

RESPOSTA DA MAGNETIZAÇÃO A CAMPOS MAGNÉTICOS EXTERNOS EM REDE TRIANGULAR FRUSTRADA VIA ENUMERAÇÃO EXATA

Samantha Alves Lameiro¹; Carlos Alberto Vaz de Moraes Junior²

¹ Universidade Federal de Pelotas – samanthaalveslameiro@gmail.com

² Universidade Federal de Pelotas – cavmjúnior@ufpel.edu.br

1. INTRODUÇÃO

As teorias de campo médio são aproximações que substituem as interações microscópicas de um sistema por um campo efetivo médio, permitindo descrever seu comportamento coletivo de forma simplificada. Nesse contexto, a teoria de campo molecular de Weiss destaca-se como uma das abordagens mais conhecidas. Nela, as interações entre os momentos magnéticos individuais são substituídas por um campo médio proporcional à magnetização do próprio sistema. Essa simplificação torna o problema mais tratável. Entretanto, em casos de redes cuja geometria dá origem à frustração magnética, por exemplo, o caráter coletivo das interações locais torna-se essencial e não pode ser ignorado, tornando a abordagem da teoria de campo médio insatisfatória. Nesses cenários, é necessário recorrer a métodos que considerem explicitamente cada interação do sistema.

A técnica de enumeração permite incorporar as interações entre sítios de forma exata. Esta técnica se torna um dos fundamentos da teoria de campo em clusters. Contudo, a enumeração exata na ausência de campo médio pode produzir resultados interessantes no que diz respeito às relações entre quantidades termodinâmicas com magnetização, campo magnético externo e temperatura. Nessas condições, emergem comportamentos característicos associados à competição entre efeitos magnéticos e térmicos, cuja compreensão é fundamental para descrever a organização coletiva do sistema.

Nesse contexto, este trabalho tem como objetivo analisar o comportamento de sistemas magneticamente frustrados na presença de campos externos, com ênfase no caso de uma rede triangular, tanto no regime de baixas temperaturas, em que predominam os efeitos magnéticos, quanto em temperaturas mais altas, onde os efeitos térmicos passam a se destacar.

2. METODOLOGIA

Afim de realizar a modelagem computacional, um cluster triangular foi resolvido utilizando a técnica de enumeração exata. Para calcular a magnetização local por sítio, implementou-se um algoritmo em Fortran estruturado em sub-rotinas, cada uma com uma função específica: geração da base de spins, cálculo da energia de cada configuração, determinação da função de partição e, finalmente, cálculo da magnetização média do sistema.

Foram geradas as possíveis configurações para um cluster de três sítios dispostos em uma geometria triangular. Cada spin pode assumir dois valores (+1 ou

-1), o número total (n°) de configurações possíveis é dado pela Equação 1.

$$n^\circ = 2^n. \quad (1)$$

Dado $n = 3$, são possíveis 8 configurações distintas. A geração dessas configurações foi feita utilizando a função (BTEST), uma função binária lógica do Fortran que permite acessar diretamente os bits de um número inteiro. Assim, cada configuração é representada por uma sequência de bits, e o valor de cada bit define o valor do spin naquele sítio (atribuindo +1 ou -1).

Com a base de estados construída, utiliza-se o Hamiltoniano do sistema para calcular a energia de cada configuração, conforme expressa a Equação 2, onde J é o parâmetro de interação entre os spins, H é a magnitude do campo magnético externo aplicado, e s_i é o valor do spin no sítio i , com índice j se referindo a um particular microestado das possíveis configurações.

$$E_j = -J(s_{1,j}s_{2,j} + s_{2,j}s_{3,j} + s_{3,j}s_{1,j}) - H(s_{1,j} + s_{2,j} + s_{3,j}). \quad (2)$$

Em seguida, obtém-se o fator de Boltzmann, que está incluso na Equação (3), exposta a seguir.

$$P(E_j) = \frac{e^{-\beta E_j}}{\sum_j e^{-\beta E_j}}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}. \quad (3)$$

em que E_j é a energia da Eq. 2 correspondente a um estado particular j . Esse fator representa o peso estatístico de cada estado, e seu somatório sobre todas as configurações define a função de partição (Z). Com isso, pode-se atribuir a cada configuração sua probabilidade de ocorrência e, por consequência, seu peso na média da magnetização, que é dada pela Equação 4.

$$m_i = \langle s_i \rangle = \frac{\sum_j s_{i,j} e^{-\beta E_j}}{\sum_j e^{-\beta E_j}}, \quad (4)$$

em que $m(T, H) = (\sum_i m_i)/n$. Por fim, esse processo completo, da geração das configurações até o cálculo da magnetização média, está embutido dentro de um loop que varia o campo magnético externo. Isso permite traçar uma curva descrevendo o comportamento da magnetização média em função do campo aplicado, em uma temperatura fixa. Foram aplicadas duas temperaturas distintas: $T/J=0,1$ e $T/J=1,0$, com o objetivo de comparar o comportamento do sistema em uma situação próxima do estado fundamental (baixa temperatura) com uma situação de temperatura mais elevada, onde os efeitos térmicos são mais significativos.

Por fim, esse processo completo, da geração das configurações até o cálculo da magnetização média, está embutido dentro de um loop que varia o campo magnético externo. Isso permite traçar uma curva descrevendo o comportamento da magnetização média em função do campo aplicado, em uma temperatura fixa.

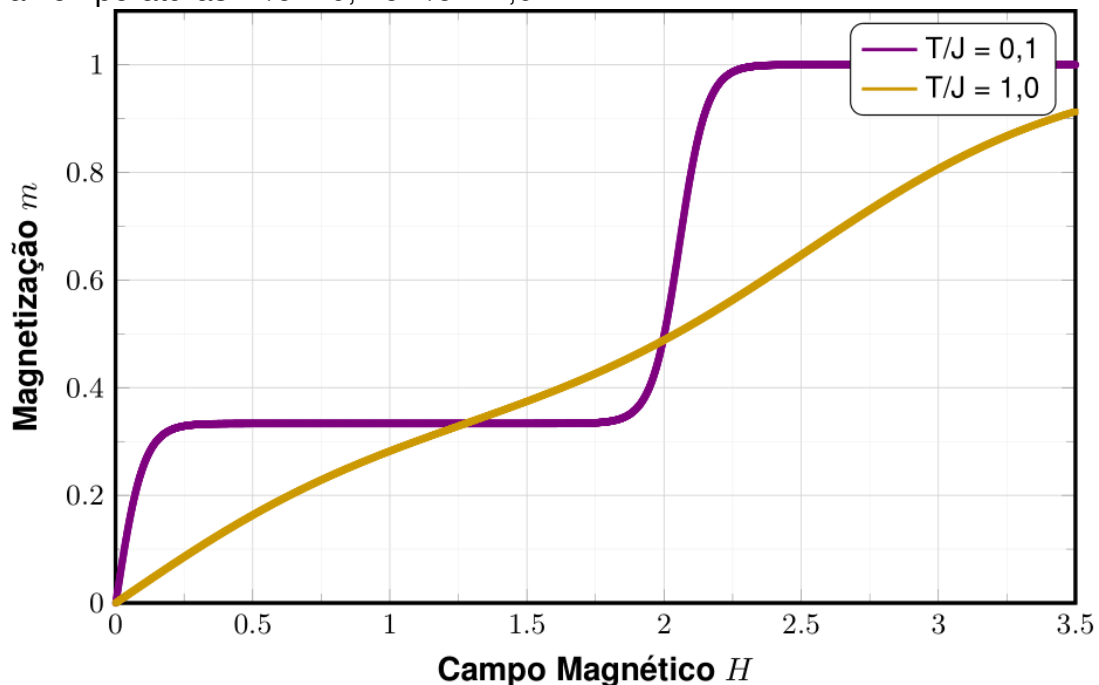
Foram aplicadas duas temperaturas distintas: $T/J=0,1$ e $T/J=1,0$, com o objetivo de comparar o comportamento do sistema em uma situação próxima do estado fundamental (baixa temperatura) com uma situação de temperatura mais elevada, onde os efeitos térmicos são mais significativos.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A técnica de enumeração exata foi aplicada com a finalidade de calcular a função que descreve a variação da magnetização pelo campo magnético a uma dada temperatura, $m(T, H)$. Considerando as temperaturas fixas escolhidas para a análise, $T/J = 1,0$ é uma temperatura comparativamente alta em relação a $T/J = 0,1$ — temperatura em que o sistema tende ao estado fundamental. A diferença de ambas foi proposital para desenvolver a discussão proposta no trabalho.

A partir do conjunto de pontos obtidos, foi possível plotar um gráfico que abrange as curvas de $m(T, H)$ para as temperaturas escolhidas. A Figura 1 abaixo expressa as curvas da magnetização em função do campo externo.

Figura 1: Curva da variação da Magnetização (m) com o Campo Magnético (H) para Temperaturas: $T/J = 0,1$ e $T/J = 1,0$.



Fonte: do Autor (2025)

Observa-se que, para $T/J = 1,0$, a curva de magnetização cresce de forma contínua e relativamente suave à medida que o campo magnético externo é intensificado. Esse comportamento é característico de sistemas em que a energia térmica é alta, favorecendo transições graduais entre estados e suavizando as respostas do sistema ao campo externo. Nessa condição, os spins não estão rigidamente acoplados a uma configuração de mínima energia, podendo reorganizar-se de maneira progressiva sob influência do campo. O que se nota é uma transição paramagnética com saturação em $M = 1$, ocorrendo sem saltos abruptos, embora haja indícios de regiões de inclinação mais branda, reflexo da presença de interações internas entre os spins.

Em contraste, a curva associada à temperatura mais baixa, $T/J = 0,1$, apresenta platôs de magnetização intercalados por transições abruptas. Esse comportamento indica que, a essa temperatura, o sistema encontra-se próximo ao seu

estado fundamental e sua dinâmica está fortemente condicionada pela estrutura discreta dos níveis de energia. Nesse regime, a análise em termos de microestados se torna essencial: a frustração magnética imposta pela rede triangular cria um grande número de configurações degeneradas, nas quais os spins não conseguem se alinhar de modo que todas as interações sejam simultaneamente minimizadas. O campo externo, ao ser intensificado, seleciona progressivamente subconjuntos desses microestados, originando os patamares observados na curva.

Assim, a diferença entre os dois regimes de temperatura não deve ser entendida apenas como uma comparação direta entre curvas, mas como a manifestação da competição entre efeitos térmicos e magnéticos. Em altas temperaturas, a contribuição entrópica dos microestados suaviza as transições; em baixas temperaturas, prevalece a estrutura discreta do estado fundamental, e é justamente essa característica que revela a frustração e dá origem ao aspecto incomum da curva de $T/J = 0,1$.

4. CONCLUSÕES

A comparação entre os dois cenários mostra que a resposta da magnetização depende diretamente da natureza das interações que predominam em cada situação. No estado fundamental, correspondente à baixa temperatura, a frustração magnética da rede triangular se manifesta por meio de platôs bem definidos e saltos abruptos de magnetização, reflexo da degenerescência dos microestados e da dificuldade em satisfazer todas as interações simultaneamente. Já em temperaturas mais elevadas, a energia térmica amplia o espaço de configurações acessíveis, suavizando as transições e resultando em uma curva contínua típica de um comportamento paramagnético.

Portanto, conclui-se que a resposta da magnetização a campos magnéticos externos em uma rede triangular frustrada, estudada via enumeração exata, é determinada pela estrutura discreta dos microestados no fundamental e pela competição entre efeitos magnéticos e térmicos fora dele. Esses fatores controlam a reorganização dos spins e a evolução da magnetização, determinando os platôs no estado fundamental e as transições graduais em diferentes condições térmicas.

REFERÊNCIAS

FERREIRA, Anderson Ricardo da Silva. **Revisão teórica e computacional do modelo frustrado J1 J2**. 2023. 85 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Física) – Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2023

GONZÁLEZ CHÁVEZ, Diego Ernesto. **Estudo do ruído Barkhausen como técnica de ensaio não destrutivo**. Rio de Janeiro: Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, 2009.

SILVA, J. M. Machado da. **O modelo molecular de Weiss: ferromagnetismo**. Gazeta de Física, Porto, v. 5, n. 4, p. 127-131, dez. 1971.

WHANGBO, Myung-Hwan; KOO, Hyun-Joo; KREMER, Reinhard K.; VASILIEV, Alexander N. **Magnetization Plateaus by the Field-Induced Partitioning of Spin Lattices**. Condensed Matter, v. 9, n. 4, p. 45, 2024.