

## CÁLCULO COMPUTACIONAL DA MAGNETIZAÇÃO EM REDES TRIANGULARES FERROMAGNÉTICA E ANTIFERROMAGNÉTICA

**CAROLINA GARCIA CARDOSO<sup>1</sup>; ARTHUR KRINDGES<sup>2</sup>; CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>*Universidade Federal de Pelotas – Carol52200211@gmail.com*

<sup>2</sup>*Universidade Federal de Pelotas – arthur.krindges@ufpel.edu.br*

<sup>3</sup>*Universidade Federal de Pelotas – Carlosavjr@gmail.com*

### 1. INTRODUÇÃO

O estudo das propriedades dos materiais tem importância pois, somente quando conhecemos o comportamento do material é que podemos compreender suas possíveis aplicações. A área da física que busca entender as propriedades dos materiais sólidos e líquidos é a matéria condensada, uma subárea da matéria condensada é o estudo de materiais magnéticos.

Os materiais magnéticos são amplamente utilizados em tecnologias de armazenamento (ex: discos rígidos e computadores quânticos), na área médica (ex: máquinas de tomografia) e no melhoramento de itens já existentes. Recentemente, o efeito magneto-calórico (EMC) também tem sido estudado, que consiste em um fenômeno no qual variações de temperatura ocorrem a partir da aplicação de campos magnéticos externos. Uma consequência desse efeito seria a possibilidade de desenvolvimento de geladeiras e ar-condicionados magnéticos (HARIKRISHNAN, 2018). Um dos mecanismos físicos sugeridos para favorecer o EMC é a frustração geométrica, que consiste em um cenário de interações competitivas e não trivial. Portanto, é necessário estudar o fenômeno do magnetismo, incluindo a frustração geométrica, para um desenvolvimento tecnológico mais assertivo.

Tais sistemas magnéticos são constituídos de um grande número de partículas. Consequentemente, para estudar os sistemas apresentados, é necessário a utilização da mecânica estatística. Segundo GARROD (1995), podemos utilizar a mecânica estatística como uma teoria de probabilidade e determinar o equilíbrio das propriedades macroscópicas, levando em conta o macroestado de maior probabilidade. A termodinâmica também é utilizada, pois o estado de equilíbrio é determinado pela minimização da energia do sistema.

O objetivo deste trabalho é com o modelo de Ising e a teoria de campo médio com cluster utilizar as ferramentas da mecânica estatística e da termodinâmica para determinar, computacionalmente, a magnetização de uma rede triangular cristalina com interações ferromagnéticas (FM) e antiferromagnéticas (AF), que apresenta frustração geométrica, entre primeiros vizinhos. Nesse caso, pretendemos estudar a frustração geométrica de maneira teórica, revisando um modelo frustrado, para que possamos compreender o papel da frustração na magnetização.

### 2. METODOLOGIA

NISHIMORI (2001) descreve o modelo de Ising como sendo um dos mais simples para o estudo de sistemas com muitos corpos. Nele estabelecemos sítios, no caso da rede triangular, temos 3 sítios ( $N=3$ ) em cada *cluster*, sendo cada

triângulo na rede, Figura 1, um *cluster*. Cada sítio (*S*) possui um *spin*, podendo ser positivo (*up*=+1) ou negativo (*down*=-1) e também possuem uma magnetização local. A magnetização média será a média entre as magnetizações locais.

Para calcular a magnetização, precisamos do *Hamiltoniano*, uma função de probabilidade (*P(S)*) e uma função de partição (*Z*), que é o fator de normalização para a função de probabilidade.

O *Hamiltoniano* é a função que descreve a energia do sistema no modelo de Ising. Ele é dado por:

$$H = -J \sum_{\{ij\} \in B} S_i S_j. \quad (1)$$

Cada par de sítio que interage possui uma energia de interação, descrita no primeiro termo do Hamiltoniano. A soma das interações entre os sítios é dada pelo somatório do produto das energias de todos os sítios, multiplicado pela energia de interação (*J*). Sendo a energia de interação FM (+1) ou AF (-1).

Na técnica de cluster com solução de campo médio (JIN, 2013), baseando na composição da Figura 1, a qual considera uma rede infinita separada em cluster de três sítios, o Hamiltoniano pode ser escrito na forma:

$$H = H_{\text{inter}} + H_{\text{intra}}, \quad (2)$$

onde  $H_{\text{intra}}$  corresponde a parte de solução exata:

$$H_{\text{intracluster}} = -J[(S_1 S_2 + S_1 S_3 + S_2 S_3)] \quad (3)$$

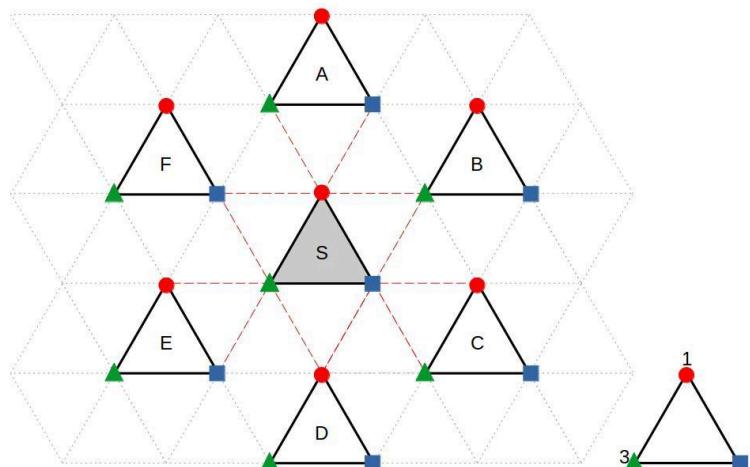
e  $H_{\text{inter}}$  corresponde a uma correção de campo médio (JIN, 2013), sendo a soma das equações 4, 5 e 6:

$$\begin{aligned} H_{\text{intercluster}-S_1} = & -J[(S_{S1} m_{F2} - m_{S1} m_{F2}/2) + (S_{S1} m_{A2} - m_{S1} m_{A2}/2) + \\ & (S_{S1} m_{A3} - m_{S1} m_{A3}/2) + (S_{S1} m_{B3} - m_{S1} m_{B3}/2)], \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} H_{\text{intercluster}-S_2} = & -J[(S_{S2} m_{B3} - m_{S2} m_{B3}/2) + (S_{S2} m_{C1} - m_{S2} m_{C1}/2) + \\ & (S_{S2} m_{C3} - m_{S2} m_{C3}/2) + (S_{S2} m_{D1} - m_{S2} m_{D1}/2)], \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} H_{\text{intercluster}-S_3} = & -J[(S_{S3} m_{D1} - m_{S3} m_{D1}/2) + (S_{S3} m_{E2} - m_{S3} m_{E2}/2) + \\ & (S_{S3} m_{E1} - m_{E1}/2) + (S_{S3} m_{F2} - m_{S3} m_{F2}/2)]. \end{aligned} \quad (6)$$

Figura 1: Rede com clusters triangulares considerando um sistema de subredes (formas geométricas coloridas). Interações interclusters, entre primeiros vizinhos, destacadas com linha vermelha tracejada.



Fonte: a autora.

É importante apontar que os índices das magnetizações locais são referência. Na prática, devido a simetria, cada sub-rede terá 3 magnetizações locais  $m_1 = m(1)$ ,  $m_2 = m(2)$  e  $m_3 = m(3)$ . Nossa função de probabilidade é:

$$P(S) = \frac{e^{-\beta H}}{Z}, \quad (7)$$

onde  $\beta = 1/T$ . E o fator de normalização  $Z$ , também chamado de função de partição, é dado por:

$$Z = \sum_S e^{-\beta H} = Tr e^{-\beta H}. \quad (8)$$

Dadas essas funções, podemos calcular nosso parâmetro de ordem, a magnetização:

$$m_i = Tr((S_i)P(S)). \quad (9)$$

Para calcularmos a magnetização da rede demonstrada na Figura 1, considerando os primeiros vizinhos com  $J=+1$ , primeiramente somamos o Hamiltoniano intracluster do cluster principal  $S$ , com o Hamiltoniano das energias intercluster, isto é, entre os sítios do cluster  $S$  e os sítios dos demais clusters (demarcada pela linha tracejada na Figura 1).

Quando  $J=-1$  precisamos considerar um sistema de subredes para determinar a magnetização por conta da frustração geométrica que surge na rede AF. Esse sistema está demonstrado na figura 1, onde determinamos cores diferentes para cada sítio, cada cor possui uma magnetização local inicial diferente para considerar a competição entre interações, que causa frustração geométrica. A magnetização inicial dos sítios serão: uma positiva, uma simétrica negativa e uma nula. Novamente é feita a soma dos Hamiltonianos intra e interclusters entre primeiros vizinhos.

Com os Hamiltonianos calculados, utilizamos as outras equações descritas e calculamos a magnetização da rede com interação FM e AF em função da temperatura. O resultado esperado, considerando a literatura, é uma curva em queda exponencial até atingir seu 0 na temperatura crítica.

Os cálculos foram realizados utilizando a linguagem FORTRAN 90 para rodar os cálculos iterativos variando a temperatura a partir de um valor inicial. Resolvemos o sistema não linear acoplado, encontrando os zeros das funções para  $m(1)$ ,  $m(2)$  e  $m(3)$ , utilizando o método do ponto fixo.

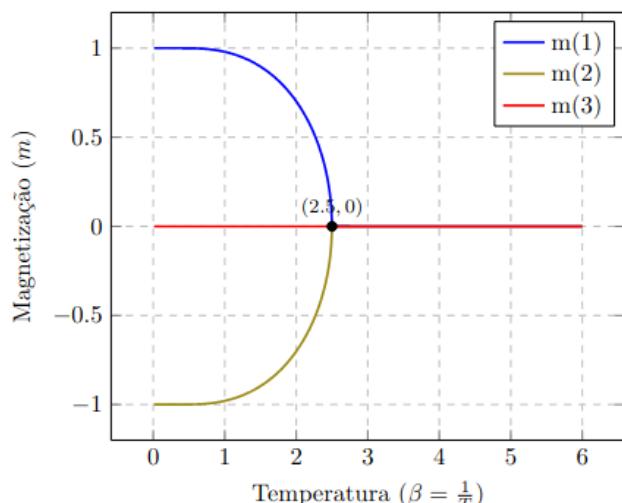
### 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para o sistema de subredes da rede AF, com  $J=-1$ , consideramos as magnetizações iniciais dos spins dos sítios:  $m(1)$ (vermelho)= 1,  $m(2)$ (azul)= -1 e  $m(3)$ (verde)= 0.

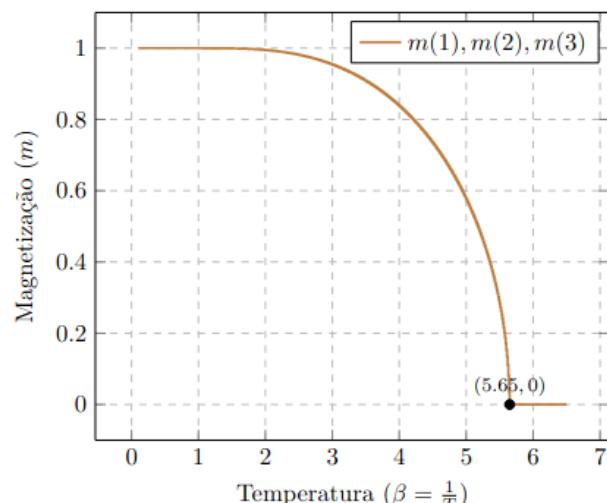
Após rodar os cálculos iterativos, com um passo de 0.01 para a temperatura, obtemos os dados utilizados para confecção do gráfico da Figura 2.

A partir do gráfico podemos determinar a temperatura crítica da rede triangular FM sendo  $\approx 5.65$  e da rede AF sendo  $\approx 2.5$ . Na rede AF obtemos magnetizações diferentes para os 3 sítios,  $m(1)$  e  $m(2)$  sendo opostas simétricas enquanto  $m(3)$  é nula. A magnetização média da rede AF será nula, já que a soma de  $m(1)$ ,  $m(2)$  e  $m(3)$  é igual a zero. Na rede FM os 3 sítios possuem a mesma magnetização, o que a torna a magnetização média da rede.

Figura 2: Magnetização em função da temperatura para os sítios de uma rede triangular com interações antiferromagnéticas (à esquerda) e ferromagnéticas (à direita).



(a) Rede com interações Antiferromagnéticas.



(b) Rede com interações Ferromagnéticas.

Fonte: a autora.

#### 4. CONCLUSÕES

Neste trabalho conseguimos calcular computacionalmente e demonstrar, em forma de gráfico, a magnetização em função da temperatura, para os primeiros vizinhos, de uma rede triangular FM. Conjuntamente, calculamos a magnetização de um rede triangular AF, com frustração, utilizando um sistema de subredes. Ambos os resultados estão de acordo com o esperado da literatura. É importante ressaltar que esta revisão do tema é uma primeira abordagem em direção a uma avaliação mais completa em próximos trabalhos, no que diz respeito ao efeito de frustração geométrica.

Para trabalhos futuros temos a discussão de outras quantidades termodinâmicas, como a energia livre e entropia, e a implementação do método para segundos vizinhos. Em paralelo buscaremos um interfaceamento entre computacional e experimental, na tentativa de sintetizar uma amostra magnética que sejamos capazes de modelar sua rede e calcular sua magnetização computacionalmente.

#### 5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

GARROD, Claude. **Statistical Mechanics and Thermodynamics**. New York: Oxford University Press, 1995.

HARIKRISHNAN, S. Nair. AHMED, A. El-Gendy. **Chapter 8 - Magnetocaloric Effect in Frustrated Magnetic Systems: From Bulk to Nano**. Elsevier, 2018.

JIN, Songbo; SEN, Arnab; GUO, Wenan; SANDVIK, Anders W.; **Phase transitions in the frustrated Ising model on the square lattice**. American Physical Society, 2013.

NISHIMORI, Hidetoshi. **Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing - An Introduction**. Tokyo: Clarendon Press, 2001.