

## EFEITOS DE INTERAÇÕES ENTRE PLANOS NA REDE QUADRADA FRUSTRADA

PABLO FERREIRA GODOY<sup>1</sup>; MATEUS SCHMIDT<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Universidade Federal de Santa Maria – godoypablof@gmail.com

<sup>2</sup>Universidade Federal de Santa Maria – mateusing85@gmail.com

### 1. INTRODUÇÃO

A compreensão do comportamento de materiais magnéticos é relevante tanto pelas aplicações destes materiais em diversas tecnologias quanto pela riqueza fenomenológica observada nestes sistemas. Com isso, diversos estudos são realizados procurando descrever as propriedades magnéticas dos materiais. Por exemplo, muitos esforços realizados no último século objetivaram o entendimento do efeito das flutuações térmicas sobre as propriedades termodinâmicas de materiais magnéticos. Do ponto de vista teórico, o estudo de modelos de spins (momentos magnéticos intrínsecos dos elétrons) interagentes têm permitido avanços significativos na nossa compreensão destes materiais, revelando diversos fenômenos interessantes.

Um modelo que apresenta uma fenomenologia especialmente interessante é o modelo de Ising  $J_1-J_2$  na rede quadrada. Neste modelo é possível introduzir frustração - que ocorre quando não há um estado do sistema capaz de satisfazer todas as interações simultaneamente - ao considerar uma interação entre segundos vizinhos ( $J_2$ ) antiferromagnética. Neste caso, a interação  $J_2$  compete com a interação entre primeiros vizinhos ( $J_1$ ) que pode ser ferromagnética ou antiferromagnética. Esta competição dá origem a diversos fenômenos coletivos como transições de primeira e segunda ordem, bem como um ponto tricrítico, os quais têm sido objeto de estudo nas últimas décadas. Em particular, resultados recentes de simulações de Monte Carlo mostram que o ponto tricrítico para este modelo ocorre quando  $|J_2/J_1|=0.67$  (JIN et al., 2012).

A possibilidade de realização experimental deste modelo demanda o entendimento acerca de diferentes efeitos que podem ser encontrados em materiais magnéticos. O fato de que materiais magnéticos são, em geral, tridimensionais, implica que interações entre planos podem ser relevantes. Contudo, poucos estudos tem focado nos efeitos de interações entre planos no modelo  $J_1-J_2$ . Portanto, no presente trabalho investigamos os efeitos destas interações em um modelo com planos de redes quadradas, incluindo interações entre primeiros e segundos vizinhos dentro dos planos. A seguir, discutimos a metodologia utilizada neste estudo.

### 2. METODOLOGIA

No presente trabalho, estudaremos o modelo  $J_1-J_2$ , descrito pelo seguinte hamiltoniano

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j, \quad (1)$$

onde  $J_{ij}$  inclui interações entre primeiros ( $J_1$ ) e segundos ( $J_2$ ) vizinhos nos planos e acoplamentos entre planos ( $J_1^l$ ).  $S_i$  é a variável de spin de Ising no sítio  $i$ , que pode assumir estados  $\pm 1$ .

Para estudar este modelo, adotaremos um formalismo de campo médio com clusters (Kellermann et al., 2019). Nesta abordagem, o sistema é dividido em clusters de tamanho finito e as interações dentro dos clusters são tratadas exatamente. As interações entre clusters são aproximadas através de campos médios de forma que

$$S_i S_j = S_i \langle S_j \rangle + \langle S_i \rangle S_j - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle, \quad (2)$$

onde

$$\langle S_i \rangle = \frac{\sum_S S_i e^{-H/T}}{\sum_S e^{-H/T}} \quad (3)$$

é o valor médio do spin no sítio  $i$  e  $T$  é a temperatura. Os valores médios na equação (2) são os campos médios, que devem ser calculados auto-consistentemente. Neste trabalho, adotaremos uma abordagem de campo médio com clusters de quatro sítios, em um formato de plaqueta quadrada, de forma a captar a simetria da rede quadrada. Após encontrar os campos médios associados aos 4 sítios, é possível obter todos os observáveis termodinâmicos de interesse. Para o nosso problema, o cálculo da energia livre

$$f = -T \ln \left( \sum_S e^{-H/T} \right) \quad (4)$$

é especialmente relevante para a localização de transições de primeira ordem. As fases magnéticas foram associadas à parâmetros de ordem, os quais também permitiram a localização de transições de segunda ordem. Em particular, a fase ferromagnética é caracterizada pela magnetização não-nula, ou seja,

$$M = \sum_i m_i \neq 0 \quad \text{onde} \quad m_i = \langle S_i \rangle.$$

Outra fase presente no modelo considerado é a ordem superantiferromagnética que é caracterizada pelo anti-alinhamento de segundos vizinhos. Esta fase também pode ser identificada através dos parâmetros  $m_i$ , porém  $M=0$ . Além disso, um estado paramagnético também pode ser obtido em temperaturas mais elevadas, o qual é caracterizado por  $m_i=0$ .

### 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Figura 1 exhibe os resultados obtidos para o modelo J1-J2 de Ising. Quando interações entre planos não são consideradas, reproduzimos o obtido no caso bidimensional (Kellermann et al., 2019). Isso significa que o modelo exhibe transições de primeira ordem entre as fases paramagnética (PM) e superantiferromagnética (SAF) para  $J_2/J_1 \approx -0.5$ . Além disso, um ponto tricrítico é observado no ponto em que a natureza das transições PM-SAF passa de primeira para segunda ordem.

Quando interações entre planos são consideradas, apenas transições contínuas são observadas entre as fases PM e SAF. Isso significa que o ponto tricrítico é suprimido do diagrama de fases devido às interações entre planos. Nossos resultados sugerem que tentativas de realizar experimentalmente o modelo  $J_1-J_2$  devem levar em consideração a presença de interações entre planos, uma vez que estas podem ser extremamente relevantes para a natureza das transições de fase.

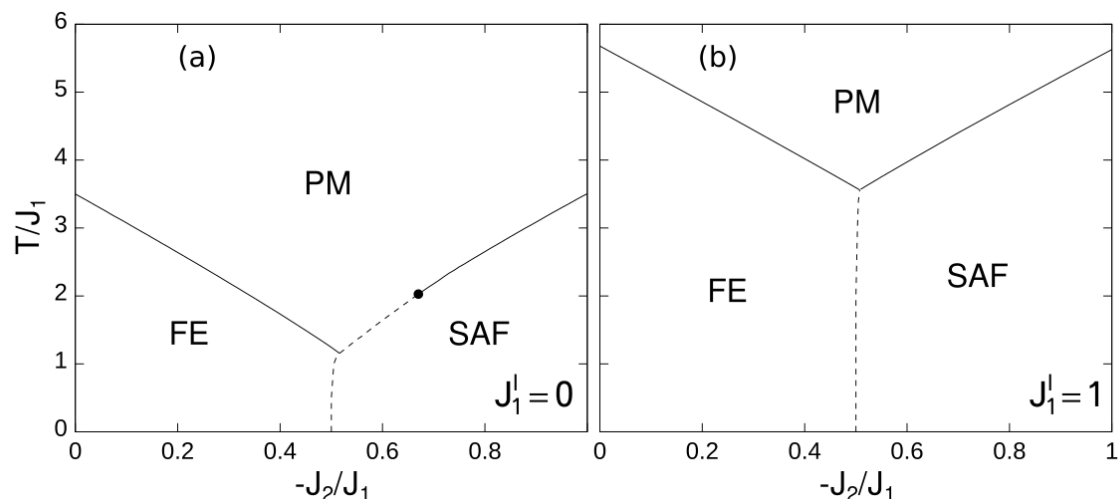


Figura 1 : Diagramas de fase para o modelo  $J_1-J_2$  para os casos sem interação entre planos – painel (a) – e com interações entre planos  $J_1^I=1$  – painel (b). Linhas tracejadas indicam transições de primeira ordem e linhas contínuas indicam transições de segunda ordem. O ponto tricrítico é identificado pelo círculo.

#### 4. CONCLUSÕES

Neste trabalho, investigamos o efeito de interações ferromagnéticas entre planos em um modelo com interações competitivas ( $J_1$  e  $J_2$ ) dentro dos planos. Nossos resultados indicam que as interações entre planos suprimem a tricriticalidade observada no limite bidimensional do modelo. Com isso, tentativas de realizar experimentalmente a riqueza fenomenológica do modelo  $J_1-J_2$  na rede quadrada deverão buscar a diminuição de interações entre planos. Isso pode ser atingido, em geral, ao produzir materiais em que planos de redes quadradas frustradas estão distantes uns dos outros. Como perspectiva futura, pretendemos considerar diferentes valores da interação entre planos, com o objetivo de avaliar se há uma razão  $0 < J_1^I/J_1 < 1$  que ainda permita obter fenômenos críticos análogos aos do caso bidimensional deste modelo.

#### 5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- JIN, S.; SEN, A.; SANDVIK, A. W. Ashkin-Teller Criticality and Pseudo-First-Order Behavior in a Frustrated Ising Model on the Square Lattice. **Physical Review Letters**, v. 108, p. 045702, 2012.
- KELLERMANN, N.; SCHMIDT, M.; ZIMMER, F. M. Quantum Ising model on the frustrated square lattice. **Physical Review E**, v. 99, p. 012134, 2019.