probabilidade de uma nova configuração ser aceita é representada por

$$P((E_\mu, M_\mu) \rightarrow (E_\nu, M_\nu)) = \min(e^{S(E_\mu, M_\mu) - S(E_\nu, M_\nu)}, 1). \quad (3.9)$$

Em correspondência a este critério, a densidade de estados e o histograma são atualizados a cada passo de Monte Carlo conforme $S(E_\nu, M_\nu) \rightarrow S(E_\nu, M_\nu) + F_i$ e $H(E_\nu, M_\nu) \rightarrow$

$H(E_\nu, M_\nu)+1$, onde a definição de F_i e a condição de nivelamento do histograma continuam os mesmos. Uma vez entendido esses conceitos, podemos adaptar a equação (3.4) a fim de calcularmos as propriedades termodinâmicas de interesse de maneira que o acúmulo das médias microcanônicas continuem sendo feitas a partir de f_7 . No entanto, em virtude do tempo computacional dispensado para esta tarefa, as simulações feitas neste trabalho por esta metodologia são direcionadas para tamanhos de redes menores e finalizadas em f_{15} .

4 Resultados

Neste capítulo, nós apresentamos alguns resultados a respeito das propriedades termodinâmicas e do comportamento crítico do nosso modelo. Foram calculadas quantidades como energia, magnetização, calor específico e susceptibilidade a fim de traçar uma rota até a compreensão dos efeitos da anisotropia rotacional na estabilidade da ordem ferromagnética e na formação de possíveis fases exóticas. Boa parte das simulações foram realizadas usando-se o cálculo da densidade de estados conjunta, como descrita no capítulo anterior. Apesar desse procedimento limitar os resultados a redes pequenas ($L^2 = 6^2, 12^2$ e 18^2 spins, no presente caso), ele é importante para que se observe o comportamento geral do sistema em função do conjunto de valores (J, J_a) . Assim, obtém-se a densidade de estados $g(E_1, E_2)$, onde

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

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

Esse procedimento permite compreender a dinâmica do sistema e o seu comportamento em regiões específicas sinalizadas no diagrama de fases a ponto de nos permitir efetuar o seu mapeamento dentro de um dado intervalo de valores atribuídos ao parâmetro fenomenológico J_a .

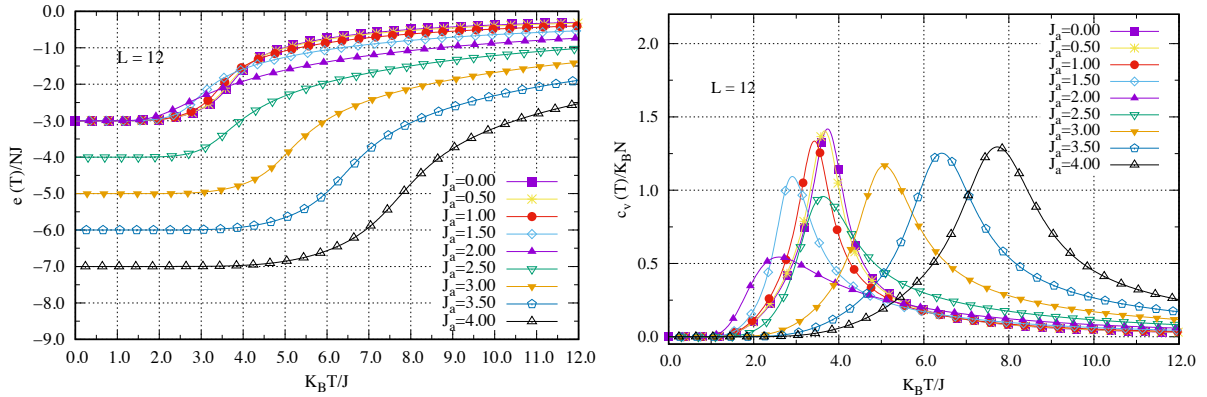
Na Figura 6 podemos acompanhar, respectivamente, o comportamento da energia média por spin ($E/L^2 = JE_1 + J_a E_2$) e do calor específico, ambos em função da temperatura para vários valores de J_a . A respeito da energia, nota-se que o valor correspondente ao estado fundamental para $0 \leq J_a < 2$ é equivalente a $-3J$, indicando que uma fase ferromagnética persiste no intervalo $0 \leq J_a < 2$. Mais especificamente, dada a energia de um único sitio,

$$E = -[2(J + J_a) + 4(J - J_a/2)] = -6J, \quad (4.3)$$

vemos a independência da energia com qualquer valor de $0 \leq J_a < 2$ e uma vez que a ligação de um spin com o seu spin vizinho é contada duas vezes, ao dividirmos esse resultado por dois, obtemos o valor da energia informado para o estado fundamental. Ainda no regime de baixas temperaturas, mas agora com valores de $J_a > 2$, percebe-se a presença de uma nova simetria (fase de *stripes*) do estado fundamental. Agora, a energia do estado fundamental depende do valor de J_a , essa nova fase é sinalizada pela Figura 7 cuja configuração de spin corresponde à Figura 8. Nesse caso, nota-se que a expressão correspondente à energia de sitio é

$$E = -[2(J + J_a) - 4(J - J_a/2)] = 2J - 4J_a. \quad (4.4)$$

Figura 6 – (Esquerda) Energia em função da temperatura para vários valores de J_a . (Direita) Calor específico em função da temperatura para vários valores de J_a .

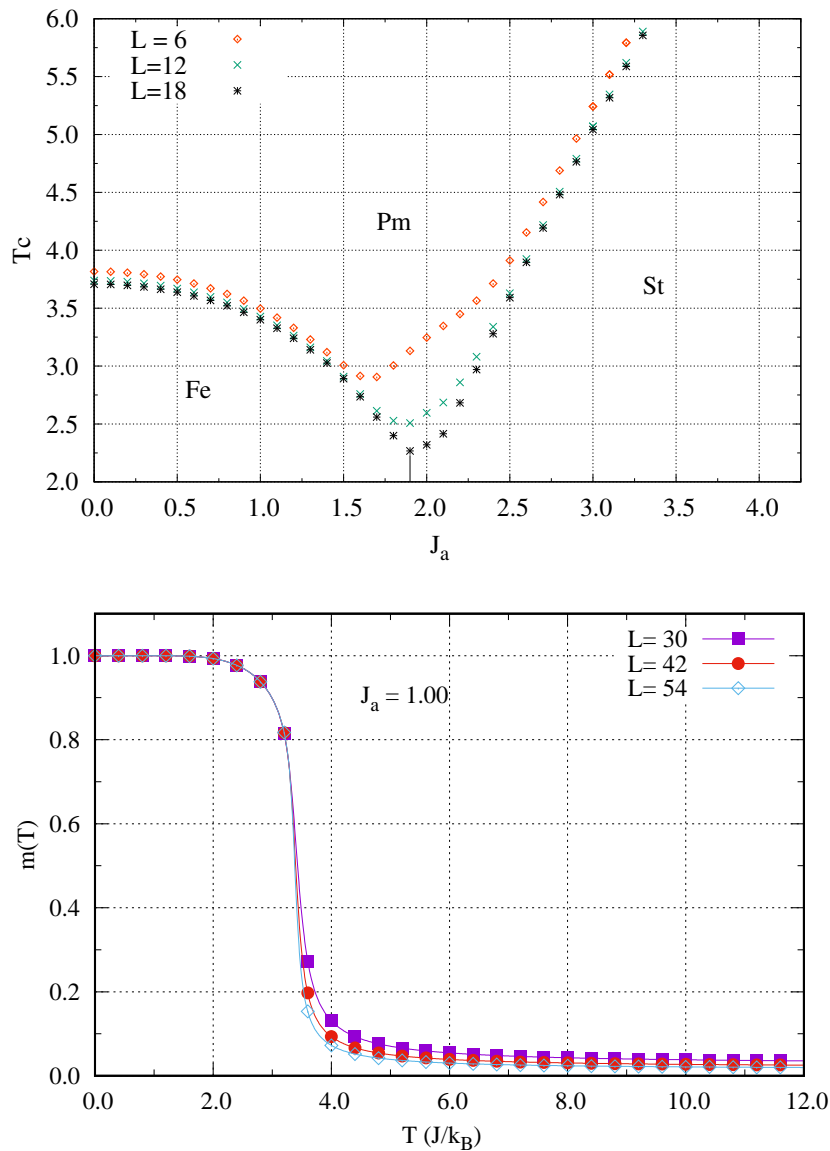


Fonte: os autores

Para o caso do calor específico, com $J_a = 0,00$ (que representa o modelo de Ising puro na rede triangular), temos um pico que corresponde à temperatura crítica de transição de fase ferro-paramagnética, cujo valor analítico é $k_B T_c/J \approx 3,65364$. Para valores maiores de J_a , visualizamos a ocorrência de uma temperatura de transição cada vez menor, pois as interações que não estão sobre o eixo principal são todas positivas uma vez que $J_a/2$ é menor que J . Em consequência disso, observamos que o pico do calor específico é transladado para à esquerda até um J_a crítico igual a 2,00, onde se verifica a existência de uma singularidade, pois para este valor contamos apenas com as interações sobre os eixos principais de cada spin escolhido na rede. A partir deste valor de J_a , o gráfico em questão reforça a existência de uma dinâmica oposta à etapa anterior, pois agora, as interações fora do eixo principal são todas negativas pelo fato de $J_a/2$ ser maior que J . Dessa forma, visualizamos o pico do calor específico transladado para direita atingindo valores cada vez maiores na medida que passamos de um J_a para outro, este fenômeno ocorre porque agora a partir do $J_a = 2,00$ o sistema sofre uma transição da fase de *stripes* para a fase paramagnética, onde àquela necessita de temperaturas cada vez maiores para romper seus ordenamentos magnéticos conforme visto pela Figura 8.

A figura 7 nos mostra um diagrama de fases que foi construído para redes de tamanho $L = 6$, $L = 12$ e $L = 18$ calculando-se a temperatura correspondente ao máximo valor do calor específico em função do nosso parâmetro fenomenológico de modo que $J_a = 0.00, 0.10, 0.20, \dots, 4.00$. Aqui notamos características clássicas de um diagrama de fases tais como as curvas que representam os limites de fases e um ponto multicrítico correspondente a $J_a = 2,0$ onde duas ou mais fases podem coexistir. Com a junção desses tamanhos de rede em uma única figura, podemos perceber que na medida que aumentamos o tamanho da rede, a curva de transição tende a se aproximar ainda mais do valor de J_a crítico.

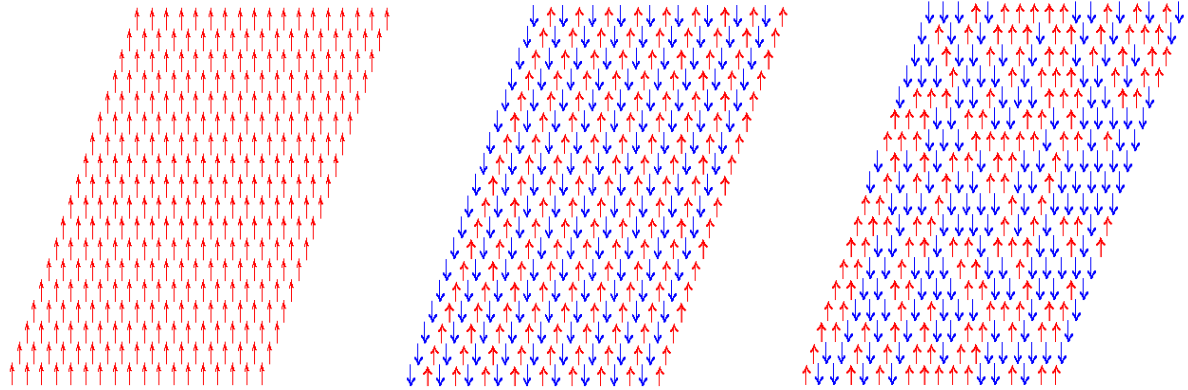
Figura 7 – (Figura superior) Representação do diagrama de fases do sistema para $J_a \geq 0$. (Figura inferior) Representação da Magnetização para vários tamanhos de rede com J_a fixo.



Fonte: os autores

Tal representação também tornou possível o destaque de três regiões que equivalem às respectivas fases que o sistema pode assumir para os valores de J_a . Na região Fe, que representa as configurações equivalentes à Figura 8 (à esquerda), temos a fase ferromagnética, que exibe como o sistema se apresenta inicialmente para baixas temperaturas até um valor de $J_a = 2,0$. Ainda para baixas temperaturas, mas agora com $J_a > 2,0$, nós entramos em uma nova fase representada pela região St cujas configurações são apresentadas na Figura 8 (centro), que é composta por listras (*stripes*) de spins que se alinham em um ordenamento *up* e *down*, alternadamente em linhas verticais ao longo da rede. No fim dessa análise, temos a região Pm cujas configurações estão de acordo com a Figura 8 (à direita), que mostra a evolução do sistema para a fase paramagnética para um regime

Figura 8 – (Esquerda) Configuração correspondente à fase ferromagnética para $J_a = 1, 0$. (Centro) Configuração correspondente à fase de *stripes* para $J_a = 3, 0$. (Direita) Configuração correspondente à fase paramagnética para $J_a = 3, 0$.



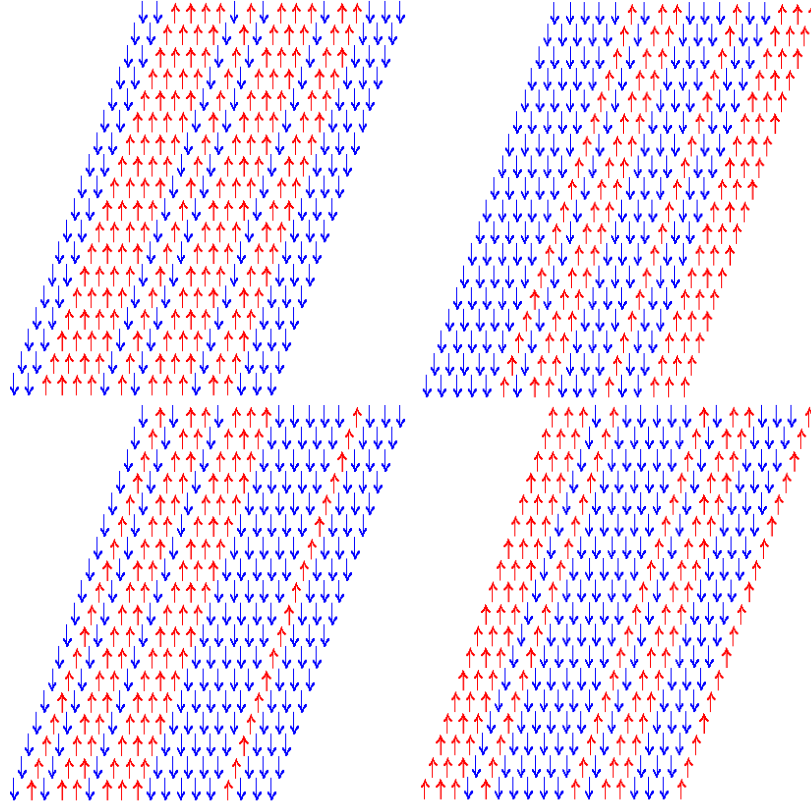
Fonte: os autores

de altas temperaturas. É importante ressaltar que apesar desta fase exibir um conjunto aparente de domínios magnéticos, ao observarmos a Figura 7, que foi construída para vários tamanhos de rede com J_a fixo, percebemos a magnetização tendendo a zero na medida que aumentamos o tamanho da rede. Este comportamento reforça a nossa hipótese a ponto de nos permitir afirmar que a região equivalente de fato corresponde à fase paramagnética.

A Figura 10 apresenta respectivamente a dinâmica da magnetização e da susceptibilidade do sistema para uma rede de tamanho $L = 12$ para vários valores de J_a . Aqui, visualiza-se que para valores de J_a menores que o seu valor crítico, a magnetização se inicia em 1,0 e vai a zero a partir da temperatura de transição associada a cada valor de J_a . Entre eles, àquele que sofre uma transição de fase em um intervalo de temperatura menor é o $J_a = 1, 5$ o que justifica seu pico abrupto entre os apresentados pela susceptibilidade. Observa-se também que para $J_a = 2, 0$ a magnetização já não se comporta de maneira similar as curvas anteriores pois esse valor é o limiar das duas fases. Uma vez que conseguimos expor as configurações à esquerda e à direita de $J_a = 2, 0$, ao avaliarmos também algumas possíveis configurações do sistema quando o parâmetro de controle assume exatamente esse valor nós constatamos a degenerescência do estado de energia mais baixa, uma vez que conseguimos observar um elevado número de configurações correspondentes ao estado de mínima energia para este valor de J_a . Para ilustrar esse fato, a figura 9 apresenta algumas dessas configurações associadas a esse conjunto responsável por exibir uma mistura das fases ferromagnética e *stripes*, essa característica já representa um bom argumento para sustentar a hipótese de que nessa região específica existe a coexistência das duas fases.

Para valores de J_a maiores que 2,0 os spins se reorganizam de uma forma diferente conforme visualizamos na Figura 8 (centro), que correspondem as configurações referentes à região St destacada na figura 7, onde se observa que a magnetização possui uma ínfima variação. Esta característica é o fator responsável pela ausência desses dados nos gráficos

Figura 9 – Representação de algumas configurações correspondentes à $J_a = 2,0$ ilustrando a degenerescência do ground state.



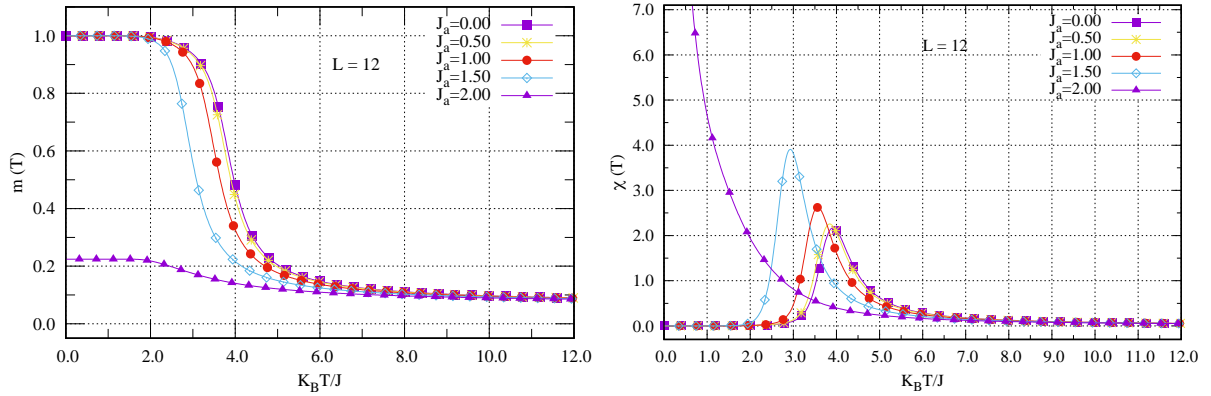
Fonte: os autores

apontados pela figura 10. Sendo assim, a magnetização deixa de ser um parâmetro de ordem adequado de modo que a definição de um novo parâmetro passe a ser necessária. Com o objetivo de atender a essa necessidade, nós propomos o seguinte parâmetro de ordem

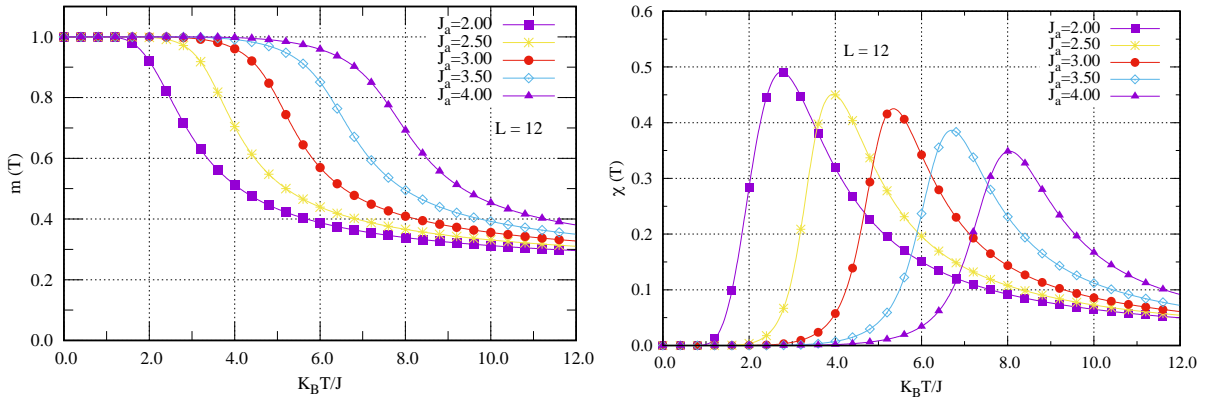
$$M = \sum_{i=1}^L \left| \sum_{j=1}^L \sigma_{ij} \right|, \quad (4.5)$$

onde M representa o cálculo agora adotado para a magnetização da rede de maneira que haja uma soma dos módulos de cada soma dos spins dispostos na vertical. Através dessa expressão nós conseguimos verificar os comportamentos típicos da magnetização e da susceptibilidade para essa faixa de valores de J_a conforme apresenta a figura 11. Onde podemos perceber o impacto que J_a oferece na dinâmica magnética do spin conforme aumentamos a sua intensidade.

Com o devido parâmetro de ordem estabelecido nós conseguimos também determinar os expoentes críticos associados a teoria de escala para $J_a = 1,0$ e $J_a = 4,0$ e avaliar o comportamento da susceptibilidade com esses valores fixos para vários tamanhos de redes. Essa última afirmação é ilustrada pela figura 12 que mostra respectivamente como o comportamento da susceptibilidade escala com o tamanho da rede para a fase ferromagnética e para a fase *stripes*, situadas em ambos os lados do valor de $J_a = 2.0$.

Figura 10 – Magnetização e susceptibilidade magnética em função da temperatura para vários valores de J_a .


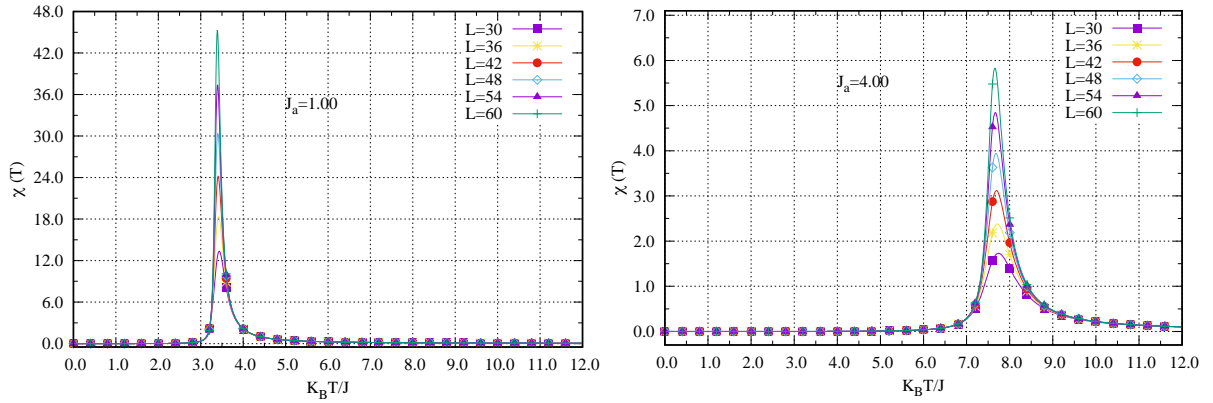
Fonte: os autores

 Figura 11 – Magnetização e susceptibilidade magnética em função da temperatura para valores de $J_a \geq 2$ com o novo parâmetro de ordem.


Fonte: os autores

Para a produção desses dados nós efetuamos a simulação de Wang-Landau sem a necessidade de uma densidade de estados conjunta de maneira que possamos explorar tamanhos de redes maiores em um tempo computacional razoável de maneira que também possamos obter um conjunto de dados interessantes para uma correta aplicação da teoria de escala de tamanho finito. Buscando atender a essa última etapa nós definimos um conjunto de tamanhos de redes tomando $L = 30, 36, 42, 48, 54$ e 60 com suas respectivas rodadas independentes com $N = 24, 24, 20, 20, 20$ e 16 que foram executadas para ambos os valores de J_a mencionados anteriormente. Após o término dessas operações nós construímos os resultados associados a esses parâmetros onde a figura 13 apresenta primeiramente o expoente crítico $\frac{1}{\nu}$ calculado através de um ajuste linear das seis funções representadas pelos V_j s que correspondem a um dado conjunto onde $\frac{1}{\nu}$ que efetivamente representam uma média aritmética dos coeficientes angulares associados às retas de ajuste da equação (2.17), dessa forma obtemos $\frac{1}{\nu} = 1.0373(10)$ de modo que ao escrevermos $\nu = 1/\frac{1}{\nu}$ temos

Figura 12 – Comportamento da susceptibilidade magnética para J_a fixo para vários tamanhos de rede.



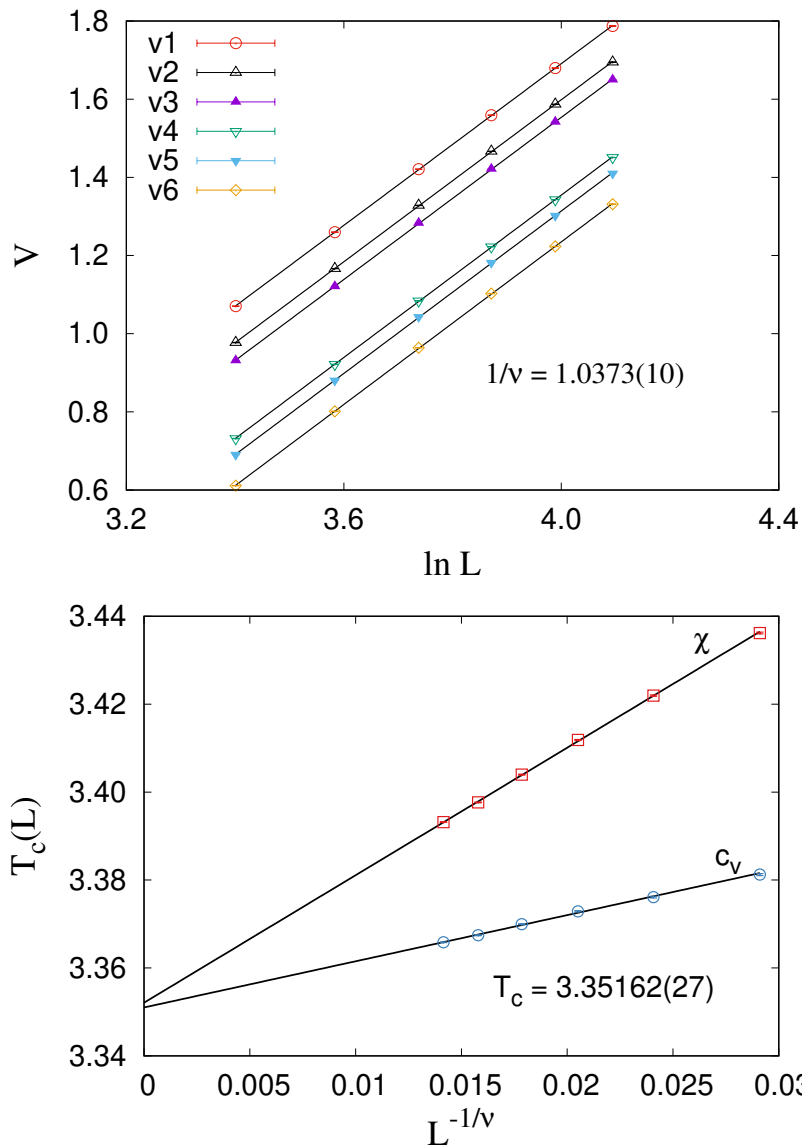
Fonte: os autores

que o erro ou o desvio padrão médio associado a esse expoente pode ser expresso por $\Delta\nu = \Delta(\frac{1}{\nu})/(\frac{1}{\nu})^2$, assim verifica-se que $\nu = 0.96404(93)$.

Ainda com respeito a essa figura, o segundo gráfico apresenta a temperatura crítica T_c conforme prediz a equação (2.18) de modo que a determinação de T_c é feita usando uma extrapolação de L ($L \rightarrow \infty$) de maneira que $L^{-1/\nu} = 0$. Esse ajuste linear é realizado utilizando os máximos do calor específico e da susceptibilidade para cada tamanho de rede e uma vez que o coeficiente angular da reta que melhor se ajusta aos dados corresponde a temperatura crítica, encontra-se $T_c = 3.35162(27)$ que representa a temperatura de transição da fase ferro para a fase paramagnética. Nos gráficos seguintes representados pela figura 14 temos a exposição dos dados relacionados a $\gamma/\nu = 1.7622(15)$ e $\beta/\nu = 0.1327(12)$, 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 $\Delta\beta = \Delta\nu(\frac{\beta}{\nu}) + \nu\Delta(\frac{\beta}{\nu})$ e assim podemos verificar que $\gamma = 1.6988(31)$ e que $\beta = 0.1279(13)$ uma vez que este último representa o coeficiente angular da reta correspondente ao último gráfico da figura 14.

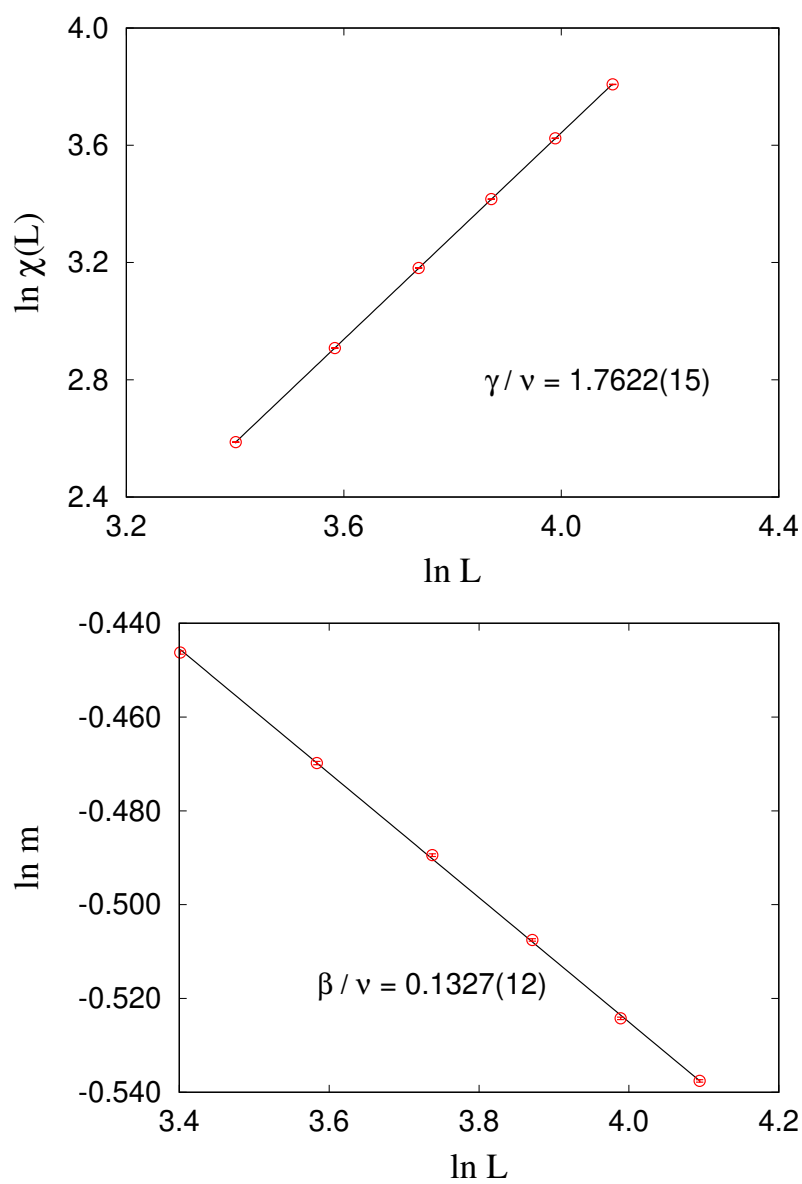
Nos próximos gráficos temos a exposição dos expoentes críticos relacionados a $J_a = 4,0$ que buscam apresentar uma visão da fase *stripes* cujas configurações nos obriga a fazer uso do novo parâmetro de ordem definido pela equação (4.5). Dessa forma, nós conseguimos obter $\frac{1}{\nu} = 1.0473(75)$ de modo que $\nu = 0.9548(68)$ e a temperatura de transição da fase *stripes* para a fase paramagnética corresponde a $T_c = 7.57792(23)$ conforme indicado pela figura 15. Ainda sobre esse valor de J_a , na sequência nós encontramos $\gamma/\nu = 1.7520(10)$ e $\beta/\nu = 0.1280(19)$ de maneira que $\gamma = 1.673(13)$ e $\beta = 0.1222(34)$. Em comparação com os expoentes associados ao modelo de Ising bidimensional, temos que esses dados nos fornecem um forte indicativo de que o modelo proposto pertence a mesma classe de universalidade do modelo de Ising de modo que as transições das respectivas fases iniciais do sistema para a fase paramagnética sejam classificadas como de segunda ordem.

Figura 13 – Gráfico dos expoentes críticos para $J_a = 1.0$.



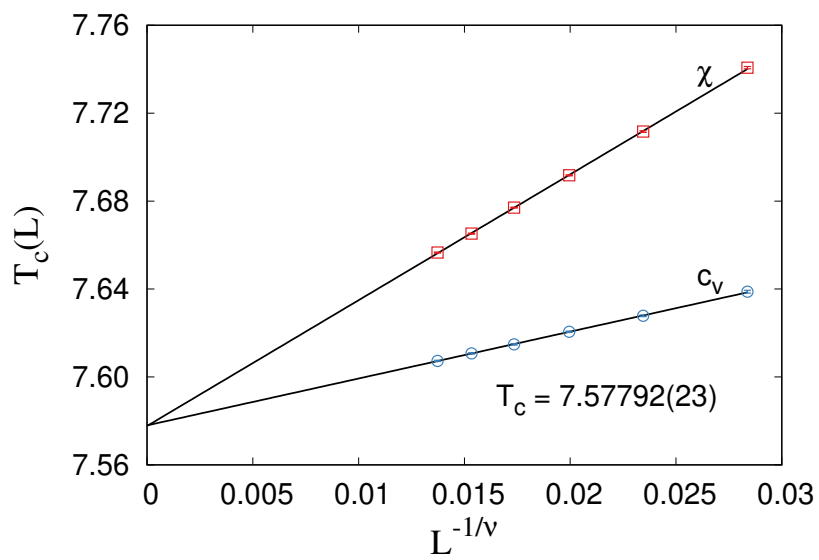
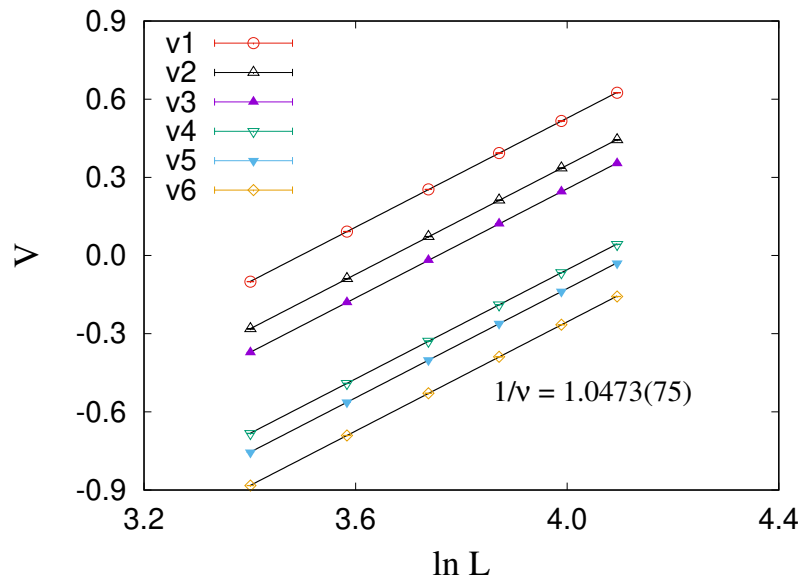
Fonte: os autores

Figura 14 – Gráfico dos expoentes críticos para $J_a = 1.0$.



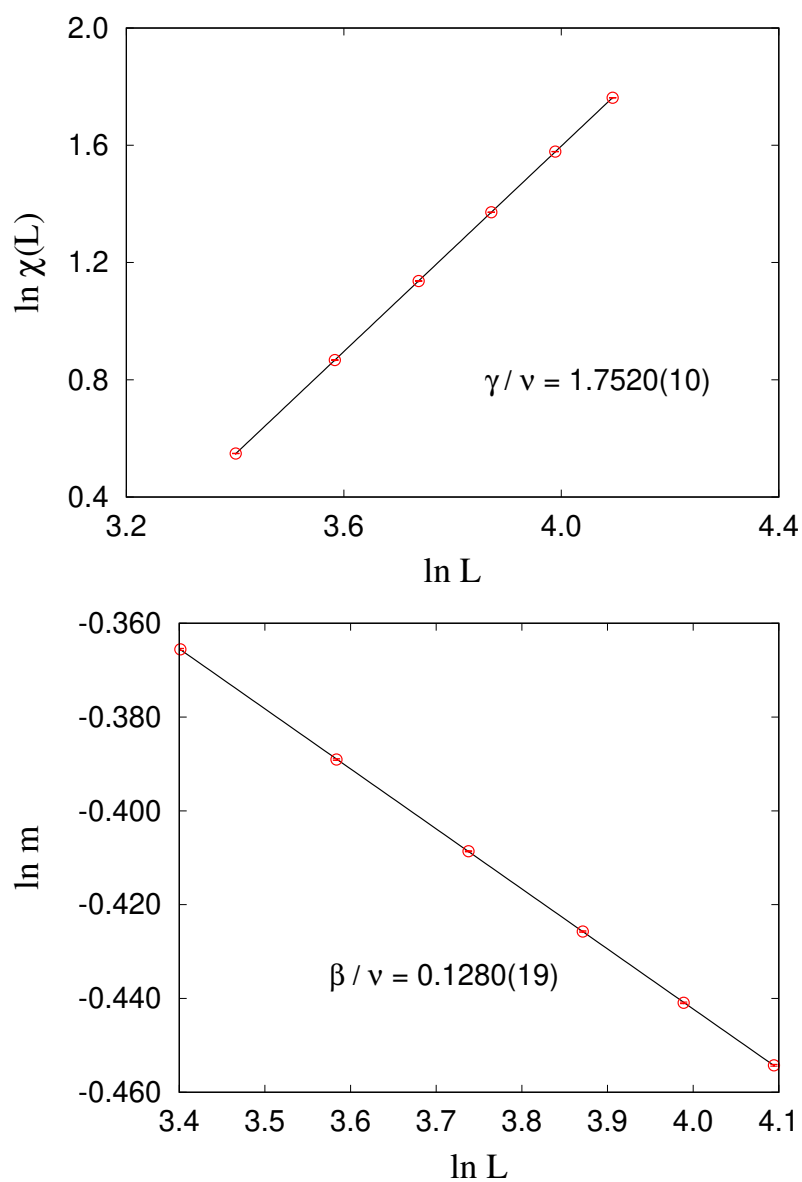
Fonte: os autores

Figura 15 – Gráfico dos expoentes críticos para $J_a = 4.0$.



Fonte: os autores

Figura 16 – Gráfico dos expoentes críticos para $J_a = 4, 0$.



Fonte: os autores

5 Considerações finais

Com base na metodologia empregada para o estudo do modelo proposto, nós conseguimos mostrar o comportamento do sistema por várias vias de investigação que abrangem características energéticas, magnéticas e configuracionais. Essas informações nos ajudaram a entender como o sistema se apresenta para cada faixa de valores atribuídos ao nosso parâmetro fenomenológico em conjunto com a sua evolução térmica a ponto de nos permitir mapear suas respectivas fases, seu ponto de singularidade que evidencia o comportamento frustrado do sistema e o grau de influência que a interação com o substrato tem sobre os spins. Esses dados não só tem potencial para nos convencer da relevância que a interação extra aqui proposta possui na análise do comportamento dos spins como também podem ser responsáveis pela proposição de uma nova forma de estudar sistemas magnéticos em geral.

Como este trabalho apresenta um modelo novo, existem ainda diversos aspectos a serem explorados, um deles diz respeito a possibilidade da caracterização da influência de valores negativos atribuídos à interação com o substrato. Além disso, a ideia apresentada neste trabalho também pode ser implementada para um novo tipo de spin como o spin de Heisenberg, essas e outras propostas ficam a cargo de abordagens futuras.

Referências

- 1 KLEIN, D. R. et al. Enhancement of interlayer exchange in an ultrathin two-dimensional magnet. *Nature Physics*, Nature Publishing Group, v. 15, n. 12, p. 1255–1260, 2019. Citado na página 13.
- 2 MAK, K. F.; SHAN, J.; RALPH, D. C. Probing and controlling magnetic states in 2d layered magnetic materials. *Nature Reviews Physics*, Nature Publishing Group, v. 1, n. 11, p. 646–661, 2019. Citado na página 13.
- 3 BRAMWELL, S. T.; GINGRAS, M. J. Spin ice state in frustrated magnetic pyrochlore materials. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 294, n. 5546, p. 1495–1501, 2001. Citado na página 13.
- 4 SHIMIZU, Y. et al. Spin liquid state in an organic mott insulator with a triangular lattice. *Physical review letters*, APS, v. 91, n. 10, p. 107001, 2003. Citado na página 13.
- 5 STAJIC, J. Frustrated magnetism. *Science*, v. 343, n. 6178, p. 1405, 2014. Citado na página 13.
- 6 KOJIMA, K. M. et al. Magnetic frustration in iridium spinel compound CuIr_2S_4 . *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 112, n. 8, p. 087203–, 02 2014. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.112.087203>>. Citado na página 13.
- 7 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. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 17.
- 8 DIEP, H. et al. *Frustrated spin systems*. [S.l.]: World Scientific, 2013. Citado 3 vezes nas páginas 13, 19 e 20.
- 9 ZHAO, H. et al. Quantum-critical phase from frustrated magnetism in a strongly correlated metal. *Nature Physics*, v. 15, n. 12, p. 1261–1266, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41567-019-0666-6>>. Citado na página 13.
- 10 ANDERSON, P. W. The resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity. *Science*, v. 235, n. 4793, p. 1196, 1987. Citado na página 13.
- 11 GLASBRENNER, J. et al. Effect of magnetic frustration on nematicity and superconductivity in iron chalcogenides. *Nature Physics*, Nature Publishing Group, v. 11, n. 11, p. 953–958, 2015. Citado na página 13.
- 12 LACROIX, C.; MENDELS, P.; MILA, F. *Introduction to frustrated magnetism: materials, experiments, theory*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2011. v. 164. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 18.
- 13 CHOO, K.; NEUPERT, T.; CARLEO, G. Two-dimensional frustrated J_1 – J_2 model studied with neural network quantum states. *Physical Review B*, American Physical Society, v. 100, n. 12, p. 125124–, 09 2019. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.100.125124>>. Citado na página 14.

- 14 DIEP, H. T. *Magnetic systems with competing interactions: frustrated spin systems*. [S.l.]: World Scientific, 1994. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 17.
- 15 SAPKOTA, A. et al. Effective one-dimensional coupling in the highly frustrated square-lattice itinerant magnet $\text{CaCo}_{2-y}\text{As}_2$. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 119, p. 147201, Oct 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.119.147201>>. Citado na página 14.
- 16 WANG, F.; VISHWANATH, A. Spin phonon induced collinear order and magnetization plateaus in triangular and kagome antiferromagnets: Applications to CuFeO_2 . *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 100, n. 7, p. 077201–, 02 2008. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.077201>>. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 20.
- 17 SONG, Y. et al. Strain-induced spin-nematic state and nematic susceptibility arising from 2×2 Fe clusters in $\text{KFe}_{0.8}\text{Ag}_{1.2}\text{Te}_2$. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 123, n. 24, p. 247205–, 12 2019. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.123.247205>>. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 21.
- 18 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. Citado 3 vezes nas páginas 14, 28 e 29.
- 19 GUIMARAES, A. P. *Magnetism and Magnetic Resonance in Solids*. Wiley-VCH, 1998. ISBN 0471197742. Disponível em: <<https://www.xarg.org/ref/a/0471197742/>>. Citado na página 16.
- 20 CULLITY, B. D.; GRAHAM, C. D. *Introduction to magnetic materials*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2011. Citado na página 16.
- 21 WANNIER, G. H. Antiferromagnetism. the triangular ising net. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 79, p. 357–364, Jul 1950. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.79.357>>. Citado na página 16.
- 22 MOESSNER, R. Geometrical frustration. *Physics Today*, v. 59, n. 2, p. 24, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 18.
- 23 NAKAMURA, H. et al. The partially disordered state of the frustrated face-centred cubic antiferromagnet. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 11, n. 4, p. 1095, 1999. Citado na página 18.
- 24 MITSUDA, S. et al. Partially disordered phase in frustrated triangular lattice antiferromagnet CuFeO_2 . *Journal of the Physical Society of Japan*, The Physical Society of Japan, v. 67, n. 12, p. 4026–4029, 1998. Citado na página 18.
- 25 JONASON, K.; MATTSSON, J.; NORDBLAD, P. Chaos in the ferromagnetic phase of a reentrant ferromagnet. *Physical review letters*, APS, v. 77, n. 12, p. 2562, 1996. Citado na página 18.
- 26 MILIN, A. N.; DENIZ, A. A. Reentrant phase transitions and non-equilibrium dynamics in membraneless organelles. *Biochemistry*, ACS Publications, v. 57, n. 17, p. 2470–2477, 2018. Citado na página 18.

- 27 ZANGENEH, M. K. et al. Microscopic origin of black hole reentrant phase transitions. *Physical Review D*, APS, v. 97, n. 8, p. 084054, 2018. Citado na página 18.
- 28 THOMAS, C. K.; KATZGRABER, H. G. Simplest model to study reentrance in physical systems. *Physical Review E*, APS, v. 84, n. 4, p. 040101, 2011. Citado na página 18.
- 29 ANDERSON, P. W. Resonating valence bonds: A new kind of insulator? *Materials Research Bulletin*, Elsevier, v. 8, n. 2, p. 153–160, 1973. Citado na página 18.
- 30 RAMIREZ, A. P. et al. Zero-point entropy in ‘spin ice’. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 399, n. 6734, p. 333, 1999. Citado na página 18.
- 31 ESSIN, A. M.; HERMELE, M. Classifying fractionalization: Symmetry classification of gapped \mathbb{Z}_2 spin liquids in two dimensions. *Physical Review B*, American Physical Society, v. 87, n. 10, p. 104406–, 03 2013. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.104406>>. Citado na página 19.
- 32 SINGH, R. et al. Symmetry breaking in the collinear phase of the j 1- j 2 heisenberg model. *Physical review letters*, APS, v. 91, n. 1, p. 017201, 2003. Citado na página 19.
- 33 GUERRERO, A. I.; STARIOLO, D. A.; ALMARZA, N. Nematic phase in the J_1 – J_2 square-lattice ising model in an external field. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 91, n. 5, p. 052123–, 05 2015. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.91.052123>>. Citado na página 19.
- 34 AZARIA, P.; DIEP, H.; GIACOMINI, H. Coexistence of order and disorder and reentrance in an exactly solvable model. *Physical review letters*, APS, v. 59, n. 15, p. 1629, 1987. Citado na página 20.
- 35 DIEP, H. T. Phase transition in frustrated magnetic thin film—physics at phase boundaries. *Entropy*, v. 21, n. 2, p. 175, 2019. Citado na página 20.
- 36 FIL, D. V. On the role of electron-phonon interaction in the resistance anisotropy of two-dimensional electrons in gaas heterostructures. IOP Publishing, v. 13, n. 50, p. 11633–11639, 2001. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/13/50/322>>. Citado na página 21.
- 37 SHERMAN, E. Y. Angular pinning and domain structure of a two-dimensional wigner crystal in a iii-v semiconductor. *Physical Review B*, APS, v. 52, n. 3, p. 1512, 1995. Citado na página 21.
- 38 POWELL, R. C. *Symmetry, group theory, and the physical properties of crystals*. [S.l.]: Springer, 2010. v. 824. Citado na página 21.
- 39 DASILVA, C. J. et al. Two-dimensional coulomb solid with interaction anisotropy. *Physical Review B*, APS, v. 81, n. 15, p. 153307, 2010. Citado na página 21.
- 40 EMERY, V.; KIVELSON, S.; TRANQUADA, J. Stripe phases in high-temperature superconductors. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, National Acad Sciences, v. 96, n. 16, p. 8814–8817, 1999. Citado na página 22.
- 41 MALESCIO, G.; PELLICANE, G. Stripe phases from isotropic repulsive interactions. *Nature materials*, Nature Publishing Group, v. 2, n. 2, p. 97, 2003. Citado na página 22.

- 42 NISHIMORI, H.; ORTIZ, G. *Elements of phase transitions and critical phenomena*. [S.l.]: OUP Oxford, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 25.
- 43 GITTERMAN, M.; HALPERN, V. H. *Phase transitions: A brief account with modern applications*. [S.l.]: World Scientific Publishing Company, 2004. Citado na página 23.
- 44 HERBUT, I. *A modern approach to critical phenomena*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2007. Citado na página 23.
- 45 STANLEY, H. E. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. First edition. Oxford University Press, 1971. (Monographs on Physics). ISBN 0198512570,9780198512578. Disponível em: <<http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=BF04EFD59645091B5B787A9A45A42724>>. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 25.
- 46 FISHER, M. E.; BARBER, M. N. Scaling theory for finite-size effects in the critical region. *Physical Review Letters*, APS, v. 28, n. 23, p. 1516, 1972. Citado na página 25.
- 47 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. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 27.
- 48 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. Citado na página 25.
- 49 HUANG, K. *Statistical mechanics*. Wiley, 1987. ISBN 9780471815181. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=M8PvAAAAMAAJ>>. Citado na página 26.
- 50 BINNEY, J. J. et al. *The theory of critical phenomena: an introduction to the renormalization group*. [S.l.]: Oxford University Press, 1992. Citado na página 26.
- 51 PRIVMAN, V. *Finite size scaling and numerical simulation of statistical systems*. [S.l.]: World Scientific Singapore, 1990. Citado na página 26.
- 52 FERREIRA, L. d. S. et al. *Simulações entrópicas do modelo de Ashkin-Teller*. Dissertação (Mestrado), 2016. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 29.
- 53 LANDAU, D. P. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2009. ISBN 0521768489. Disponível em: <<https://www.xarg.org/ref/a/0521768489/>>. Citado na página 28.
- 54 FERRENBERG, A. M.; SWENDSEN, R. H. New monte carlo technique for studying phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 61, p. 2635–2638, Dec 1988. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.61.2635>>. Citado na página 28.
- 55 LEE, J. New monte carlo algorithm: Entropic sampling. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 71, p. 211–214, Jul 1993. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.71.211>>. Citado na página 28.
- 56 PENNA, T.; HERRMANN, H. Broad histogram monte carlo. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, Springer, v. 1, n. 2, p. 205–208, 1998. Citado na página 28.

57 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. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 29.

58 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. Citado na página 29.