

MODELO J_1-J_2 FRUSTRADO COM CAMPOS UNIFORME E ALEATÓRIO

EZEQUIEL LOPES SOARES¹; MATHEUS JATKOSKE LAZO¹; CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR²; FÁBIO MALLMANN ZIMMER³

¹Universidade Federal do Rio Grande – elsoares@protonmail.com

²Universidade Federal de Pelotas – carlosavjr@gmail.com

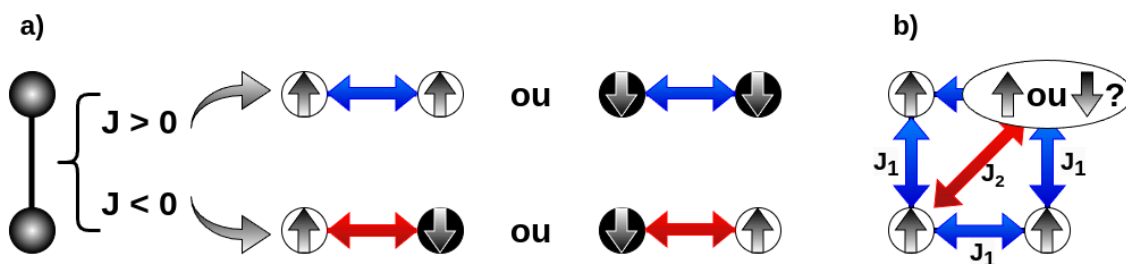
³Universidade Federal do Mato Grosso do Sul – fabiozimmer@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

A pesquisa de fenômenos relacionados às fases magnéticas é crucial na física da matéria condensada e em áreas tecnológicas. O estudo das ordens magnéticas com frustração e desordem, mediado pelo modelo de Ising de campo aleatório (RFIM*), atrai especial atenção, sobretudo em materiais magnéticos (DUIJN et al., 2004). Assim, modelos teóricos e simulações computacionais desempenham um papel central na compreensão desses fenômenos.

Um modelo conveniente para investigar efeitos de frustração e desordem é o modelo J_1-J_2 frustrado, na presença de campos aleatórios em uma rede quadrada (ABALMASOV; VUGMEISTER, 2023). Nesse modelo, ilustrado na Figura 1, cada sítio na rede representa um spin que pode assumir estados ± 1 (\uparrow ou \downarrow). Os spins interagem entre si com uma energia de interação J , sendo que $J > 0$ representa uma interação paralela e $J < 0$ uma antiparalela. J_1 e J_2 representam interações entre sítios primeiros e segundos vizinhos, respectivamente.

Figura 1: **a)** Esquema que ilustra os tipos de energia de interação, J , entre os sítios, em que cada um destes representa um estado de spin, \uparrow ou \downarrow . **b)** Ilustração de uma rede de sítios magnéticos frustrados.



Fonte: os autores.

Uma característica interessante do modelo, ilustrada na Figura 1-b, é a frustração por interação, que ocorre com $J_2 < 0$ (antiparalelo, $\uparrow\downarrow$ ou $\downarrow\uparrow$) em redes com $J_1 > 0$ (paralelas, $\uparrow\uparrow$ ou $\downarrow\downarrow$). Nesse caso, não há estado de spin que satisfaça todas as interações, resultando em alta degeneração e ausência de um estado de menor energia definido. A desordem pode ser introduzida via campos aleatórios locais RFIM, análogo à diluição de impurezas em ligas metálicas (AHRENS et al., 2013). Nesse contexto, este trabalho tem como objetivo analisar o comportamento de sistemas magneticamente frustrados na presença de RFIM e campo uniforme externo.

* Random Field Ising Model.

2. METODOLOGIA

A fim de realizar a modelagem computacional, uma rede infinita foi dividida em clusters (sub redes). A rede intra-cluster foi resolvida de forma exata, enquanto as sub redes inter-cluster foram tratadas com uma aproximação baseada em campo médio. Foi elaborado um código em FORTRAN, em que a partir do modelo, pudessem ser obtidos parâmetros de ordem, pontos críticos de transição de fase, além de determinar grandezas termodinâmicas relevantes. A escolha da linguagem FORTRAN foi motivada pela sua eficácia computacional e adequação para lidar com sucessivos cálculos em *loop*.

Aplicando o algoritmo numérico descrito através de cálculos computacionais em um cluster 2×2 , ou seja $N = 4$ sítios no modelo frustrado $J_1 - J_2$, sem campos, com campos locais aleatórios e com campo externo uniforme, analisamos os parâmetros de ordem dos sistemas e as energias livres nos pontos de transição de fase. Especificamente, os resultados apresentados a seguir foram obtidos com J_1 mantido constante ($J_1 = 1$), de forma que: $-1 \leq J_1/|J_2| \leq 0$. A constante de Boltzmann é considerada adimensionalmente e fixada em $k_b = 1$. Além disso, cada sítio da rede pode assumir duas configurações de spins de Ising possíveis, $S = \pm 1$.

O Hamiltoniano do modelo é dado pela seguinte expressão:

$$H = J \sum_{(ij)_1}^N S_i S_j + J \sum_{(ij)_2}^N \left(S_i m_j - \frac{m_i m_j}{2} \right) - \sum_{i=1}^N (h_u + h_i) S_i, \quad (1)$$

onde os índices (i, j) referem-se ao par de sítios no cluster. $J = J_1$ ou J_2 é a energia de interação de um par de sítios ij , h_u é o campo uniforme externo e h_i refere-se ao campo aleatório, cujos valores, neste trabalho, são determinados por uma distribuição bimodal, dada por:

$$P(h_i) = \frac{1}{2} [\delta(h_i - h_0) + \delta(h_i + h_0)], \quad (2)$$

onde $P(h_i)$ é a função distribuição de probabilidade da variável aleatória h_i de um dado campo magnético aleatório i . O espaço amostral da variável aleatória é $\{h\} = \{-h_0, +h_0\}$.

O grau de ordenamento em uma rede de spins de Ising — isto é, o nível de alinhamento ou anti-alinhamento dos spins — será inferido a partir da magnetização do sistema. Dessa forma, a magnetização surge como o parâmetro de ordem, sendo definida por

$$m = \frac{1}{N} \text{Tr} \left[\left(\sum_i^N S_i \right) \frac{e^{-\beta H}}{Z} \right], \quad (3)$$

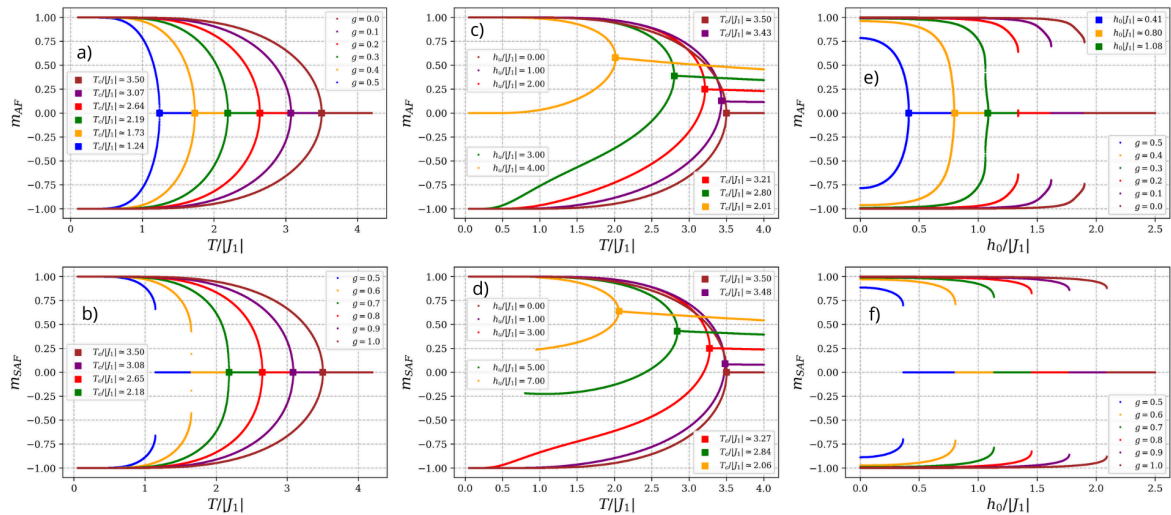
em que $N = 4$ é o número de sítios na rede, $\beta = 1/T$ é o inverso da temperatura, e Z é a função partição total.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Utilizando a modelagem numérica descrita na seção 2, analisamos os parâmetros de ordem e pontos de transição de fase para as ordens magnéticas: paramagnética (PM), antiferromagnética (AF), super antiferromagnética (SAF) e magnetização induzida pelo campo uniforme externo (MI). Cada resultado considera três fatores: frustração ($J_2/|J_1|$), campo aleatório local ($h_0/|J_1|$), campo uniforme externo ($h_u/|J_1|$) ou suas combinações.

Primeiramente, analisamos o modelo com campos nulos ($h_0/|J_1| = h_u/|J_1| = 0$), comparando os resultados com a referência JIN et al. (2013). O parâmetro de ordem foi inferido a partir da magnetização de um sistema AF em função da temperatura, $T/|J_1|$, como mostrado na Figura 2-a,b. Observamos que, com o aumento de $T/|J_1|$, a magnetização diminui até se anular, definindo a transição para a fase PM. À medida que $J_2/|J_1| \rightarrow 0,5$ (frustração máxima), $T_c/|J_1|$ diminui. Além disso, 2-b indica transições SAF/PM de primeira ordem para $J_2/|J_1| = 0,5$ e $0,6$. O campo uniforme reduz $T_c/|J_1|$ e induz magnetização residual ($m \neq 0$), como visto em 2-c,d. O aumento dos campos aleatórios locais, mostrado em 2-e,f, reduz $T_c/|J_1|$ e favorece transições de primeira ordem.

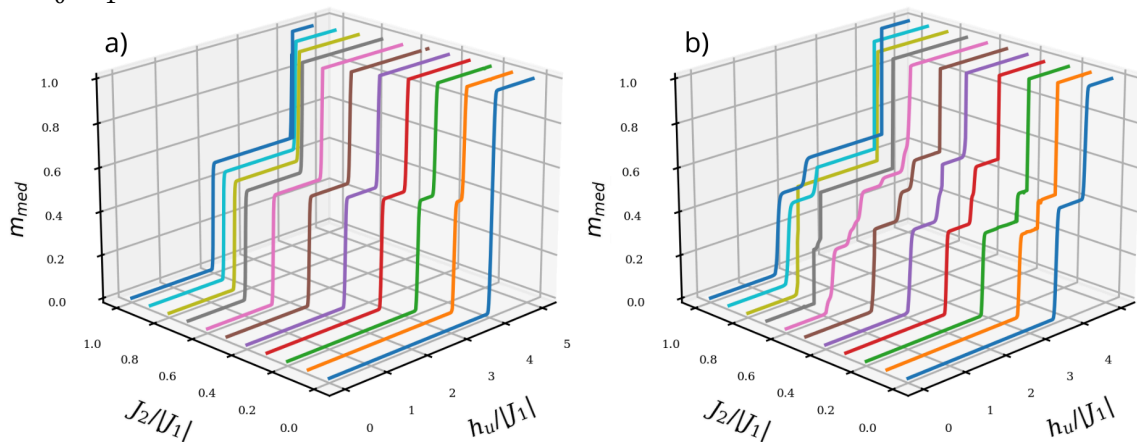
Figura 2: Gráficos dos parâmetros de ordem sob influência das variáveis: frustração, campos aleatórios locais e campo uniforme externo.



Fonte: os autores.

Em baixas temperaturas ($T/|J_1| < 0,05$), observam-se platôs nas curvas de magnetização em função de $h_u/|J_1|$, ajustando-se a frustração. Isso indica que $h_0/|J_1|$ pode influenciar na formação de platôs adicionais, como mostrado na Figura 3. O sistema frustrado apresenta um platô central em $1/2$ da magnetização de saturação. Com o aumento de $h_0/|J_1|$, surgem novos platôs em $3/8$ e $5/8$ da magnetização de saturação, sugerindo um padrão fracionário específico.

Figura 3: Gráfico dos Parâmetros de ordem com $T/|J_1| = 0,05$. a) $h_0/|J_1| = 0$; e b) $h_0/|J_1| = 0,35$.



Fonte: os autores.

4. CONCLUSÕES

Em conclusão, este estudo elucidou comportamentos intrigantes de fases magnéticas em sistemas complexos, com foco na influência da frustração de interações, bem como de campos aleatórios e uniformes no modelo J_1-J_2 em uma rede quadrada. A abordagem metodológica, combinando o RFIM e a aproximação de campo médio, permitiu investigar como grandezas físicas termodinâmicas e observáveis macroscópicos de sistemas magnéticos se comportam quando associados à frustração e desordem. Além disso, os resultados indicam uma relação entre o surgimento de platôs de magnetização e campos aleatórios locais, abrindo caminho para futuras investigações. No futuro, o escopo deste trabalho pode ser ampliado para explorar mais a fundo os efeitos combinados de frustração e campos aleatórios.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABALMASOV, V. A.; VUGMEISTER, B. E. Metastable states in the j_1 - j_2 Ising model. **Physical Review E**, American Physical Society (APS), v. 107, n. 3, mar 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.107.034124>>.

AHRENS, B. et al. Diluted antiferromagnets in a field seem to be in a different universality class than the random-field Ising model. **Physical Review B**, American Physical Society (APS), v. 88, n. 17, nov. 2013. ISSN 1550-235X. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.88.174408>>.

DUIJN, J. van et al. Random fields and the partially paramagnetic state of $\text{CsCo}_{0.83}\text{Mg}_{0.17}\text{Br}_3$: Critical scattering study. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 92, p. 077202, Feb 2004. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.92.077202>>.

JIN, S. et al. Phase transitions in the frustrated Ising model on the square lattice. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 87, p. 144406, Apr 2013. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.144406>>.