

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS  
Instituto de Física e Matemática  
Programa de Pós-Graduação em Física



Dissertação de Mestrado

# Modelo Fermiônico frustrado $J_1 - J_2$ com interação de pareamento

Arthur Krindges

Pelotas, 2023



**Arthur Krindges**

**Modelo Fermiônico frustrado  $J_1 - J_2$  com interação de pareamento**

**Dissertação de Mestrado** apresentada ao Instituto de Física e Matemática da Universidade Federal de Pelotas, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Alberto Vaz de Moraes Junior

Coorientador: Prof. Dr. Fábio Mallmann Zimmer

Pelotas

2023

Universidade Federal de Pelotas / Sistema de Bibliotecas  
Catalogação na Publicação

K89m Krindges, Arthur

Modelo fermiônico frustrado  $J1 - J2$  com interação de pareamento / Arthur Krindges ; Carlos Alberto Vaz de Moraes Junior, orientador ; Fábio Mallmann Zimmer, coorientador. — Pelotas, 2023.

99 f. : il.

Dissertação (Mestrado) — Física, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, 2023.

1. Frustração. 2. Pareamento. 3. Fermiônico. I. Moraes Junior, Carlos Alberto Vaz de, orient. II. Zimmer, Fábio Mallmann, coorient. III. Título.

CDD : 539.721

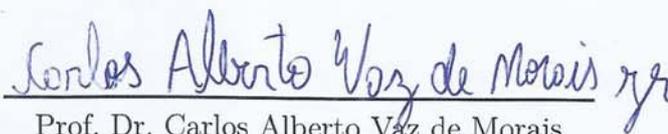
**Arthur Krindges**

**Modelo Fermiônico frustrado  $J_1 - J_2$  com interação de pareamento**

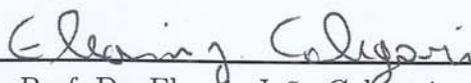
Dissertação aprovada, como requisito parcial, para obtenção do grau de Mestre em Física, Programa de Pós-Graduação em Física, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas.

Data da Defesa: 24 de fevereiro de 2023

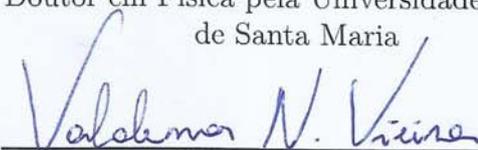
Banca examinadora:



Prof. Dr. Carlos Alberto Vaz de Morais  
Junior (Orientador)  
Doutor em Física pela Universidade Federal  
de Santa Maria



Prof. Dr. Eleonir João Calégari  
Doutor em Física pela Universidade Federal  
de Santa Maria



Prof. Dr. Valdemar das Neves Vieira  
Doutor em Física pela Universidade Federal  
do Rio Grande do Sul

Pelotas  
2023



# Agradecimentos

Agradeço a minha família, minha mãe Neiva e meu pai Rui, pelo apoio e força concedido durante toda a minha trajetória. Aos meus irmãos Rafael e Ritieli, pela presença e disposição para qualquer contratempo. Em especial minha noiva Júlia Ferreira Santos, que esteve do meu lado, nos tempos difíceis e bons durante todos esses anos.

Agradeço ao professor Carlos Alberto Vaz de Moraes Júnior, pelos anos de orientação e apoio na minha caminhada acadêmica. Ao professor Fábio Mallmann Zimmer, pelas contribuições e novos aprendizados compartilhados nesta caminhada. Espero que em futuras novas conquistas estas parcerias permaneçam.

Aos meus colegas do grupo GTCMC e todos os outros colegas de PPGFis - UFPel, meu obrigado.

Por fim, agradeço a UFPel, ao PPGFis (composto por um corpo docente disposto a ajudar) e a CAPES pelo apoio financeiro. Obrigado a todos.



# Resumo

Os efeitos combinados da frustração magnética e interação de pareamento tipo BCS são estudados nesta dissertação. Para tal análise, o modelo fermiônico frustrado  $J_1 - J_2$  com interação de pareamento foi adotado. Este modelo consiste em um modelo fermiônico  $S = 1/2$  de Ising, contendo interações de troca de curto alcance, sendo elas de primeiros ( $J_1$ ) e segundos ( $J_2$ ) vizinhos, apresentando em sequência assinaturas de frustração magnética. Em adicional, um termo de pareamento tipo BCS entre primeiros vizinhos é incorporado ao modelo. O modelo é resolvido através da teoria de campo médio em clusters e pelo método variacional, onde um cluster  $2 \times 2$  é adotado para solução. A metodologia para obtenção dos resultados constituiu-se no emprego do método de *bits* para obtenção dos microestados e no método de diagonalização exata. Primeiramente, foram analisadas as diferenças do modelo  $J_1 - J_2$  clássico e fermiônico sem pareamento BCS, a fim de testar a metodologia empregada. Como resultado, foram observadas mudanças na criticalidade do modelo, em função do aumento do espaço de fase, uma vez que no formalismo fermiônico, estados não magnéticos são incluídos. Posteriormente, o modelo é analisado com a presença de cluster com interação BCS local, mediado pela variável  $g$ . Adicionalmente, um diagrama de fases  $J_2/J_1$  por  $T/J_1$  para diferentes valores de  $g/J_1$  e o comportamento das correlações de spin foram obtidos. Estes resultados mostraram uma forte dependência da região de maior frustração ( $J_2/J_1 \rightarrow 0,5$ ) com o termo de pareamento BCS. Basicamente, foram observados pontos tricríticos, um ponto triplo e o aparecimento de uma fase não magnética no estado fundamental. Por fim, o modelo com pareamento BCS aplicado em todo o sistema foi analisado; neste contexto, houve o surgimento de novos parâmetros de ordem que permitiram o mapeamento de uma fase de pares. O principal resultado obtido foi um diagrama de fases tridimensional, dado em função de  $J_2/J_1$ ,  $g/J_1$  e  $T/J_1$ . Este resultado mostrou o aparecimento de quatro fases: paramagnética, antiferromagnética, super antiferromagnética e pares. Além disso, o estado não magnético, observado nos resultados do modelo com formação de pares local no cluster, deu lugar ao estado de pares. Em suma, pôde ser verificado que a competição nas interações magnéticas favoreceu a formação de pares, acarretando no surgimento desta fase quântica de pares.

**Palavras-chave:** Frustração, Pareamento, Fermiônico.



# Abstract

The combined effects of magnetic frustration and BCS-like pairing interaction are studied in this dissertation. For such analysis, the frustrated fermionic model  $J_1 - J_2$  with pairing interaction was adopted. This model consists of a fermionic model  $S = 1/2$  of Ising, containing short-range exchange interactions, with first ( $J_1$ ) and second ( $J_2$ ) neighbors, presenting magnetic frustration signatures in sequence. In addition, a BCS-type pairing term between first neighbors is incorporated into the model. The model is solved using mean field theory in clusters and by the variational method, where a cluster  $2 \times 2$  is adopted for solution. The methodology for obtaining the results consisted of using the *bits* method to obtain the microstates and the exact diagonalization method. First, the differences between the classic  $J_1 - J_2$  model and the fermionic model without BCS pairing were analyzed in order to test the methodology employed. As a result, changes in the criticality of the model were observed, due to the increase in phase space, since in the fermionic formalism, non-magnetic states are included. Subsequently, the model is analyzed with the presence of a cluster with local BCS interaction, mediated by the variable  $g$ . Additionally, a phase diagram  $J_2/J_1$  by  $T/J_1$  for different values of  $g/J_1$  and the behavior of spin correlations were obtained. These results showed a strong dependence of the region of greatest frustration ( $J_2/J_1 \rightarrow 0,5$ ) with the BCS pairing term. Basically, tricritical points, a triple point and the appearance of a non-magnetic phase in the ground state were observed. Finally, the model with BCS pairing applied throughout the system was analyzed; in this context, there was the emergence of new order parameters that allowed the mapping of a pair phase. The main result obtained was a three-dimensional phase diagram, given as a function of  $J_2/J_1$ ,  $g/J_1$  and  $T/J_1$ . This result showed the appearance of four phases: paramagnetic, antiferromagnetic, super antiferromagnetic and pairs. Furthermore, the non-magnetic state, observed in the results of the model with local pair formation in the cluster, gave way to the paired state. In short, it could be verified that the competition in magnetic interactions favored the formation of pairs, resulting in the emergence of this quantum phase of pairs.

**Keywords:** Frustration, Pairing, Fermionic.



# Lista de ilustrações

Figura 1 – Estrutura Cristalina . . . . .	5
Figura 2 – Estrutura da família de rede cúbica. . . . .	6
Figura 3 – Estrutura Amorfa . . . . .	7
Figura 4 – Momentos Magnéticos, Rede Cristalina e Rede Magnética. . . . .	8
Figura 5 – Ciclo de histerese . . . . .	8
Figura 6 – Momentos magnéticos, ciclos de $M$ vs $H$ e susceptibilidade magnética. . . . .	9
Figura 7 – Momentos magnéticos e susceptibilidade magnética da ordem antiferromagnética. . . . .	11
Figura 8 – Ciclo de $M$ vs $H$ dos ferros duros e macios. . . . .	12
Figura 9 – Arranjo de redes com frustração. . . . .	13
Figura 10 – Micro-estados de uma rede triangular de 3 sítios. . . . .	14
Figura 11 – Interação de troca RKKY. . . . .	15
Figura 12 – a) Susceptibilidades magnética em função da temperatura para os protocolos FC e ZFC. b) Susceptibilidades magnética em função da temperatura para diferentes valores de frequência. . . . .	16
Figura 13 – Magnetização e sua dependência com a temperatura. . . . .	21
Figura 14 – Esquema da rede quadrada dividida em clusters e padrões das fases AF e SAF. . . . .	23
Figura 15 – Diagrama de fases do modelo $J_1 - J_2$ clássico. . . . .	25
Figura 16 – Diagrama de fase $H$ vs $T$ dos supercondutores tipo I e tipo II. . . . .	28
Figura 17 – Rotina para cálculo dos parâmetros em função de $T$ . . . . .	41
Figura 18 – Sub-rotina de cálculo das matrizes. . . . .	41
Figura 19 – Magnetizações $m_{AF}$ e $m_{SAF}$ dos modelos $J_1 - J_2$ clássico e fermiônico. . . . .	44
Figura 20 – Energia livre do modelo $J_1 - J_2$ clássico e magnetização $m_{SAF}$ . . . . .	45
Figura 21 – Comparação entre a energia do modelo $J_1 - J_2$ clássico e fermiônico em função de $m_{SAF}$ . . . . .	46
Figura 22 – Diagramas de fases dos modelos $J_1 - J_2$ clássico e fermiônico. . . . .	47
Figura 23 – Magnetizações $m_{AF}$ e $m_{SAF}$ do modelo fermiônico em função de $T/J_1$ . . . . .	48
Figura 24 – Energia livre e os pontos tríplo e tricríticos. . . . .	50
Figura 25 – Parâmetros de ordem $m_{AF}$ , $m_{SAF}$ e orrelações de spin. . . . .	51
Figura 26 – Diagrama do modelo $J_1 - J_2$ fermiônico com pareamento local . . . . .	52
Figura 27 – Parâmetros de ordem em função de $T/J_1$ e $J_2/J_1$ . . . . .	53
Figura 28 – Diagrama do modelo $J_1 - J_2$ fermiônico com pareamento com $J_2/J_1 = 0$ . . . . .	54
Figura 29 – Estado fundamental do modelo $J_1 - J_2$ fermiônico com pareamento. . . . .	55
Figura 30 – Diagrama do modelo $J_1 - J_2$ fermiônico com pareamento para diferentes valores de $g/J_1$ . . . . .	56

Figura 31 – Diagrama do modelo  $J_1 - J_2$  fermiônico com pareamento. . . . . 56

# Lista de abreviaturas e siglas

AF	Antiferromagnético
bcc	Cubo de Corpo Centrado
BCS	John Bardeen, Leon Cooper, e John Robert Schrieffer
CM	Campo Médio
DM	Diamagnético
FC	Resfriamento com Campo Aplicado
fcc	Cubo de Face Centrada
FG	Frustração Geométrica
FM	Ferromagnético
FP	Formação de Pares
FS	Frustração
LAPACK	<i>Linear Algebra Package</i>
LS	Líquido de Spin
MC	Monte Carlo
ME	Mecânica Estatística
PM	Paramagnético
RKKY	Malvin Avram Ruderman, Charles Kittel, Tadao Kasuya e Kei Yosida
SAF	Super Antiferromagnético
sc	Cubo Simples
SC	Supercondutividade
SQ	Segunda Quantização
VS	Vidro de Spin
ZFC	Resfriamento a Campo Nulo



# Sumário

1	INTRODUÇÃO . . . . .	1
2	ORDEM E DESORDEM . . . . .	5
2.1	Sólidos cristalinos e não-cristalinos . . . . .	5
2.2	Materiais magnéticos . . . . .	7
3	FRUSTRAÇÃO E SUPERCONDUTIVIDADE . . . . .	13
3.1	Ordens Magnéticas com Frustração . . . . .	15
3.1.1	Modelos Teóricos . . . . .	17
3.1.2	Modelo de Ising frustrado $J_1 - J_2$ clássico . . . . .	23
3.2	Supercondutividade . . . . .	27
3.2.1	Formulação fermiônica . . . . .	29
3.3	Conexão entre frustração e supercondutividade . . . . .	29
4	MODELO FERMIONICO FRUSTRADO $J_1 - J_2$ . . . . .	31
4.1	Modelo fermiônico frustrado $J_1 - J_2$ em presença de clusters com interação BCS local . . . . .	34
4.2	Modelo fermiônico frustrado $J_1 - J_2$ com interação BCS . . . . .	35
5	MÉTODOS NUMÉRICOS . . . . .	39
6	RESULTADOS E CONSIDERAÇÕES . . . . .	43
6.1	Parâmetro de ordem . . . . .	43
6.2	Energia livre e transições de primeira ordem . . . . .	44
6.3	Comparativo entre abordagem clássica e fermiônica . . . . .	45
6.4	Resultados com ajuste do parâmetro de formação de pares . . . . .	48
7	CONCLUSÃO . . . . .	59
	REFERÊNCIAS . . . . .	61
	APÊNDICES . . . . .	71
	APÊNDICE A – SEGUNDA QUANTIZAÇÃO E O ESPAÇO DE FOCK . . . . .	73
	APÊNDICE B – TRICRITICALIDADE . . . . .	75

**APÊNDICE C – CÓDIGOS . . . . . 77**

# 1 INTRODUÇÃO

O campo de estudo de fenômenos elétricos, magnéticos e de seus materiais associados, tem sido de grande relevância para a humanidade (PSAROUDAKI; PANAGOPOULOS, 2021; ELSAYED et al., 2022; CHRISTIANSEN; SIEBNER, 2022). Este campo tem proporcionado não somente o entendimento de suas propriedades fundamentais, mas também o desenvolvimento de novas tecnologias (POOLE et al., 2014). Fenômenos físicos especialmente interessantes neste contexto são a frustração (FS) e a supercondutividade (SC).

A frustração se caracteriza pela competição entre interações magnéticas, que acarreta em uma não satisfação de todas as interações<sup>1</sup>. Por exemplo, os vidros de spin (VS) são magnetos desordenados em que a frustração tem papel importante. Estes apresentam um ordenamento magnético em que abaixo de uma temperatura crítica  $T_c$  ocorre o congelamento dos momentos magnéticos em direções randômicas (BINDER; YOUNG, 1986). Adicionalmente, nos VS, quantidades termodinâmicas como susceptibilidade magnética  $\chi_1$  e calor específico  $C_m$  apresentam assinaturas únicas. A  $\chi_1$  apresenta um pico em  $T_c$ , enquanto que  $C_m$  apresenta um máximo para uma temperatura acima de  $T_c$  (RAMIREZ, 1994). Experimentalmente, tal ordenamento pode ser detectado no pirocloro  $Y_2Mo_2O_7$  (OFER et al., 2010). Salienta-se ainda que em VS, a desordem<sup>2</sup> e frustração estão intrinsecamente ligadas<sup>3</sup>. Adicionalmente, os líquidos de spin (LS) são também sistemas em que a frustração é fundamental. Nestes, não se apresenta uma ordem magnética de longo alcance, como nos VS. Por outro lado, os LS possuem altas flutuações quânticas mesmo no estado fundamental ( $T = 0$ ), as quais ocorrem devido ao forte emaranhamento quântico dos spins. Nos LS, verifica-se ainda a ausência de quebras espontâneas de simetria da rede, diferente do comportamento de VS (WEN et al., 2019). Experimentalmente, o fenômeno de LS pode ser observado nos compostos de  $Ca_{10}Cr_7O_{28}$  (POHLE; YAN; SHANNON, 2021). Outros detalhes sobre os sistemas LS podem ser encontrados na seção 3.1.

Portanto, a partir da discussão prévia, verifica-se que a frustração (FS) pode levar a comportamentos altamente não triviais, caracterizados por uma rica termodinâmica. Ademais, a importância do tema se reflete no amplo envolvimento da comunidade científica em estudar estes sistemas (YOON et al., 2021; SARKIS et al., 2020; HAYASHIDA et al., 2020; SAHA et al., 2020). Em alguns casos, o processo de desordenação da rede pode levar a interações frustradas, típico dos VS (BINDER; YOUNG, 1986). Em outros, ocorre uma FS sem que necessariamente ocorra desordem, tendo origem em interações

---

<sup>1</sup> Mais apontamentos sobre a frustração podem ser encontrados no Capítulo 3.

<sup>2</sup> Uma introdução a ordem e desordem pode ser encontrada no Capítulo 2.

<sup>3</sup> Detalhes sobre VS na seção 3.1.

antiferromagnéticas<sup>4</sup> (AF) competitivas em certas estruturas (RAMIREZ, 1994), a qual pode ser associada, por exemplo, ao surgimento dos LS. Basicamente, no contexto da frustração, observa-se um estado estacionário altamente degenerado no lugar de um estado fundamental de configuração única (MOESSNER; RAMIREZ, 2006).

Os sistemas supercondutores também têm sido foco de grande investigação. Tais sistemas possuem a característica de zero resistência na passagem de corrente elétrica. Adicionalmente, supercondutores apresentam o efeito Meissner, em que todas as linhas de campo magnético externo são expulsas do material. A teoria microscópica mais aceita para explicar este fenômeno é de que os elétrons do material no estado supercondutor acabam por se arranjar em nos chamados *pares de Cooper* (teoria BCS). Esse tipo de acoplamento surge a partir de fônons da rede cristalina que induzem uma interação elétron-elétron atrativa<sup>5</sup>. Exemplos destes materiais são os compostos  $\text{MgB}_2$  (KORTUS et al., 2001) e  $(\text{Y}_{0,6}\text{Ba}_{0,4})_2\text{CuO}_{4-\delta}$  (WU et al., 1987). Nestes, abaixo de uma temperatura crítica ( $T_c$ ) o material sofre uma transição para um estado de resistência zero, que também é marcada por uma descontinuidade no calor específico. Tais sistemas têm gerado grande impacto na criação de novas ferramentas e tecnologias, bem como no entendimento de fenômenos magnéticos quânticos. Entre as ferramentas tecnológicas, está a criação de computadores quânticos (BOUCHIAT et al., 1998; MARTINIS, 2009; ARUTE et al., 2019).

Do ponto de vista teórico, existem abordagens para ambos os fenômenos, FS e formação de pares (FP). Na resolução de tais problemas, um dos métodos utilizado é o método de Monte Carlo (MC) (MURTAZAEV et al., 2021; WATANABE; SEO; YUNOKI, 2019). Contudo, tal método necessita de alto poder computacional para obtenção de resultados. Ademais, o emprego de MC pode gerar dificuldade na localização das transições de fase, especialmente em modelos com frustração (JIN et al., 2013). Neste contexto, abordagens via métodos de solução exata tem trazido boa confiabilidade nos resultados sem a necessidade de alto poder computacional (KELLERMANN; SCHMIDT; ZIMMER, 2019; WIESER, 2021). Logo, a FS é por muitas vezes estudada por modelos de Ising frustrado, tanto via formalismo clássico (JIN et al., 2013; MURTAZAEV et al., 2021) quanto quântico (WIESER, 2021; MIRANDA et al., 2021). Por exemplo, no formalismo clássico, a geometria da rede pode ser explorada para gerar competição entre as interações e conseqüente frustração. Este é o caso de um sistema de estrutura triangular somente com interações antiferromagnéticas. Por outro lado, em uma rede quadrada, com interações AF entre primeiros vizinhos, as interações podem ser satisfeitas simultaneamente, sem que ocorra tal competição (COEY, 2010). Entretanto, quando se considera interações além dos primeiros vizinhos, como AF entre primeiros e segundos vizinhos de uma rede quadrada, também pode ocorrer competição de interações, levando à frustração. Logo, o tipo de interação e a forma geométrica da rede são de grande importância para o surgimento da

<sup>4</sup> Um resumo sobre AF e outras fases ditas usuais pode ser encontrado na seção 2.2.

<sup>5</sup> Detalhes sobre a teoria BCS e os supercondutores pode ser encontrado na seção 3.2.

frustração. Já em sistemas supercondutores, a descrição teórica é dada em um formalismo quântico que assegura o mecanismo de formação de *pares de Cooper*. A teoria microscópica que engloba esse mecanismo é a teoria BCS (BARDEEN; COOPER; SCHRIEFFER, 1957). Aqui, são definidos operadores de criação e aniquilação que juntos agregam peso energético para os estados duplamente ocupados e vazios (*pares de Cooper*) no Hamiltoniano. Portanto, o problema da supercondutividade do ponto de vista microscópico é tratado pela Mecânica Quântica (KETTERSON, 2016).

Particularmente interessantes são os resultados obtidos da possível combinação destes dois fenômenos. Em certos sistemas supercondutores, a frustração pode levar ao surgimento de competição de fases VS/SC (DAVIDOV et al., 1977; KUMAR; TANDON; AWANA, 2011). No âmbito teórico, modelos com interações de alcance infinito foram utilizados para investigar a competição VS/SC (MAGALHÃES; SCHMIDT, 2000). Mais recentemente, a FS combinada com SC tem sido objeto de estudo, tanto com ênfase experimental quanto teórica (BERG et al., 2009; WANG et al., 2018; TINDALL et al., 2020). Logo, é um tema pertinente, com questões ainda não abordadas, no que diz respeito a compreensão desses fenômenos combinados. Para a tarefa de investigar essa questão, dentro de um contexto teórico, o estudo através de um modelo de Ising frustrado em uma formulação fermiônica pode ser feito. Este modelo teórico pode combinar as características previamente mencionadas: a frustração e a formação de pares. Basicamente, a FS é adicionada por meio de uma geometria com interações competitivas de curto alcance, onde os acoplamentos magnéticos podem ser distintos entre spins. Adicionalmente, a formação de *pares de Cooper* pode ser admitida por meio dos estados não magnéticos provenientes de uma formulação quântica.

Assim, o presente trabalho têm como **objetivo** estudar de forma teórica sistemas magnéticos com frustração juntamente com um termo de formação de pares de Cooper. O modelo abordado neste trabalho considera spins em uma rede quadrada com interações AF entre primeiros e segundos vizinhos, conhecido como modelo frustrado  $J_1 - J_2$ <sup>6</sup>, com uma interação que favorece a formação de pares de spins. Este modelo adota spins de Ising ( $\hat{S}^z$ ) para os momentos localizados e é descrito no formalismo fermiônico que possibilita escrever tanto os momentos magnéticos localizados quando a formação de pares por meio de operadores de criação a destruição (segunda quantização). Do ponto de vista das interações, a ordem AF pode ser encontrada quando a interação AF entre primeiros vizinhos é dominante, sendo que a relação entre  $J_1$  e  $J_2$  pode levar a uma forte competição nas interações (frustração) ao mesmo tempo em que a formação de pares pode ser favorecida, bem como uma possível formação de estado SC. A descrição termodinâmica deste cenário altamente competitivo é um dos objetivos do estudo. Tal investigação se dará por meio de diagramas de fases e outras quantidades termodinâmicas, como a magnetização.

<sup>6</sup> Mais sobre o modelo frustrado  $J_1 - J_2$  clássico na seção 3.1.1.



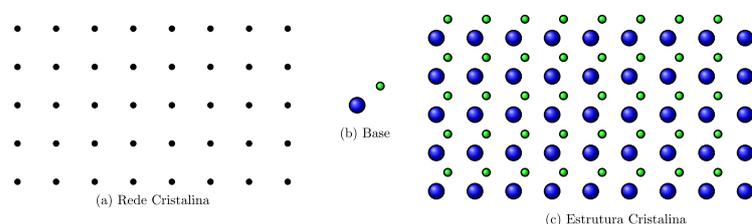
## 2 Ordem e Desordem

Na física da matéria condensada, há grande interesse em estudar as propriedades de materiais compostos por muitos átomos ou moléculas e entender os fenômenos por trás da física de muitos corpos. Os primeiros materiais estudados foram os sólidos cristalinos e não os não-cristalinos. Nestes materiais, as questões de periodicidade e simetria tem papel importante nos sólidos cristalinos. Em alguns casos, a relação entre tais propriedades servem como base para a compreensão de fenômenos elétricos (KETTERTSON, 2016), bem como na descrição da frustração (ver capítulo 3).

### 2.1 Sólidos cristalinos e não-cristalinos

Para um material ser considerado um sólido cristalino, este deve conter algumas características. A primeira delas é a base unitária do cristal, onde um conjunto de átomos é definido como a base para formação do cristal (ver Figura 1(b)). Esta base estaria disposta em um arranjo periódico (KITTEL, 2005). Tal periodicidade está associada a outra característica dos cristais, que é a rede cristalina. Esta se configura como um conjunto de pontos espaciais associados a uma geometria planar e/ou espacial (ver Figura 1(a)). Com estes dois conceitos, temos a estrutura de um cristal (ver Figura 1(c)). Basicamente, se a estrutura é repedida infinitas vezes, um sólido cristalino ideal pode ser obtido (KITTEL, 2005). Assim, o sólido cristalino, que é dado por uma rede periódica, apresenta uma ordem cristalina de longo alcance ou seja, uma ordem estrutural baseada na disposição das entidades básicas (átomo ou conjunto de átomos) que formam o sólido.

Figura 1 – A estrutura cristalina (c) é dada pela combinação da base (b) com a rede cristalina (a).

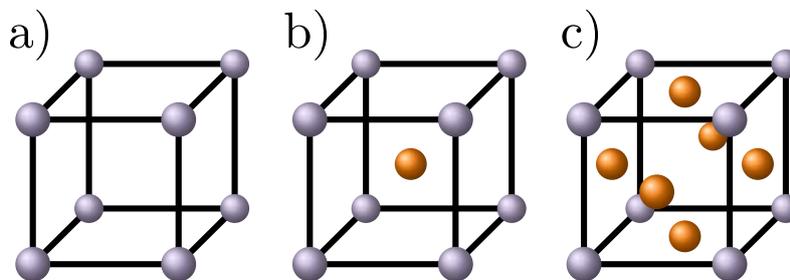


Fonte: Releitura de Kittel (2005).

A estrutura da rede e base dos sólidos cristalinos começou a ser estudada por meio de experimentos de difração de raios X. Tais experimentos indicam o surgimento de novos feixes difratados a partir de um feixe com comprimento de onda da mesma ordem que a constante da rede ( $\lambda$ ). Este fenômeno foi explicado por W. H. Bragg (pai) e W. L. Bragg (filho) (NIGGLI, 1937), recebendo o nobel de física em 1915 (BRAGG; BRAGG, 1915).

Este achado deu origem a lei de Bragg utilizada para determinar as estruturas cristalinas, relacionando os ângulos de interferência construtiva com a geometria da rede microscópica. Uma das famílias de redes mais conhecidas é a rede cúbica, que tem como exemplo o cubo simples (*sc*) (ver Figura 2a)). Temos ainda o cubo de corpo centrado (*bcc*) onde o cubo apresenta um átomo no centro (ver Figura 2b)). Por fim, verifica-se o cubo de face centrada (*fcc*), em que cada face do cubo contém um átomo (ver Figura 2c)). Em essência, as diferenças entre as redes do ponto de vista da lei de Bragg são feitas pelos valores dos ângulos de interferência. Conseqüentemente, os materiais podem ser catalogados. Por exemplo, um material que apresenta a rede *fcc* é o diamante (MALDOVAN; THOMAS, 2004).

Figura 2 – Estruturas cristalinas cúbicas: a) *sc*, b) *bcc* e c) *fcc*.

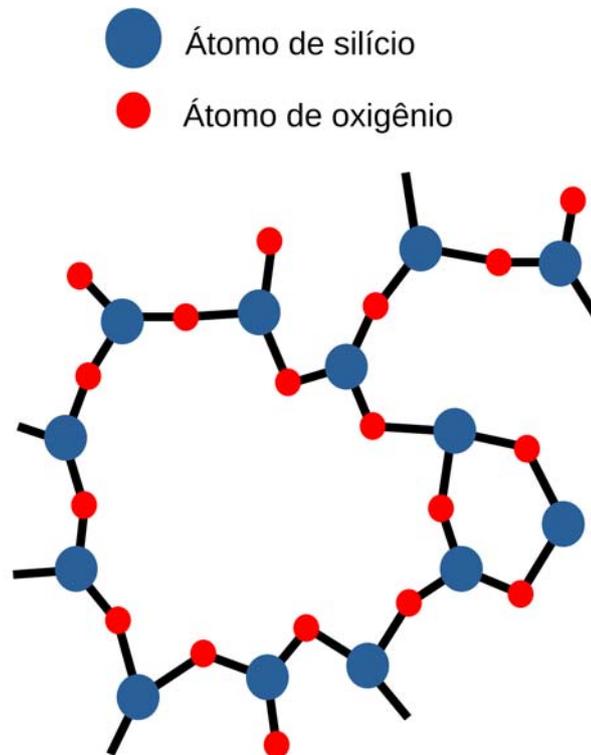


Fonte: Arthur Krindges(2023).

Outra categoria de sólidos são os desordenados, não-cristalinos ou amorfos, os quais não exibem uma ordem de longo alcance. Estes apresentam uma rede sem uma geometria bem definida, ou seja, são estruturas de formato aleatório que não possuem qualquer ordem e periodicidade. Entretanto, os sólidos amorfos apresentam uma base comum e até uma ordem de curto alcance, como é verificado em estruturas vítrias. Um exemplo com essas características é a sílica vítrea ( $\text{SiO}_2$ ) (BATES; HENDRICKS; SHAFFER, 1974). Como podemos verificar na Figura 3, a base da sílica é formada por dois átomos de oxigênio e um de silício, enquanto a rede que distribui a base é amorfa.

Resumidamente, para a formação de um sólido cristalino é necessária base do cristal, formada por um ou mais átomos e a rede cristalina que dita a disposição desta base em uma geometria. Com isso, temos o aparecimento de uma ordem estrutural. Para um sólido amorfo também é necessária uma base. Por outro lado, a rede que dita a disposição da base não apresenta uma geometria definida. Logo, em tal contexto temos uma desordem estrutural. Na física da matéria condensada, outro ramo de interesse é o de materiais magnéticos, em que a definição e caracterização de propriedades destes sistemas esta atrelada aos conceitos de estruturas, e de ordem-desordem.

Figura 3 – Esquema da estrutura amorfa do  $\text{SiO}_2$ .



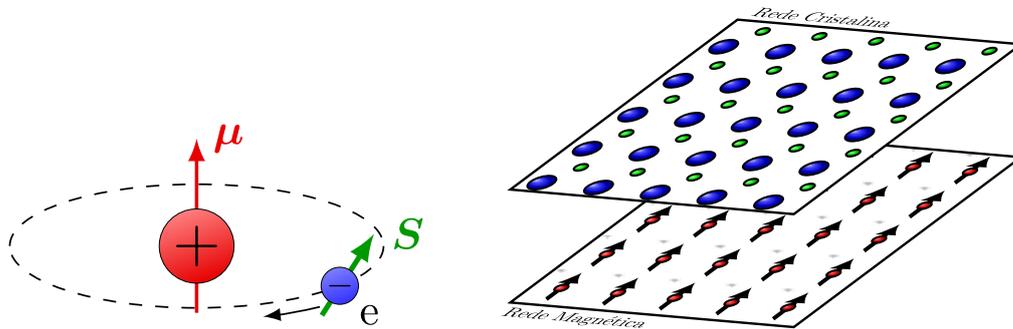
Fonte: Arthur Krindges(2023)

## 2.2 Materiais magnéticos

Os materiais sólidos podem também apresentar propriedades magnéticas, e estes são chamados de materiais magnéticos. A presença de uma base e uma rede nestes matérias ainda é identificada, entretanto um tratamento diferente deve ser feito. Como sabemos, em um cristal a base é formada por um ou mais átomos, enquanto que em um material magnético, do ponto de vista magnético, a base é dada por um momento magnético ou um conjunto de momentos magnéticos. Fisicamente, o surgimento do momento magnético nos átomos ocorre de duas formas: uma através do movimento de cargas elétricas, por meio do momento orbital dos elétrons de um átomo ( $\mu$ ) (ver esquema da esquerda na Figura 4). A outra forma considera o momento magnético de spin ( $S$ ), uma característica intrínseca da matéria (ver esquema da esquerda na Figura 4).

Por exemplo, em uma rede cristalina, ao analisar o seu momento magnético local, podemos atribuir uma nova base (magnética), constituída pelo momento magnético. Forma-se assim uma rede magnética, como mostra o esquema da direita na Figura 4, podendo esta ter uma reciprocidade com a rede cristalina. Essencialmente, percebe-se que a geometria da rede é mantida na rede magnética. A grande diferença é o aparecimento de uma nova

Figura 4 – A esquerda, esquema do momento magnético orbital ( $\mu$ ) e momento magnético de spin ( $S$ ). A direita, Reciprocidade das redes cristalina e magnética.



Fonte: Arthur Krindges(2023)

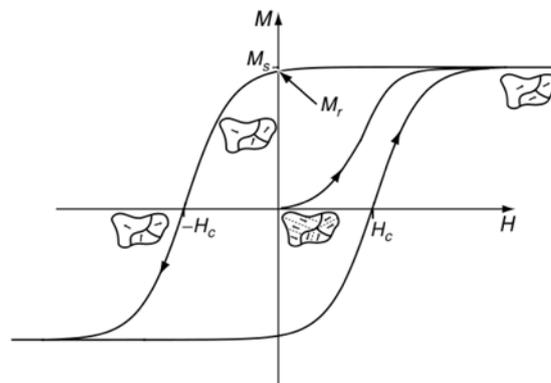
ordem referente a orientação dos momento magnéticos. Essa ordem é dada como sendo de natureza magnética. Neste contexto, a orientação destes momentos na rede se reflete em propriedades magnéticas distintas e no aparecimento de fases magnéticas distintas.

Do ponto de vista experimental, essas propriedades magnéticas distintas aparecem nas grandezas termodinâmicas, como na susceptibilidade magnética que mede a variação da magnetização em função do campo magnético aplicado, descrita pela equação

$$\chi(T) = \frac{\partial M(T, H)}{\partial H}. \quad (2.1)$$

Outra propriedade é o perfil do ciclo de  $M$  vs  $H$ , como podemos ver na Figura 5 para um ferromagneto abaixo da temperatura crítica ( $T_c$ ). Este ciclo mede a magnetização induzida ( $M$ ) no material em função do campo externo aplicado ( $H$ ), bem como a magnetização de saturação ( $M_s$ ), a capacidade do material em preservar a sua magnetização residual ( $M_r$ ) e o campo coercitivo ( $H_c$ ), no qual  $M$  vai a zero.

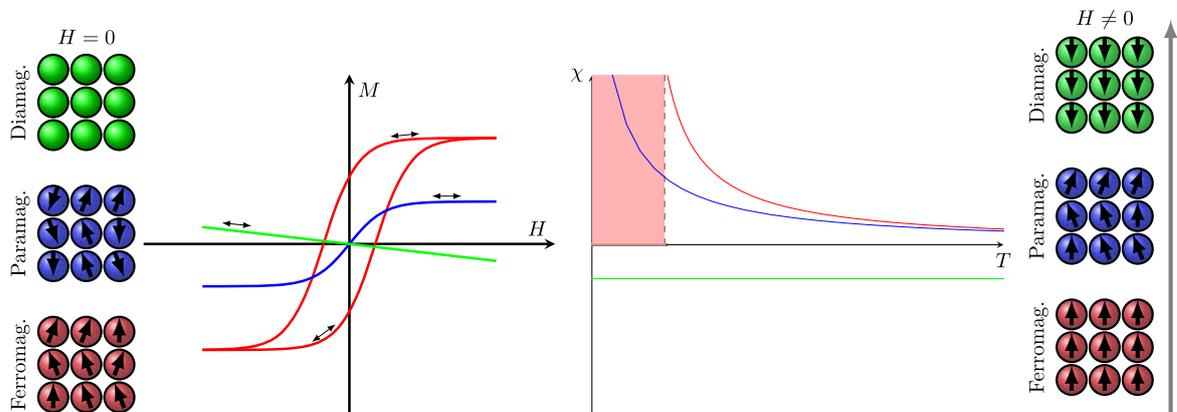
Figura 5 – Comportamento de  $M$  vs  $H$  de um ferromagneto.



Fonte: Coey (2010)

Assim, analisando tanto as propriedades macroscópicas (susceptibilidade magnética e ciclo de  $M$  vs  $H$ ), quanto as propriedades microscópicas (arranjo dos momentos magnéticos) é possível classificar o material quanto a sua ordem magnética. Com isso, temos um panorama de algumas das ordens magnéticas mais conhecidas, ou ditas usuais, na literatura.

Figura 6 – A esquerda, é apresentado o comportamento dos momentos magnéticos sem campo externo. Ao centro, o ciclo de  $M$  vs  $H$  para  $T < T_c$  e a susceptibilidade magnética em função de  $T$  para campo baixo são mostrados. A direita, destaca-se a representação dos momentos magnéticos com campo externo nos seguintes casos: em verde, diamagnético, em azul, paramagnético e em vermelho, ferromagnético. Adicionalmente, a linha tracejada marca  $T_c$  para o ferromagneto.



Fonte: Arthur Krindges(2023)

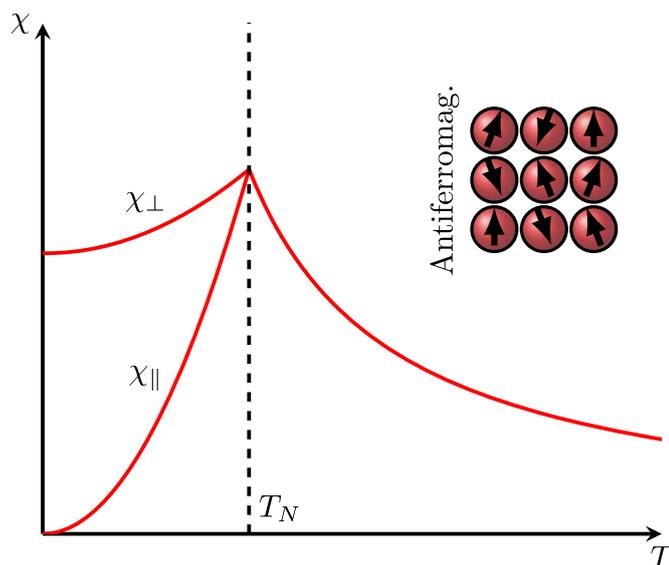
A primeira delas é a **diamagnética** (DM). Em um materiais diamagnéticos o seu comportamentos é análogos à de circuitos elétricos, devido a lei de Lenz (JILES, 2015), tendo sua base associada ao momento magnético orbital. Nestes portanto, o momento local é dado somente pela contribuição do momento magnético orbital. Na ausência de campos magnéticos externos, o momento local é nulo. Conseqüentemente, o momento magnético total também é nulo (comportamento verde da esquerda na Figura 6). Entretanto, com um campo magnético externo aplicado sobre o material ocorre uma corrente induzida, oriunda da alteração do momento magnético orbital, conforme a lei de Lenz. A corrente induzida gera um campo magnético contrário ao campo aplicado. Por conseguinte, o diamagneto apresenta um momento magnético contrário ao campo magnético externo (comportamento verde da direita na Figura 6), com tal descrição sendo possível pelo teorema de Larmor (KITTEL, 2005). Essa propriedade de momento magnético ( $M$ ) ser contrário ao campo magnético externo ( $H$ ) se reflete no comportamento do ciclo de  $M$  vs  $H$  como mostra a linha em verde do gráfico da esquerda na Figura 6. Outro ponto, é a não permanência da magnetização com campo magnético nulo, em função da não interação entre os momentos. Quando olhamos para a susceptibilidade magnética ( $\chi$ ) (linha verde do gráfico da direita na Figura 6), vemos seu caráter negativo, como era esperado pela lei de Lenz.

Outra ordem magnética usual é a **paramagnética** (PM). Nela, a base esta associada não somente ao momento magnético orbital mas também ao de spin, sendo o momento local a soma do momento orbital e de spin. Com o momento magnético de spin, o momento líquido local não é nulo. Entretanto, o momento magnético total do sistema é zero. Neste contexto, não existe uma preferência para a orientação dos momentos, então a probabilidade de ocorrência de momentos para cima é igual ao de momentos para baixo (comportamento azul da esquerda na Figura 6). Quando um campo magnético externo é aplicado sobre o sistema, os momentos magnéticos tendem a se alinhar com o campo a fim de minimizar a energia do sistema. Com isso, o momento magnético total deixa de ser zero e ele passa a depender da temperatura e do campo aplicado. Como podemos ver em azul no gráfico da esquerda na Figura 6, o ciclo de  $M$  vs  $H$  mostra que o momento magnético é nulo a campo magnético nulo. Com campo, a magnetização é não nula e cresce com o aumento do campo externo. Verificando o comportamento de  $\chi$  vs  $T$ , correspondente a linha azul do gráfico da direita na Figura 6, vemos que  $\chi$  é dada pelo inverso de  $T$ , em que este comportamento segue a equação  $\chi = C/T$  que é chamada de lei de Curie (COEY, 2010).

Uma ordem magnética muito conhecida é a **ferromagnética** (FM), a sua base é similar a base da ordem PM, dada pelo momento magnético total via momento orbital e de spin. Entretanto, devido à natureza atômica os momentos magnéticos locais de spin interagem uns com os outros (interação de troca) de forma a alinhar os momentos de spin paralelamente. Assim, o material possui momento magnético que não se anula, ou seja, um momento magnético total diferente de zero (comportamento vermelho da esquerda na Figura 6). Quando um campo magnético externo é aplicado ao sistema, a orientação dos momentos é reforçada na direção do campo externo até saturar. Por outro lado, com o campo nulo, existe um campo remanescente no material. Além disso, aplicando um campo contrário (campo coercitivo) o momento total vai a zero e o material tende a se alinhar novamente com o campo aplicado. Assim, surge o ciclo de  $M$  vs  $H$  como podemos ver em vermelho no gráfico da esquerda na Figura 6. Verificando  $\chi$  em vermelho no gráfico da direita na Figura 6, é percebida uma transição de fase FM/PM (linha tracejada) com a variação de  $T$ . A linha tracejada marca a transição de fase, onde do lado direito temos a fase PM com o comportamento segundo a lei de Curie, enquanto do lado esquerdo a fase FM apresenta altos valores de  $\chi$  que varia conforme o material. Esta transição ocorre devido a agitação térmica interferir nas interações entre os momentos, até o ponto  $T_c$  onde as interações são quebradas e o sistema passa de FM para PM (KITTEL, 2005).

Como vimos anteriormente, os momentos magnéticos de spin podem interagir, em alguns casos gerando um alinhamento paralelo no qual temos a ordem FM. Por outro lado, o que acontece quando ocorre um alinhamento antiparalelo? Neste caso a ordem **antiferromagnética** (AF) aparece, e o fato dos momentos magnéticos terem um alinhamento antiparalelo acarreta em momento magnético total igual a zero (esquema da Figura 7). Entretanto, este anti-alinhamento acarreta em comportamentos distintos nas

Figura 7 – Susceptibilidade magnética ( $\chi$ ) em função da temperatura  $T$  da ordem antiferromagnética, com campo externo aplicado paralelamente ( $\chi_{\parallel}$ ) e perpendicularmente ( $\chi_{\perp}$ ). A direita, arranjo dos momentos magnéticos.



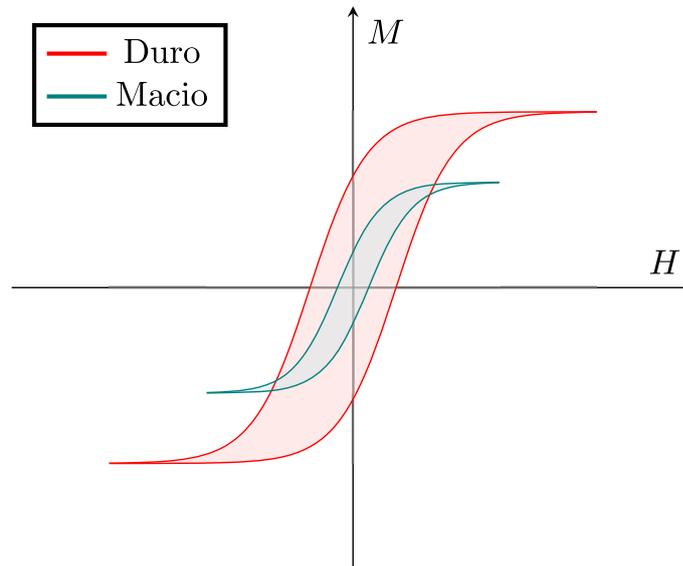
Fonte: **Arthur Krindges**(2023)

quantidades termodinâmicas.

Um dos comportamentos distintos é a resposta da susceptibilidade magnética ( $\chi$ ) ser dependente de como o experimento foi realizado. Como podemos ver no gráfico da Figura 7, as susceptibilidades paralela ( $\chi_{\parallel}$ ) e perpendicular ( $\chi_{\perp}$ ) possuem comportamentos distintos, característica de um comportamento anisotrópico. Quando o campo é aplicado paralelamente ao plano magneticamente mais relevante, os momentos locais permanecem os mesmos no estado fundamental ( $\chi_{\parallel}(T=0)=0$ ). Com o aumento de  $T$  a  $\chi_{\parallel}$  aumenta em função da agitação térmica até a transição de fase AF/PM que ocorre na chamada temperatura de Neel ( $T_N$ ). Em um campo externo perpendicular, o comportamento é distinto. Desta forma, a projeção no plano perpendicular acarreta em variações de  $\chi_{\perp}$  menos proeminentes para  $T < T_N$ , quando comparadas aquelas vistas para o comportamento de  $\chi_{\parallel}$  em mesmo intervalo.

Essas características distintas de PM, FM e AF só ocorre pelo aparecimento da interação de troca que geram os possíveis alinhamentos e de como esta acontece no sistema (KITTEL, 2005). Como podemos perceber, a interação de troca está relacionada a rede do sistema, em que a interação dos momentos de spin é dependente da distância entre os momentos e da geometria da rede, acarretando em interações de magnitudes e sinais distintos. Por exemplo, quando temos um ferromagneto amorfo, ou seja, não existe uma rede bem definida e com isso temos interações de troca variadas. Logo, este pode

Figura 8 – Ciclo de  $M$  vs  $H$  dos ferros duros e macios.



Fonte: Arthur Krindges(2023)

apresentar as propriedades de um ferro macio. Por outro lado, o ferro duro é conhecido por apresentar uma rede cristalina bem definida, em que essas características podem ser observadas na diferença do ciclo de  $M$  vs  $H$  na Figura 8 (BUSCHOW; BOER, 2012). Tais características possibilitaram o surgimento de algumas aplicações tecnológicas. Por exemplo, os ferro cristalinos são utilizados na confecção de ímãs permanentes e os ferros amorfos são utilizados na confecção de eletroímãs presentes em motores (CAMPBELL, 1996; COEY, 2002).

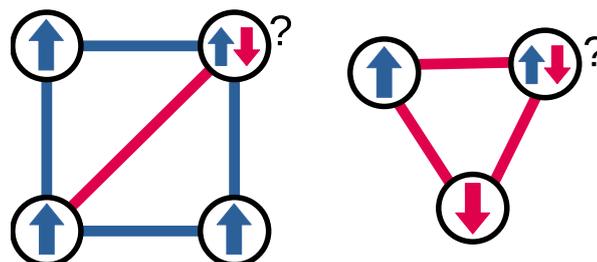
Com base nas considerações anteriores, importantes questionamentos podem ser levantados: o que ocorre quando em um sistema as interações de trocas acontecem aleatoriamente, mesclando interações FM e AF, ou mesmo quando um sistema com uma geometria da rede do tipo triangular com interações AF é considerado? Nesses cenários, um fenômeno interessante acontece, chamado de **frustração**. Esse fenômeno é a peça chave para compreensão de uma série de ordens magnéticas e estruturais cristalinas exóticas e que tem grande relevância na literatura, sendo tema do nobel de Física de 2021 (MANABE; HASSELMANN; PARISI, 2021).

### 3 Frustração e Supercondutividade

Em física, a **frustração** é a inability do sistema em satisfazer todas as interações simultaneamente. Com isso, um sistema frustrado não possui uma única configuração que minimize a energia deste sistema. Conseqüentemente, o sistema apresenta uma alta degenerescência, assim, múltiplos estados com a mesma energia são observados, em particular no estado fundamental. O fato de não satisfazer todas as interações simultaneamente decorre da existência de uma competição entre as interações (LACROIX; MENDELS; MILA, 2013; SADOX; MOSSERI, 2006).

Em sistemas magnéticos, a frustração pode ter origem em diferentes fontes: presença de interações distintas (ferromagnéticas e/ou antiferromagnéticas) que competem, ou somente interações antiferromagnéticas aliadas a certas geometrias do sistema, gerando uma competição em função de algum efeito geométrico (frustração geométrica). A figura 9 visa exemplificar estas duas origens de frustração. A parte esquerda da figura 9 ilustra uma plaqueta quadrada formada por 4 sítios com interações FM entre spins de sítios vizinhos e AF entre spins de segundos vizinhos, gerando um conflito nas interações que está representado pelo sítio com o sinal de interrogação, indicando as duas configurações possíveis de spin que levam ao mesmo mínimo de energia. Por outro lado, a frustração geométrica depende da geometria da rede, podendo ocorrer em redes cristalinas 2D ou 3D com vértices compartilhados e interações AF entre os momentos magnéticos (MAY et al., 2019). O esquema da direita na figura 9 exhibe o caso de uma rede triangular com interações AF, onde a forma da rede é a responsável por gerar competição entre as interações.

Figura 9 – Arranjo de redes com frustração. À esquerda, rede quadrada com interações FM (azul) e AF (vermelho), apresenta **frustração de interação**. À direita, rede triangular com interações AF (vermelho), apresenta **frustração geométrica**.



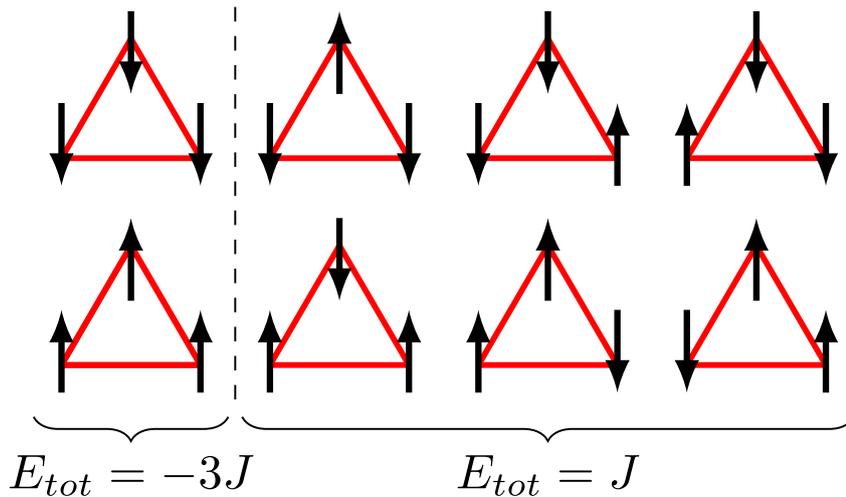
Fonte: Arthur Krindges(2023)

Para analisar um dos reflexos da frustração (a alta degenerescência do estado fundamental), olhamos para a energia de troca total, ou seja, a soma da energia local do sistema, dada pela equação

$$E_{tot} = \sum_{(i,j)} E_{ij} = - \sum_{(i,j)} J \sigma_i \sigma_j, \quad (3.1)$$

com índices  $(i, j)$  designando pares de vizinhos, onde a energia total ( $E_{tot}$ ) de troca é dada pela soma das interações de troca ( $\sigma_i \sigma_j$ ) vezes a variável de interação ( $J$ ), sendo  $i$  o  $i$ -ésimo sítio tendo  $\sigma_i = \pm 1$  e  $J < 0$  para acoplamento AF e  $J > 0$  para acoplamento FM. Considerando a rede triangular com três spins (com acoplamento AF) mostrada no esquema da direita na figura 9, podemos contabilizar os  $2^3 = 8$  microestados possíveis do sistema e avaliar a energia total de troca de cada um deles, como mostrado na Figura 10.

Figura 10 – Micro-estados de uma rede triangular de 3 sítios. Linhas vermelhas indicam interação de troca AF ( $J < 0$ ) e setas indicam projeção do spin,  $\uparrow = +1$  e  $\downarrow = -1$ .  $E_{tot}$  indica a energia total do micro-estado.



Fonte: Arthur Krindges(2023)

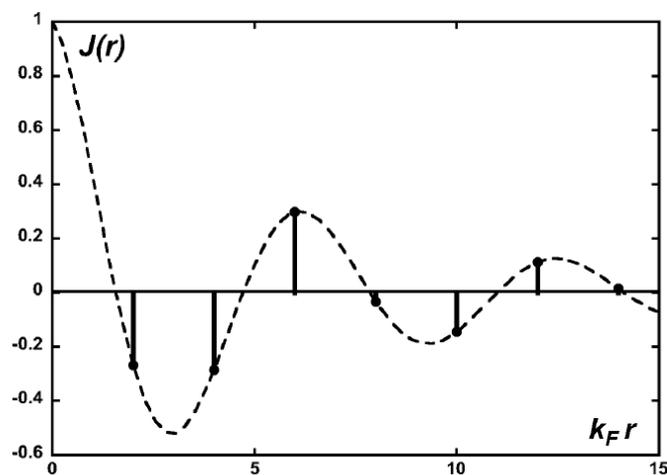
Para fins de análise, no sistema triangular de 3 sítios magnéticos, com  $\uparrow$  representando  $\sigma_i = +1$  e  $\downarrow$  representando  $\sigma_i = -1$ , os micro-estados são separados em dois blocos na Figura 10. O primeiro se refere aos micro-estados em que todos os sítios apontam para a mesma direção ( $\uparrow$  ou  $\downarrow$ ), em que esses micro-estados possuem a mesma energia total ( $E_{tot} = -3J$ ). Sabendo que  $J < 0$ , a  $E_{tot}$  para essas configurações é positiva, acarretando em uma configuração que não minimiza a ação do sistema. Já o segundo bloco com os outros micro-estados, tendo um sítio alinhado anti-paralelamente aos demais, temos todos com a mesma energia de  $E_{tot} = J$ , indicando um estado de mínima energia estável. Entretanto, o ponto chave é perceber que dos 8 estados que o sistema poderia ser encontrado, 2 são instáveis e os outros 6 são de mesmo mínimo valor de energia, degenerados. Assim,

a frustração tem como uma de suas características básicas a alta degenerescência nos sistemas que a contém.

### 3.1 Ordens Magnéticas com Frustração

Existem alguns sistemas magnéticos que podem exibir a frustração, um deles é o **Vidro de Spin** (VS). Os sistemas VS foram observados na década de 70 em ligas de metais nobres com adição de impurezas, advindas de metais de transição, como por exemplo o composto CuMn (FISCHER; HERTZ, 1991). A adição das impurezas na rede cristalina acarreta em uma polarização dos elétrons de condução dos metais nobres. Esta polarização aleatória tem dependência da posição e distância (destes momentos magnéticos), acarretando em interações de troca FM e AF. Uma teoria que exemplifica a aleatoriedade da interação de troca ( $J_{ij}$ ) é a RKKY (RUDERMAN; KITTEL, 1954). Como podemos ver na Figura 11, a interação de troca é função da distância  $J_{ij} = J(r)$ , como a variação do sinal de  $J$  e sua intensidade.

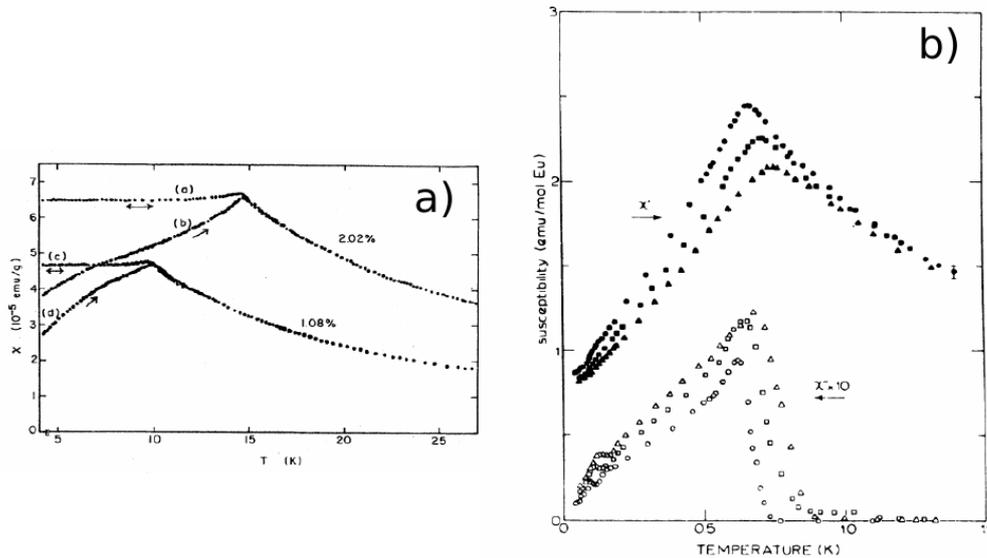
Figura 11 – Interação de troca RKKY.



Fonte: Horner (2005)

Assim, a adição aleatória/desordenada das impurezas, acarreta em interações de troca também aleatórias ( $J_{ij}$ ). Conseqüentemente, há o aparecimento de competição entre estas interações, culminando assim na frustração. Com isso, a fase VS apresenta comportamentos exóticos, se comparado as fases usuais. O primeiro deles é o pico de  $\chi(T)$  na temperatura de transição de fase ( $T_f$ ) com PM, similar a fase AF. Entretanto, existem diferenças significativas do comportamento de  $\chi(T)$  em relação a fase AF. Em outras palavras, algumas dependências de  $\chi(T)$  com o experimento apresentadas a seguir são singulares para sistemas VS. A primeira diferença é na mudança da localização do pico de  $\chi(T)$  para diferentes frequências. Tal comportamento não é visto em sistemas AF, como mostra a Figura 12b).

Figura 12 – a) Susceptibilidades magnética em função da temperatura para os protocolos FC e ZFC, seta única ZFC e seta dupla FC, do compostos  $\text{Cu}\% \text{Mn}$ , com Mn 1,08% e 2,02%. b) Susceptibilidade magnética em função da temperatura para diferentes valores de frequência, frequências menores amplitude do pico maior.



Fonte: a) Nagata, Keesom e Harrison (1979). b) Hüser et al. (1983)

O segundo comportamento ocorre na mudança de  $\chi(T)$  para os diferentes protocolos de medição, como mostra a Figura 12a). Temos o FC (resfriamento com campo aplicado) e o ZFC (resfriamento a campo zero). Nestes protocolos, o material em temperatura acima de  $T_f$  é resfriado até uma temperatura inferior de  $T_f$ . Posteriormente, o material é aquecido com aplicação de campo magnético externo e a medida de  $\chi(T)$  é feita durante todo o processo. Como podemos perceber, o material VS da Figura 12a) apresentou um comportamento semelhante a um material AF no protocolo ZFC (setas com uma direção). Entretanto, ao considerarmos o protocolo FC (setas com duas direções), podemos perceber um comportamento quase constante de  $\chi(T < T_f)$  na região VS. Esta resposta ocorre por conta dos momentos magnéticos na fase VS estarem congelados em função da frustração. Assim, a principal característica da fase VS é o congelamento dos momentos magnéticos em orientações aleatórias (protocolo ZFC) ou em uma direção preferencial (protocolo FC). Outra característica dos VS é a ausência de uma ordem de longo alcance, ou seja, a orientação dos momentos magnéticos é dada aleatoriamente, semelhante a PM.

Adicionalmente, é observada outra fase magnética com frustração é a chamada fase **Líquido de Spin** (LS). Diferente de VS, a fase LS apresenta uma frustração advinda da desordem, ou seja, a origem da frustração não advém de interações aleatórias que competem e sim pela geometria do sistema. Como vimos anteriormente, na Figura 10, a frustração pode ocorrer em um sistema com rede triangular e interações AF, causando a chamada

frustração geométrica (FG). Assim, a fase LS é verificada em um sistema magnético quando em presença de FG. Diferente dos VS, que também apresentam orientações aleatórias, nos LS os momentos não estão congelados no tempo, e podem modificar suas orientações mesmo no estado fundamental. Observa-se o ordenamento LS no material  $\text{SrCr}_9\text{Ga}_3\text{O}_{19}$  que consiste em triângulos com cantos compartilhados e em sistemas supercondutores, como no  $\text{YBaCo}_3\text{FeO}_7$  (SCHWEIKA et al., 2022). Diferentemente de antiferromagnetos em baixa temperatura, os spins em um sistema LS se comportam de forma análoga a moléculas de água no estado líquido, com interações direcionais de curto alcance (análogos magnéticos a pontes de hidrogênio) (BRINI et al., 2017). Quando vistas em pares no sistema LS, há um arranjo dos spins. Por outro lado, este arranjo não se estende além dos vizinhos mais próximos (RAMIREZ, 2003).

A presença de competição no sistema não necessariamente acarreta em uma fase frustrada. Sendo assim, o sistema ainda pode apresentar um estado com ordenamento de longo alcance, diferentemente de ordens frustradas, as quais não apresentam ordem de longo alcance. Uma fase que apresenta estas características é a fase **Super Antiferromagnética** (SAF), ou muitas vezes conhecida como fase de Listras (*Stripe/Stripes*). A SAF é dada por uma ordem de longo alcance do tipo colinear, constituída a partir da junção das ordens FM e AF dependendo assim do referencial. Em um contexto geral, a ordem SAF apresenta uma quebra espontânea de simetria rotacional e aparece em uma variedade de sistemas fortemente correlacionados, como em gases ultrafrios (SACHDEVA; TENGSTRAND; REIMANN, 2020; LI et al., 2017), sistemas Hall quânticos<sup>1</sup> (KLINOVAJA; LOSS, 2014; FU et al., 2020), sistemas eletrônicos (JIN et al., 2021), filmes finos (IORIO et al., 2009) e supercondutores de alta temperatura (EMERY; KIVELSON; TRANQUADA, 1999; SIMUTIS et al., 2022). Em particular, o último sistema citado será detalhadamente analisado no decorrer da seção 3.1.2.

Todas essas ordens magnéticas com frustração apresentadas, podem ser descritas e/ou modeladas por modelos matemáticos, e que consideram como entidades básicas o spin. Para isso, uma pequena revisão a cerca da fenomenologia de modelos magnéticos na descrição das propriedades magnéticas de alguns sistemas, será mostrada a seguir.

### 3.1.1 Modelos Teóricos

Como vimos anteriormente, para a descrição das propriedades dos materiais é necessário conhecer o comportamento das entidades básicas que formam o material. Consequentemente, muitas teorias e modelos matemáticos surgiram para descrever todo o tipo de comportamento. Por exemplo, um modelo muito conhecido é o modelo de Van der Waals, ou equação de Van der Waals que procura modelar o comportamento de gases

---

<sup>1</sup> O efeito Hall é a diferença de potencial de um condutor quando um campo magnético horizontal é aplicado. Em sistemas quânticos esse efeito é quantizado (WEIS; GERHARDTS, 2016).

reais (CALLEN; CALLEN, 1985). De mesmo modo, modelos e teorias para descrição de fenômenos e materiais magnéticos foram desenvolvidos.

Um primeiro modelo capaz de explicar a susceptibilidade magnética negativa dos materiais diamagnéticos foi a teoria de Langevin (LANGEVIN, 1905). Essa teoria foi apontada como uma das primeiras que utiliza das noções de entidades básicas que compõem o material. Essencialmente, por meio dos efeitos de um campo magnético aplicado a um condutor, Langevin mostrou, a partir das ideias de Ampere e Lenz, como um campo magnético externo aplica uma mudança no movimento orbital dos elétrons dentro do átomo. Basicamente, na abordagem utilizada, se compara o elétron que orbita o núcleo, como uma corrente em um circuito fechado. Pelas noções da teoria eletromagnética, temos que o momento magnético orbital deste sistema é dado por  $m_0 = e\nu r/2$ , onde  $e$  é a carga do elétron,  $\nu$  a velocidade tangencial e  $r$  o raio da orbita (JILES, 2015). Na ausência do campo, a soma dos momentos magnéticos de todos os elétrons dentro de um átomo são canceladas. Por outro lado, com o campo externo aplicado, a perturbação na velocidade destes elétrons pode ser determinada. A variação de  $\nu$  do elétron pode ser determinada por

$$\frac{d\nu}{dt} = \frac{F}{m_e} = \frac{eE}{m_e}, \quad (3.2)$$

sendo  $F$  a força elétrica,  $E$  o campo elétrico e  $m_e$  a massa do elétron. Como o campo elétrico gerado é oriundo do campo magnético da forma  $E = (A/L) \frac{dB}{dt}$  temos que

$$\frac{d\nu}{dt} = \frac{eE}{m_e} = -\left(\frac{\mu_0 e r}{2m_e}\right) \frac{dH}{dt}, \quad (3.3)$$

onde  $\mu_0$  é a permeabilidade magnética no vácuo e  $H$  o campo magnético externo. Assim, a variação do momento magnético orbital total ( $\Delta M$ ) em função do campo magnético externo ( $H$ ) é determinada por

$$\Delta M = -\left(\frac{N_0 \rho}{W_a}\right) \frac{\mu_0 Z e^2 r^2 H}{6m_e}. \quad (3.4)$$

sendo,  $Z$  o número atômico,  $N_0$  o número de Avogadro,  $\rho$  a densidade e  $W_a$  a massa atômica relativa. Logo, é possível chegar na susceptibilidade diamagnética dada por

$$\chi = \frac{M}{H} = -\left(\frac{N_0 \rho}{W_a}\right) \frac{\mu_0 Z e^2 r^2}{6m_e}. \quad (3.5)$$

Como podemos ver, a  $\chi$  é negativa e não depende da temperatura, concordando com os resultados vistos anteriormente na seção 2.2. Um exemplo de seu sucesso é o cálculo da susceptibilidade do carbono (JILES, 2015), que pelo modelo de Langevin é dada por

$$\chi = -18,85 \times 10^{-6} \quad (3.6)$$

e experimentalmente sendo

$$\chi = -13,82 \times 10^{-6}. \quad (3.7)$$

Adicionalmente, uma outra abordagem foi utilizada para a descrição das outras ordens magnéticas convencionais que envolvem o momento magnético de spin. Os modelos que serão mencionados possuem suas bases no formalismo da Mecânica Estatística (ME), sendo esta quem permite a conexão do mundo microscópico com o macroscópico da Termodinâmica. A partir do *Ensemble* Canônico na ME, a função de partição ( $Z$ ) é obtida. Neste contexto, o tratamento dos estados microscópicos conduz aos estados macroscópicos, pela correspondência

$$Z \rightarrow \exp(-\beta F), \quad (3.8)$$

onde  $\beta = 1/k_B T$ , sendo  $T$  a temperatura e  $k_B$  a constante de Boltzmann e  $F$  a energia livre de Helmholtz, sendo  $F$  a função onde todas as propriedades termodinâmicas podem ser derivadas (SALINAS, 2013). Para a descrição dos sistemas magnéticos, outras quantidades termodinâmicas devem ser adotadas, diferentes do volume ( $V$ ) e pressão ( $P$ ). Estas quantidades são os parâmetros de ordem da magnetização, sendo estes local ( $m$ ) ou total ( $M$ ) e o campo externo ( $H$ ), com o parâmetro  $m$  sendo foco de análise. Basicamente, a relação fundamental da termodinâmica para sistemas magnéticos é  $dU = TdS + HdM$ , conduzindo a forma diferencial da energia livre de Helmholtz na forma  $dF = -SdT + HdM$ , com  $F(T, M)$ .

Adicionalmente, o parâmetro da magnetização é dado da seguinte forma

$$m_i = \langle \sigma_i \rangle \quad \text{e} \quad M = \sum_i^N \langle \sigma_i \rangle, \quad (3.9)$$

sendo  $\sigma_i$  a projeção do spin do sítio  $i$  e  $\langle \dots \rangle$  o valor médio. Uma das primeiras teorias a utilizar destes conceitos para descrição dos ferromagnetos foi a **Teoria de Bragg Williams** (BRAGG; WILLIAMS, 1934). Esta parte do pressuposto que a magnetização média local é independente da localização do sítio magnético, logo  $m_i = m_j = m$ . Com isso, a entropia do sistema pode ser calculada exatamente, a partir de

$$m = \frac{N_+ - N_-}{N} \quad (3.10)$$

$$N = N_+ + N_- \quad (3.11)$$

sendo  $N$  o número total de sítios magnéticos,  $N_+$  o número de sítios com momento *up* (+ ou  $\uparrow$ ) e  $N_-$  o número de sítios com momento *down* (- ou  $\downarrow$ ). Por conseguinte, a entropia é dada por

$$S = k_B \ln \binom{N}{N_+} = k_B \ln \binom{N}{N(1+m)/2}, \quad (3.12)$$

$$s(m) = \frac{S}{k_B N} = \ln 2 - \frac{1}{2}(1+m) \ln(1+m) - \frac{1}{2}(1-m) \ln(1-m). \quad (3.13)$$

Outro ponto a ser considerado é a energia interna, em que na ME a energia interna é dada por

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle, \quad (3.14)$$

sendo  $\mathcal{H}$  o hamiltoniano do sistema. Para um ferromagneto, é considerado que os momentos de spin interagem entre si, acarretando em uma preferência do momento magnético. Por esta razão, o hamiltoniano muitas vezes é dado pelo modelo de Ising com interações aos pares de sítios, sendo

$$\mathcal{H} = -J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (3.15)$$

onde  $J$  é variável de troca fixa de curto alcance, sendo  $J > 0$  acarretando em um alinhamento FM e  $J < 0$  em um alinhamento AF. Como vimos anteriormente, uma das suposições para o tratamento analítico indicado é a independência da localização do sítio magnético ( $m_i = m$ ). Como resultado, a energia interna pode ser aproximada na forma

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle = -J \sum_{ij} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle \quad (3.16)$$

$$\approx -J \sum_{ij} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle = -J \sum_{ij} m^2 \quad (3.17)$$

$$\approx -\frac{JNz}{2} m^2, \quad (3.18)$$

sendo  $z$  o número de primeiros vizinhos de um único sítio, onde  $z \equiv 2d$  para um hiper-cubo e  $N$  o número de sítios. Logo, a energia livre de Helmholtz pode ser determinada por

$$f(m, T) = \frac{1}{N} (E - TS) \quad (3.19)$$

$$= -\frac{Jz}{2} m^2 + \frac{1}{2} k_B T [(1+m) \ln(1+m) + (1-m) \ln(1-m) - 2 \ln 2] \quad (3.20)$$

Este resultado esta de acordo com a fenomenologia de Landau para transições de fase, com  $|m| > 1$  temos  $f$  possuindo um único mínimo em  $T < T_c$  e para  $T \geq T_c$  o mínimo é sempre em  $m = 0$ . Verifica-se  $T_c$  como sendo a temperatura de transição de fase dada por  $T_c = Jz/k_B$ , como mostra [Nayak \(2008\)](#).

Outro modelo amplamente conhecido que utiliza o ferramental da ME é o **modelo de Curie-Weiss**. Neste modelo, o conceito de Campo Médio (CM) é introduzido, onde o momento magnético de spin do  $i$ -ésimo sítio ( $\sigma_i$ ) é dado pela magnetização ( $m$ ) mais uma flutuação do momento local ( $\delta\sigma_i$ ) na forma  $\sigma_i = m + \delta\sigma_i$  ([NISHIMORI, 2001](#)). Em adicional, um campo magnético externo ( $H$ ) é introduzido no modelo. Consequentemente, o hamiltoniano da equação 3.15 se torna

$$\mathcal{H} = -J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i \quad (3.21)$$

$$\approx -J \sum_{ij} (m + \delta\sigma_i)(m + \delta\sigma_j) - H \sum_i \sigma_i \quad (3.22)$$

$$\approx -\frac{JzN}{2} m^2 - Jmz \sum_i \delta\sigma_i - H \sum_i \sigma_i \quad (3.23)$$

$$\approx \frac{JzN}{2} m^2 - H_{CW} \sum_i \sigma_i, \quad (3.24)$$

onde  $H_{CW} = Jmz + H$  é campo molecular de Weiss. Com isso, a função de partição do modelo é

$$Z = \text{Tr exp} \left\{ -\beta \left[ \frac{JzN}{2} m^2 - H_{CW} \sum_i \sigma_i \right] \right\} \quad (3.25)$$

$$= e^{-\beta \frac{JzN}{2} m^2} \{2 \cosh \beta H_{CW}\}^N. \quad (3.26)$$

Por conseguinte, a energia livre de Helmholtz pode ser determinada da forma

$$f = -\frac{1}{N\beta} \ln Z, \quad (3.27)$$

$$= \frac{Jz}{2} m^2 + \ln 2 \cosh \beta H_{CW}. \quad (3.28)$$

Com isso, uma transformação de Legendre pode ser aplicada para determinar a função da magnetização. Neste contexto, a equação de estado do sistema se torna

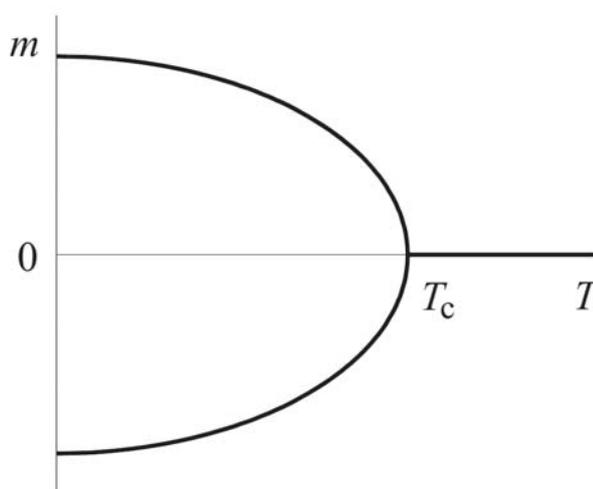
$$m = \frac{1}{\beta} \frac{\partial f}{\partial h} = \frac{\partial}{\partial h} \ln 2 \cosh \beta H_{CW}, \quad (3.29)$$

$$= \frac{1}{\beta \cosh \beta H_{CW}} \frac{\partial (\cosh \beta H_{CW})}{\partial H}, \quad (3.30)$$

$$= \frac{\beta \sinh \beta H_{CW}}{\beta \cosh \beta H_{CW}} = \tanh \beta (Jmz + H). \quad (3.31)$$

Como podemos perceber, a função de  $m$  é acoplada. Portanto, alguns métodos numéricos são necessários para resolução do problema (ver no cap. 5 o método do ponto fixo).

Figura 13 – Magnetização do modelo de Curie-Weiss em função da temperatura ( $T$ ).



Fonte: [Nishimori \(2001\)](#)

Por fim, o comportamento do parâmetro de ordem  $m$  pode ser determinado em função da temperatura ( $T$ ) como mostra a Figura 13. Na figura, temos  $m$  em função de  $T$ , em que podemos notar que para  $T < T_c$ ,  $m \neq 0$  sugerindo uma magnetização macroscópica

espontânea no sistema característica de um ferromagneto. Com  $T > T_c$ , a magnetização se anula indicando uma fase PM, lembrando que  $T_c = zJ$ . Determinando a susceptibilidade magnética ( $\chi$ ) para  $T > T_c$  obtemos

$$\chi = \left. \frac{\partial m}{\partial H} \right|_{H=0} \quad (3.32)$$

$$= \frac{1}{T - T_c}, \quad (3.33)$$

onde a equação 3.33 é conhecida como lei de Curie-Weiss, sendo uma modificação da lei de Curie. Para finalizar, todos estes modelos, até então apresentados, conseguem modelar as ordens magnéticas convencionais. Entretanto, para a descrição das ordens exóticas, outros elementos podem e devem ser incorporados a nível de modelo, onde estes elementos serão discutidos a seguir.

Como vimos anteriormente, a variável da interação de troca pode ser muito importante na física da frustração. Nos modelos já abordados,  $J$  é positivo e de curto alcance, ou seja, uma interação FM de primeiros vizinhos, o que é suficiente para modelar uma transição de fase FM/PM. Entretanto, para as fases magnéticas exóticas, vistas na seção 3.1, uma interação de troca diferente pode e deve ser adotada. Para a descrição da fase VS, por exemplo, uma interação de troca aleatória ( $J_{ij}$ ) deve ser utilizada. Um destes exemplos é a interação do tipo RKKY, sendo função da distância, e que considera sítios posicionados aleatoriamente (RUDERMAN; KITTEL, 1954; FISCHER; HERTZ, 1991). No sentido de reproduzir o conceito de aleatoriedade de sítios, a aleatoriedade das interações acaba sendo incorporada em modelos como o de Edwards-Anderson (EDWARDS; ANDERSON, 1975). Nesse sentido, existem ainda interações de troca que seguem uma distribuição de probabilidade  $P(J_{ij})$  como do tipo gaussiana utilizada no modelo SK ou binomial da regra de Hebb utilizada no modelo Hopfield (SHERRINGTON; KIRKPATRICK, 1975; HOPFIELD, 1982). Já para a descrição de LS, interações de curto alcance são incorporadas. Neste contexto, a competição de interações ocorre através de elementos de geometria, como foi mostrado na Figura 9, onde modelos do tipo Heisenberg<sup>2</sup> com elementos citados modelam LS (YUNOKI; SORELLA, 2006; HE; SHENG; CHEN, 2014; ZHU; WHITE, 2015). Adicionalmente, onde exista mais de um tipo de interação de troca, típico de sistemas que apresentam a fase SAF, outra abordagem pode ser utilizada, em que mais de um  $J$  deve ser incorporado. Um modelo que utiliza desta abordagem é o modelo de Ising frustrado  $J_1 - J_2$  que é fonte de pesquisa deste trabalho. Conseqüentemente, uma explicação e introdução ao modelo será apresentada a seguir.

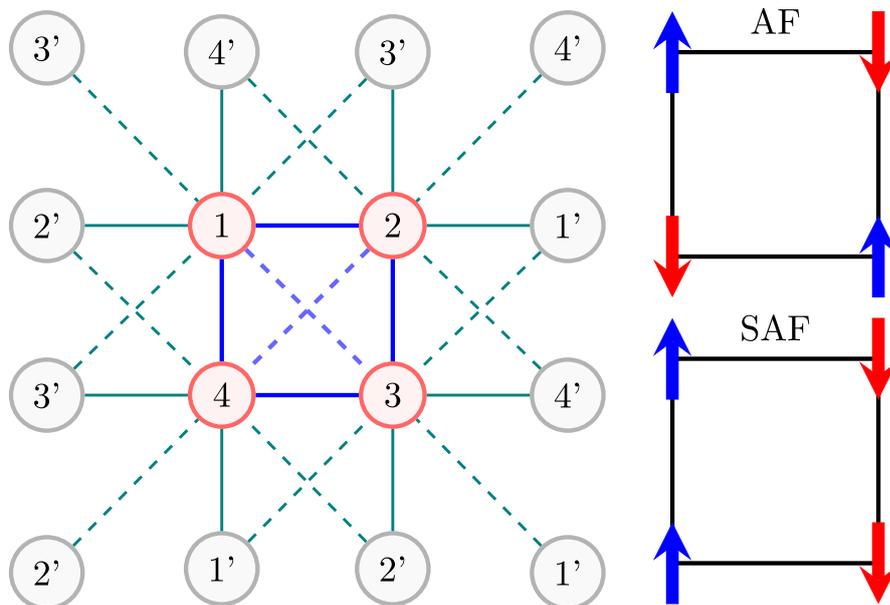
<sup>2</sup> O operador de spin é dado por um vetor de três componentes  $\hat{\mathbf{S}} = \hat{S}^x \hat{\mathbf{i}} + \hat{S}^y \hat{\mathbf{j}} + \hat{S}^z \hat{\mathbf{k}}$  (PIRES, 2021).

### 3.1.2 Modelo de Ising frustrado $J_1 - J_2$ clássico

Como vimos anteriormente, o modelo de Ising frustrado  $J_1 - J_2$  pode ser utilizado para estudar FS em um contexto de interações de curto alcance distintas. Para solução do modelo propõe-se uma rede infinita dividida em clusters (conjuntos de spins), onde um cluster é resolvido exatamente. Utiliza-se ainda decomposição de campo médio para tratamento dos vínculos conectando os clusters (JIN et al., 2013). Conseqüentemente, frustração pode ser verificada. Para tratar o modelo  $J_1 - J_2$  são utilizados métodos aproximativos, entre eles a teoria de campo médio e o método variacional. No campo médio, são utilizados campos auxiliares que buscam reduzir o problema de muitos corpos em uma única estrutura efetiva. Basicamente, considera-se um problema de único cluster com número finito de sítios, sítios estes que interagem com sítios de clusters vizinhos via bordas.

O modelo de Ising frustrado  $J_1 - J_2$  trata de um modelo de interações binárias entre sítios, onde o sítio pode ter valores de  $\pm 1$ . Essas interações são mediadas por duas variáveis de interação de curto alcance,  $J_1$  e  $J_2$ . Particularmente, ambas as variáveis ( $J_1$  e  $J_2$ ) são positivas, privilegiando uma interação AF. Os efeitos combinados de  $J_1$  e  $J_2$  podem levar ao aparecimento de uma fase super antiferromagnética (SAF) (JIN et al., 2013).

Figura 14 – Esquema da rede quadrada dividida em clusters com 4 sítios, onde em vermelho está o cluster  $c$  isolado e em cinza os sítios vizinhos interagentes. As linhas em verde compõem as interações de campo médio (inter-clusters) e azuis de solução exata (intra-cluster). Sendo, linhas cheias interação  $J_1$  e linhas tracejadas  $J_2$ . A direita a ilustração dos padrões das fases AF e SAF.



Fonte: Arthur Krindges(2023)

Com isso, este modelo tem como Hamiltoniano que o descreve:

$$H = J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + J_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (3.34)$$

sendo  $\sigma_i$  o valor do spin do sítio  $i$ . Temos também que, o primeiro termo se refere as interações de primeiros vizinhos ( $\langle ij \rangle$ ) e o segundo termo de segundos vizinhos ( $\langle\langle ij \rangle\rangle$ ). A solução do modelo pode ser feita considerando uma rede infinita ( $Z$ ), que por sua vez é dividida em clusters não interagentes ( $Z^0$ ), como mostra a função de partição

$$Z^0 = \sum_{\sigma} e^{-\beta E^0(\sigma)}. \quad (3.35)$$

Portanto, a energia do sistema infinito de clusters isolados é dada pela soma dos cluster idênticos, da forma

$$E^0(\sigma) = \sum_{i=1}^N E_{ic}^0(\sigma) = N E_c^0(\sigma), \quad (3.36)$$

onde  $N$  é o número total de clusters e  $c$  representa o cluster. A energia de cada cluster isolado é dada como

$$E_c^0 = \sum_{(ij)_c} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i=1}^n h_i \sigma_i, \quad (3.37)$$

em que o primeiro termo é referente as interações **intra-cluster** ( $J_{ij} = J_1$  ou  $J_2$ ) e o segundo é um campo auxiliar ( $h_i$ ) onde o método de campo médio é incluído, semelhante ao método variacional que é utilizado na Mecânica Quântica (SAKURAI; NAPOLITANO; DAHMEN, 2012).

Com isso, a função de partição para o sistema pode ser dada somente em função de termos intra-cluster (função de partição sendo  $Z^0$  e valores médios como  $\langle \dots \rangle_0$ ), que podem ser calculados de forma exata, com correção de campo médio na forma

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta E_{\sigma}} \quad (3.38)$$

$$= Z^0 \sum_{\sigma} \frac{e^{-\beta E_{\sigma}^0}}{Z^0} e^{-\beta(E_{\sigma} - E_{\sigma}^0)} \quad (3.39)$$

$$= Z^0 \langle e^{-\beta(E - E^0)} \rangle_0 \quad (3.40)$$

$$Z \geq Z^0 e^{-\beta \langle E - E^0 \rangle_0}. \quad (3.41)$$

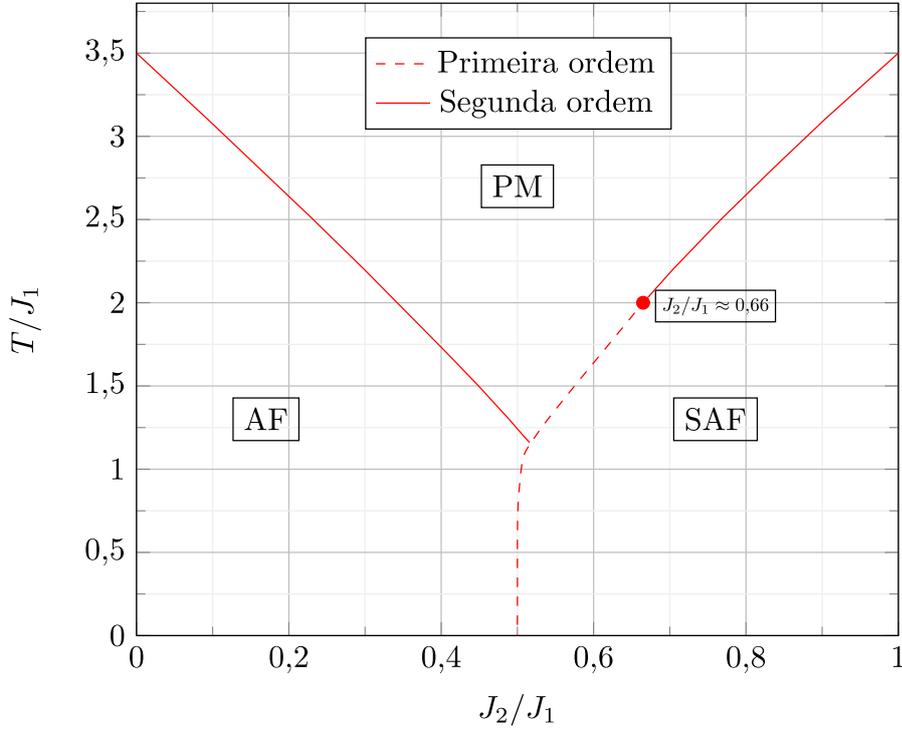
Deve ser lembrado que a energia do sistema infinito ideal (com todas as interações computadas inter/intra-clusters) é escrita por

$$E = \frac{1}{2} \sum_{(ij)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \sum_{(ij)_c} J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (3.42)$$

no qual o primeiro termo refere-se as interações inter-clusters (1/2 para evitar dupla contagem), seguido das interações intra-cluster.

Deste modo, é possível obter os valores médios da magnetização e da energia por meio da inequação de Bogoliubov ( $F = F^0 + \langle E - E^0 \rangle$ ) e de métodos computacionais, sendo  $F$  a energia livre de Helmholtz. Neste contexto, métodos de Monte Carlo (JIN et al., 2013) podem ser utilizados. Contudo, o presente trabalho foca em métodos por solução exata, pela confiabilidade na demarcação das transições de fase (SCHMIDT; SHANNON; THALMEIER, 2007; KELLERMANN; SCHMIDT; ZIMMER, 2019).

Figura 15 – Diagrama de fases do modelo  $J_1 - J_2$  clássico  $2 \times 2$  em função de  $J_2/J_1$  e  $T/J_1$ . As linhas tracejadas indicam transição de primeira ordem e as linhas cheias transição de segunda ordem. Sendo o ponto tricrítico marcado em  $J_2/J_1 \approx 0,66$ .



Fonte: Arthur Krindges(2023)

Com a imagem da esquerda na Figura 14, o método de cluster é exemplificado utilizando um cluster  $2 \times 2$  ao centro, onde as linhas verdes correspondem as interações inter-clusters do método de campo médio. Realizando a soma da expressão da energia para o cluster isolado, com base na imagem da esquerda na Figura 14, obtemos como resultado

$$E_c^0(\sigma) = \sum_{(ij)_c} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i=1}^4 h_i \sigma_i \quad (3.43)$$

$$= J_1(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_1) + J_2(\sigma_1 \sigma_3 + \sigma_2 \sigma_4) \quad (3.44)$$

$$- h_1 \sigma_1 - h_2 \sigma_2 - h_3 \sigma_3 - h_4 \sigma_4. \quad (3.45)$$

Minimizando a energia livre por cluster em função do parâmetro auxiliar  $h$ , é possível obter a energia livre do cluster minimizada e produzir o diagrama de fases do modelo

clássico. Em suma, a interação entre o sítio 2 do cluster central com o sítio 1' é dada pelo seu valor médio, de forma

$$\sigma_2 \sigma_{1'} \approx \frac{1}{2} [\sigma_2 \langle \sigma_{1'} \rangle + \langle \sigma_2 \rangle \sigma_{1'}]. \quad (3.46)$$

Como os sítios são independentes, podemos dizer que o sítio 1' é a cópia do sítio 1, logo  $\langle \sigma_{1'} \rangle = \langle \sigma_1 \rangle$ . Desta forma, o método de campo médio é incorporado ao modelo. Com isso, a ilustração da direita na Figura 14 mostra os padrões das fases AF e SAF para tal cluster utilizado.

Por fim, na Figura 15 é apresentado o diagrama de fases do modelo  $J_1 - J_2$  clássico em função de  $J_2/J_1$  e  $T/J_1$ . Neste, é possível investigar a termodinâmica obtida pelo modelo apresentado. Por exemplo, observam-se transições de primeira e segunda ordem entre as fases AF, PM e SAF, bem como um ponto tricrítico localizado em  $J_2/J_1 \approx 0,66$ . Pode ser destacado ainda a diminuição de  $T_c$  quando  $J_2/J_1 \rightarrow 0,5$  (região de maior frustração). Este diagrama reproduzido está de acordo com a literatura como mostra [Jin et al. \(2013\)](#).

Como foi dito, sistemas com frustração podem apresentar estados exóticos que são de interesse científico. Entretanto, existe outra classe de sistemas que possuem grande relevância tecnológica, os **supercondutores**. Estes que podem tirar proveito do mecanismo de frustração, a qual pode enfraquecer as ordens magnéticas ([RAMIRES, 2019](#)). Desta forma, a próxima seção apresentará uma introdução aos principais elementos e conceitos da supercondutividade, bem como o ferramental teórico necessário para incorporação de tal fenômeno em conjunto com a FS magnética.

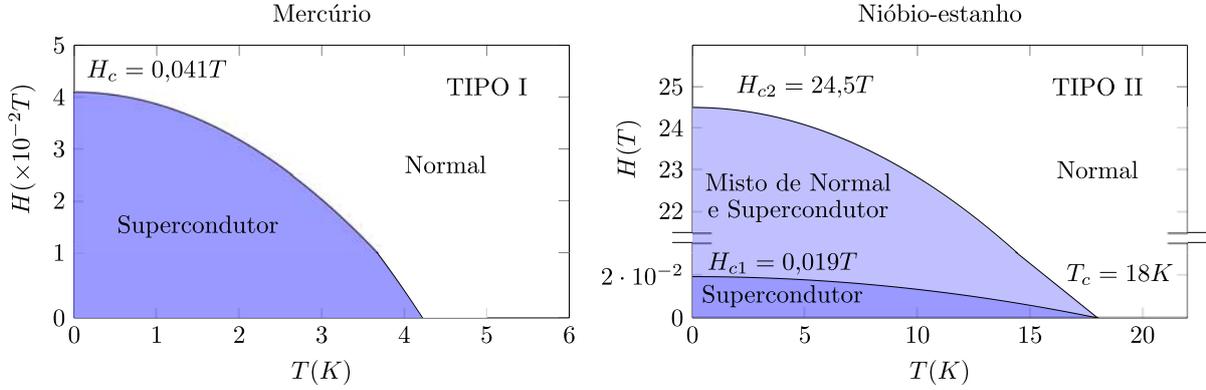
## 3.2 Supercondutividade

Na matéria condensada a supercondutividade, desde sua descoberta em 1911 (COSTA; PAVÃO, 2012), tem se mostrado um ramo muito rico para teóricos e experimentais na busca de seu entendimento. Esta área do conhecimento, tem contribuído para a elaboração de artifícios tecnológicos, como por exemplo a computação quântica (HERRMANN et al., 2022). Um condutor é um material capaz de permitir a passagem de corrente elétrica com baixa resistência, já em supercondutores esta resistência é nula. Essencialmente, em sistemas supercondutores, abaixo da temperatura crítica ( $T_c$ ), apresentam o estado supercondutor. Como consequência, é verificada a resistência zero. Adicionalmente, outra característica dos supercondutores é o efeito Meissner, onde todas as linhas de campo magnético externo são repelidas do material, bem como a descontinuidade no calor específico em  $T_c$  (POOLE et al., 2014).

Dentro do campo dos materiais supercondutores existem dois grupos: os de tipo I e tipo II (GRIGORIEVA; SCHMIDT, 1997). Os do tipo I foram os primeiros materiais supercondutores encontrados, geralmente possuem baixas temperaturas críticas ( $T_c$ ) e, com um campo magnético aplicado forte o suficiente ( $H_c$ ), o estado supercondutor tende à se extinguir (estado Normal). Estas características podem ser verificadas no diagrama da esquerda na Figura 16 para o Mercúrio. Alguns exemplos de materiais supercondutores do tipo I são Mercúrio e Chumbo (BISWAL; MOHANTA, 2021). Da mesma forma, os materiais do tipo II apresentam o estado SC, onde abaixo de um  $T_c$  e  $H_{c1}$  exibem o efeito Meissner. Entretanto, para um campo externo  $H_{c1} < H < H_{c2}$  o material exibe um fase mista, composta pela fase SC mais a fase Normal. Desta maneira, parte do campo externo adentra no material. Além disso, para  $H > H_{c2}$  e  $T > T_c$  o material exibe a fase Normal, como pode ser verificado pelo diagrama da direita na Figura 16. Nestes, outro diferencial são as temperaturas de transição ( $T_c$ ) mais altas (como mostra a Fig. 16 para o Nióbio-estanho), o que os tornam uma opção mais vantajosa para a elaboração de equipamentos tecnológicos. Entre os materiais supercondutores do tipo II, destacam-se as ligas metálicas de Nióbio (ZENG et al., 2021), bem como as cerâmicas de alto  $T_c$  baseadas em óxido de cobre como YBaCuO e BiSrCaCuO (TOPAL; AKDOGAN, 2010; MASSALKER; SEMBIRA; BARAM, 1993).

Do ponto de vista teórico, explicar a supercondutividade tem sido até o presente momento um grande desafio. Os supercondutores de tipo II ainda não possuem uma teoria bem formulada que os possa descrever por completo. Entretanto, para os tipo I há uma teoria muito bem sucedida, a teoria BCS. A teoria BCS, criada por BARDEEN; COOPER; SCHRIEFFER em 1957, explica de forma microscópica a supercondutividade. Com o avanço das pesquisas, desencadeado pelo desenvolvimento da bomba atômica, foi possível a obtenção de amostras compostas por um único isótopo supercondutor, como o mercúrio ( $Hg^x$ , ( $x = 199,7, 200,7, 202, 203,4$ )) (REYNOLDS et al., 1950). Com isso, foi

Figura 16 – Diagrama de fase  $H$  vs  $T$  dos supercondutores tipo I (Mercúrio) e tipo II (Nióbio-estanho).  $H_c$  marca o campo crítico de transição Super./Norm. para o tipo I. Os campos críticos  $H_{c1}$  e  $H_{c2}$  marcam as transições Super./Mist. e Mist./Norm. sucessivamente para o tipo II.  $T_c$  marca a transição para o estado Normal.



Fonte: Releitura de Rohlf (1994).

descoberta uma dependência da  $T_c$  que apontava para um mecanismo acionado por fônons. Assim, Bardeen percebeu que os fônons da rede induziam uma interação atrativa entre dois elétrons próximos, formando os chamados pares de Cooper. Basicamente, a teoria BCS sugere que, nessa configuração, os pares de elétrons a princípio não mais precisariam obedecer o princípio da estatística de Fermi-Dirac (HOTT et al., 2016; SALINAS, 2013), em que os elétrons são obrigados a ocupar estados de partícula única seguindo o princípio de exclusão de Pauli. Entretanto, na teoria proposta, a energia que liga os pares conduz a um estado quântico macroscópico de partícula única com dois elétrons de spin opostos. Como consequência, o princípio de exclusão de Pauli é respeitado (HOTT et al., 2016).

Do ponto de vista de modelo, a teoria BCS descreve a atração entre dois elétrons de spins opostos no espaço de momento. Entretanto, trabalhar no espaço de momento é de extrema complexidade, em função do tratamento quântico no espaço recíproco (FRIEDEL; NOGUERA, 1983). Com isso, formular o pareamento em um espaço de órbitas localizadas e analisar o problema em um contexto magnético torna o problema mais solúvel (PENSON; KOLB, 1986). Neste contexto, o potencial atrativo, correspondente ao pareamento, é escrito na linguagem da segunda quantização, dada pelos operadores de destruição e criação, sendo ele

$$\hat{V}_{ij} = c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\uparrow}. \quad (3.47)$$

Este potencial atua em um estado de Fock<sup>3</sup>, onde o sítio pode ser encontrado nos estados de ocupado ( $\uparrow$  ou  $\downarrow$ ), duplamente ocupado ( $\uparrow\downarrow$ ) e vazio. Assim, o potencial agrega um

<sup>3</sup> Um estado quântico no espaço de Fock, que é um espaço de Hilbert com um número variado de partículas (FETTER; WALECKA; PHYSICS, 2003).

valor energético para sítios  $i, j$  duplamente ocupado e vazio, podendo assim ser usado em modelos de rede.

### 3.2.1 Formulação fermiônica

Para a análise da formação de pares, um modelo fermiônico pode ser utilizado. No formalismo proposto, os observáveis são representados como operadores. Neste contexto, o operador de spin atua sobre um espaço de quatro estados por sítio, dois deles magnéticos, um com spin  $\uparrow$  e outro com spin  $\downarrow$ , bem como dois estados não magnéticos, um duplamente ocupado e outro vazio. Na formulação fermiônica, o operador de spin é dado por

$$\hat{S}_i^z = \hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}, \quad (3.48)$$

onde o  $\hat{n}_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  é o operador número de ocupação, tendo valores de 0 ou 1 e  $c_{i\sigma}^\dagger$  ( $c_{i\sigma}$ ) os operadores de criação (destruição) de Fermi, com  $\sigma = \uparrow$  ou  $\downarrow$  indicando a projeção do spin. Assim, temos a introdução de quatro estados quânticos para um sítio, sendo estes  $|--\rangle$ ,  $|- \uparrow\rangle$ ,  $|\downarrow -\rangle$  e  $|\downarrow \uparrow\rangle$ . Estes operadores de criação e destruição são peças chave para comportar a formação de pares. Este formalismo é descrito seguindo a segunda quantização no espaço de Fock, com mais informações sobre estes tópicos no Apêndice A.

## 3.3 Conexão entre frustração e supercondutividade

Particularmente interessantes são os resultados obtidos a partir da possível combinação desses dois fenômenos, tanto do ponto de vista experimental quanto teórico. Experimentalmente, a frustração pode levar ao surgimento de competição das fases VS/SC em certos sistemas supercondutores (DAVIDOV et al., 1977; KUMAR; TANDON; AWANA, 2011).

Além disso, uma frustração geométrica controlável, altamente degenerada, foi incorporada em um sistema bidimensional de fluxo quantizado, conforme demonstrado na Ref. (WANG et al., 2018). Este efeito é produzido ao se colocar uma estrutura reconfigurável de gelo de spin artificial sobre um filme fino supercondutor. Em particular, as estruturas reconfiguráveis são arranjos de barras de magnetos em nanoescala que simulam e/ou imitam o comportamento de materiais magnéticos que naturalmente apresentam frustração (WANG et al., 2016). Neste contexto, as cargas magnéticas ajustáveis na estrutura de gelo de spin artificial interagem fortemente com o fluxo quantizado no supercondutor. Neste contexto, é possível alternar entre estados frustrados e de fluxo quantizado, trazendo assim melhorias na aplicação destes supercondutores. No âmbito teórico, modelos com interações de alcance infinito em uma formulação fermiônica com formação de pares foram utilizados para investigar a competição VS/SC (MAGALHÃES; SCHMIDT, 2000). Mais recentemente, uma abordagem teórica sugeriu que a frustração geométrica poderia desempenhar um papel

importante no surgimento de um comportamento de alguns supercondutores (TINDALL et al., 2020). No estado fundamental, afirma-se haver uma assimetria elétron-buraco em que surge um cenário competitivo entre AF e dois tipos de fase SC. Por um lado, uma fase SC de onda  $d_{xy}$  é favorecida pela flutuação do spin AF no lado dopado. Por outro lado, a dopagem de elétrons aumenta a frustração geométrica e o grau de liberdade de carga, levando a uma fase SC de onda estendida  $d_{x^2-y^2}$  (SCALAPINO, 1995). Como observado, embora várias investigações e avanços tenham sido feitos na descrição de sistemas frustrados e supercondutores, um entendimento completo dos mecanismos subjacentes a esses fenômenos ainda permanece em aberto, principalmente sua competição.

Consequentemente, parece pertinente investigar melhor os fenômenos combinados de frustração e supercondutividade. Para realizar esta tarefa, propõe-se o estudo do modelo de Ising fermiônico frustrado em um referencial teórico. Este modelo teórico pode combinar as características mencionadas anteriormente: frustração e um acoplamento de interação de pares. Basicamente, uma frustração é adicionada através de uma geometria com interações competitivas de curto alcance, onde os acoplamentos magnéticos podem ser distinguidos entre os spins. Além disso, a formação de pares de Cooper pode ser introduzida através dos estados não magnéticos derivados de um acoplamento de interação de pares quânticos. Essencialmente, isto significa adicionar um termo energético ao Hamiltoniano, o qual atua na redistribuição dos momentos magnéticos. Por exemplo, em um sítio duplamente ocupado próximo a um sítio vizinho vazio recebe um favorecimento energético. Nesse contexto, os operadores de criação e destruição são usados para representar essa interação, juntamente com uma variável de controle  $g$ .

Para isso, o uso de uma abordagem fermiônica no modelo  $J_1 - J_2$  é utilizado para tal investigação. Pela introdução de estados de dupla ocupação, não previstos na contra-parte clássica, o modelo prevê um termo de interação de pares. Este é um mecanismo que favorece dupla ocupação de sítios em um contexto de pares de spin, onde a variável de controle  $g$  se fará presente para regular este pareamento. Além da relevância em relação à criticidade, o estudo de um modelo  $J_1 - J_2$  com um mecanismo de pareamento também pode fornecer uma primeira visão sobre as características fundamentais de sistemas frustrados com assinaturas de supercondutividade. A seguir, as etapas de caracterização do modelo, a passagem deste para uma formulação fermiônica, bem como uma discussão acerca do termo de formação de pares são apresentadas.

## 4 Modelo fermiônico frustrado $J_1 - J_2$

Como vimos anteriormente, para o modelo frustrado  $J_1 - J_2$  comportar o termo de pareamento BCS (seção 3.2), este deve ser escrito em um formalismo fermiônico. Com isso, o modelo  $J_1 - J_2$  pode ser escrito na formulação fermiônica da forma

$$\hat{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z, \quad (4.1)$$

onde  $\hat{H}$  é o operador hamiltoniano do modelo. Os termos seguem o tratamento da frustração considerando agora operadores de spin, onde a não comutatividade deve ser levada em conta nos próximos cálculos. Como é possível perceber a seguir, o espaço de fase do modelo quântico é maior que do modelo clássico. Basicamente, a formulação clássica com duas configurações possíveis para os sítios, dá lugar a fermiônica, em que quatro configurações são possíveis, conforme apresentado na Seção 3.2.1. Como consequência no incremento do espaço de fase, alterações podem ser vistas nos comportamentos dos parâmetros de ordem, como da magnetização, nas transições de fase e temperaturas críticas. Tais mudanças podem ser vistas nos resultados presentes da Seção 6.3, em que um comparativo entre formulações é realizado.

Para resolução do modelo fermiônico, da mesma forma que no caso clássico, os métodos variacional e de campo médio devem ser utilizados em conjunto, tal que o hamiltoniano do cluster é dado por

$$\hat{\mathcal{H}}_c^0 = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle_c^0} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle_c^0} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \sum_{i=1}^n h_i \hat{S}_i^z, \quad (4.2)$$

onde o termo  $h_i$  é o campo auxiliar do método variacional. Similarmente ao como visto na seção 3.1.2, a função de partição pode ser aproximada da forma

$$Z \approx Z_c^0 e^{-\beta \langle E_c - E_c^0 \rangle_0}. \quad (4.3)$$

Entretanto, algumas considerações adicionais a este cálculo devem ser feitas para o formalismo fermiônico. Como mostra [Kellermann \(2019\)](#), a utilização da transformação de Suzuki-Trotter ([SUZUKI, 1985](#)) deve ser utilizada para tratamento da inequação de Bogolubov ([BOGOLUBOV, 2010](#)). Pela transformação de Suzuki-Trotter, o problema da não comutatividade pode ser contornado. Essencialmente,

$$e^{-\beta \hat{H}} = e^{-\beta(\hat{H}_0 + a\hat{H}_1)} \neq e^{-\beta \hat{H}_0} e^{-\beta a \hat{H}_1}, \quad [\hat{H}_0, \hat{H}_1] \neq 0, \quad (4.4)$$

onde  $\hat{H}$  é um hamiltoniano composto por dois termos que não comutam ( $\hat{H}_0$  e  $\hat{H}_1$ ), sendo  $a$  uma constante arbitrária). Em adição, a solução pelo fatiamento da exponencial, chamada

de decomposição de Trotter, pode ser verificada da forma

$$e^{-\beta\hat{H}} = e^{-\beta(\hat{H}_0+a\hat{H}_1)} = \prod_{l=1}^L e^{-\Delta(\hat{H}_0+a\hat{H}_1)}, \quad (4.5)$$

$$e^{-\Delta(\hat{H}_0+a\hat{H}_1)} = e^{-\Delta\hat{H}_0}e^{-\Delta a\hat{H}_1} + \mathcal{O}(\Delta^2), \quad (4.6)$$

com  $\Delta = \beta/L$  e  $L \rightarrow \infty$ . A partir das considerações apontadas, a inequação de Bogoliubov (método variacional de Bogoliubov) é considerada válida quando o espaço de tempo imaginário ( $\tau_n = (n-1)\Delta$ ) é utilizado. Aplicando as derivações na forma

$$\frac{d}{da}e^{-\beta(\hat{H}_0+a\hat{H}_1)} = \lim_{L \rightarrow \infty} \Delta a \sum_{n=1}^L e^{-\tau_n(\hat{H}_0+a\hat{H}_1)} \hat{H}_1 e^{-(\beta-\tau_n)(\hat{H}_0+a\hat{H}_1)} \quad (4.7)$$

$$= a \int_0^\beta d\tau \hat{H}_1(\tau) e^{-\beta(\hat{H}_0+a\hat{H}_1)}, \quad (4.8)$$

sendo  $\hat{H}_1(\tau)$  correspondente a evolução temporal do operador  $\hat{H}_1$  na representação de Heisenberg no tempo imaginário, como mostra a equação

$$\hat{H}_1(\tau) = e^{-\tau(\hat{H}_0+a\hat{H}_1)} \hat{H}_1 e^{\tau(\hat{H}_0+a\hat{H}_1)} = e^{-\tau\hat{H}} \hat{H}_1 e^{\tau\hat{H}}. \quad (4.9)$$

Consequentemente, a inequação de Bogolubov pode ser escrita na forma quântica

$$F \leq F^* = F^0 + \langle \hat{H} - \hat{\mathcal{H}}^0 \rangle_0. \quad (4.10)$$

Aplicando a inequação para o respectivo modelo com clusters é possível determinar e detalhar a energia livre de um único cluster. Logo, a energia livre para o modelo se torna

$$F_c(T, J_1, J_2, h) = -\beta^{-1} \ln Z_c^0 + \frac{1}{2} \sum_{(i,j)'} J_{ij} m_i m_j + \sum_{i=1}^n h_i m_i, \quad (4.11)$$

sendo o primeiro termo a função de partição do cluster (calculada exatamente),  $J_{ij}$  o termo referente as interações  $J_1$  e  $J_2$ . Por fim, o simbolo  $(i, j)'$  indica soma somente para  $i$  e  $j$  de clusters diferentes. Ademais,  $m_i = \langle \hat{S}_i^z \rangle_0$  é dado por

$$m_j = \frac{1}{Z_c^0} \sum_i \langle i | \hat{S}_j^z | i \rangle e^{-\beta E_i^0}, \quad (4.12)$$

onde  $E_i^0$  é o autovalor corresponde a energia do  $i$ -ésimo estado do sistema.

Como a energia livre é função de  $h$ , existem valores para  $h$  que minimizam a energia livre. Desse modo, o método de ponto de sela pode ser utilizado da forma

$$\beta^{-1} \frac{\partial F_c}{\partial h_k} = 0. \quad (4.13)$$

Lembrando que

$$\beta^{-1} \frac{\partial m_j}{\partial h_k} = \frac{1}{\beta Z_c^0} \sum_i \langle i | \hat{S}_j^z | i \rangle \frac{\partial e^{-\beta E_i^0}}{\partial h_k} + \frac{1}{\beta} \frac{\partial (Z_c^0)^{-1}}{\partial h_k} \sum_i \langle i | \hat{S}_j^z | i \rangle e^{-\beta E_i^0} \quad (4.14)$$

$$= \frac{1}{Z_c^0} \sum_i \langle i | \hat{S}_j^z \hat{S}_k^z | i \rangle e^{-\beta E_i^0} - m_j \frac{1}{Z_c^0} \sum_i \langle i | \hat{S}_k^z | i \rangle e^{-\beta E_i^0} \quad (4.15)$$

$$= \langle \hat{S}_j^z \hat{S}_k^z \rangle_0 - m_j m_k. \quad (4.16)$$

Por fim, aplicando o método de ponto de sela temos

$$\beta^{-1} \frac{\partial F_c}{\partial h_k} = -\frac{1}{\beta^2 Z_c^0} \frac{\partial Z_c^0}{\partial h_k} + \frac{1}{2} \sum_{(i,j)'} J_{ij} \left( \langle \hat{S}_i^z \hat{S}_k^z \rangle m_j + m_i \langle \hat{S}_j^z \hat{S}_k^z \rangle - 2m_i m_j m_k \right) \quad (4.17)$$

$$+ \beta^{-1} m_k + \sum_{i=1}^n h_i \left( \langle \hat{S}_i^z \hat{S}_k^z \rangle_0 - m_i m_k \right) \quad (4.18)$$

$$= \sum_{i=1}^n \left( h_i + \sum_{(j)'} J_{ij} m_j \right) \left[ \langle \hat{S}_i^z \hat{S}_k^z \rangle_0 - m_i m_k \right] = 0. \quad (4.19)$$

Com isso, a função auto-consistente de  $h$  se torna

$$h_i = - \sum_{(j)'} J_{ij} m_j. \quad (4.20)$$

Por meio dos métodos numéricos empregados (ver Capítulo 5), é possível o cálculo dos parâmetros de ordem  $m$  e  $h$ , bem como da energia livre, para diferentes valores de temperatura ( $T$ ) e frustração ( $J_2/J_1$ ). No próximo capítulo, as técnicas discutidas nesta seção serão empregadas para apresentação e resolução dos modelos propostos.

Na próxima seção, é realizado o estudo de dois modelos. Em primeiro momento, somente o papel das interações de pareamento intracluster foi investigado, por meio do modelo fermiônico frustrado  $J_1 - J_2$  em presença de clusters com interação BCS local. Em tal cenário, é deixado de fora o pareamento interclusters. Nessa proposição, as flutuações quânticas introduzidas no modelo de Ising fermiônico  $J_1 - J_2$  pelas interações de pareamento são incorporadas exatamente em nossos cálculos. Este pareamento de clusters é uma primeira tentativa de explicar uma dinâmica quântica relativa a graus de liberdade adicionais. Em outras palavras, o modelo de Ising  $J_1 - J_2$  apresenta uma dinâmica clássica, resolvida em caráter de campo médio de cluster, enquanto as interações de pareamento intracluster introduzem efeitos quânticos que são totalmente incorporados pela diagonalização exata. Acreditamos que a presente abordagem de cluster nos permite levar em conta os efeitos relevantes de uma redistribuição de carga local nas transições de fase magnéticas.

Para o segundo caso, que será investigado posteriormente, as interações de pareamento intercluster são incluídas pelo modelo fermiônico frustrado  $J_1 - J_2$  com interação BCS. Nesse sentido, novos parâmetros de ordem são acrescentados e os cálculos analíticos para este modelo são apresentados. Essencialmente, o termo de interação BCS ocorre também entre clusters. Como resultado, o mapeamento de uma nova fase de caráter não magnético se faz presente no modelo. É importante salientar que no modelo BCS local, verifica-se um cenário propício para surgimento desta nova fase, como mostram os resultados da Seção 6.4. Em essência, o campo médio no contexto de formação de pares não é considerado no BCS local. Por outro lado, quando são assumidas as contribuições de campo médio para os efeitos de pareamento via termo BCS, abre-se possibilidade de investigação desta nova ordem de caráter quântico.

## 4.1 Modelo fermiônico frustrado $J_1 - J_2$ em presença de clusters com interação BCS local

Para comportar o favorecimento da formação de pares, um termo energético deve ser adicionado ao Hamiltoniano. Desde modo, podemos dizer que quando um sítio duplamente ocupado está próximo de um sítio vizinho não ocupado, ocorre um favorecimento energético que permite o deslocamento desta dupla ocupação. Conseqüentemente, os estados com par e buraco, sendo estes primeiros vizinhos, recebem um ganho energético favorecendo os estados duplamente ocupados e vazios do sistema. Com isso, utilizamos os operadores de criação e destruição para representar tal interação, juntamente com uma variável de controle  $g$  que fornece o peso desta. Dessa forma, o hamiltoniano para o modelo de Ising frustrado  $J_1 - J_2$  com formação de pares local é dado por

$$\hat{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - g \sum_{\langle i,j \rangle^0} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\uparrow}, \quad (4.21)$$

onde os dois primeiros termos são referentes a interações de cunho magnético, com a presença de frustração, seguido do terceiro termo que propícia a formação de pares localmente no cluster, possibilitando um ganho energético para os estados não magnéticos. Com este termo de formação de pares local e o formalismo fermiônico, será possível uma primeira análise dos efeitos combinados da frustração e formação de pares.

Usando a mesma metodologia da seção 3.2.1 é possível resolver o modelo  $J_1 - J_2$  fermiônico com BCS local, onde o hamiltoniano do cluster é dado por

$$\hat{\mathcal{H}}_c^0 = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle_c^0} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle_c^0} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \sum_{i=1}^n h_i \hat{S}_i^z - g \sum_{\langle i,j \rangle_c^0} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\uparrow}, \quad (4.22)$$

sendo os dois primeiros termos referentes as interações magnéticas  $J_1 - J_2$ , seguidos do campo auxiliar  $h$  e do termo de formação de pares local. Entretanto, alguns métodos devem ser adicionados para resolver o modelo. Primeiramente, em função da matriz hamiltoniana possuir termos fora da diagonal (termo de pareamento) a matriz deve ser diagonalizada (capítulo 5) para obtenção dos seus autovalores e autovetores pela forma

$$\mathbf{P}^{-1} \mathcal{H}_c^0 \mathbf{P} = \mathbf{E}, \quad (4.23)$$

sendo  $\mathbf{P}$  o autovetor da matriz  $\mathcal{H}_c^0$  e  $\mathbf{E}$  os seus autovalores. Com isso, os observáveis devem sofrer uma mudança de base para a nova base de energia. Logo, a matriz do operador  $\hat{S}_k^z$ , que opera no sítio  $i$ , é escrita por

$$S_{ij}^k = \langle i | \hat{S}_k^z | j \rangle, \quad (4.24)$$

e deve ser reescrita utilizando os autovetores  $P$ , resultando em

$$\bar{\mathbf{S}}^k = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{S}^k \mathbf{P}. \quad (4.25)$$

Por fim, o parâmetro de ordem da magnetização ( $m$ ) e outros parâmetros são escritos seguindo a forma

$$m_j = \frac{1}{Z_c^0} \sum_i \bar{S}_{ii}^j e^{-\beta E_{ii}}. \quad (4.26)$$

Considerando um cluster quadrado composto por 4 sítios ( $n = 4$ ), é possível reescrever a energia livre de Helmholtz pela equação (4.11) e incorporar o valor autoconsistente de  $h$  da equação (4.20), tomando como referência o esquema da rede na figura 14. Com isso, os valores para  $h$  ficam

$$h_1 = -J_1(m_2 + m_4) - 3J_2m_3, \quad (4.27)$$

$$h_2 = -J_1(m_1 + m_3) - 3J_2m_4, \quad (4.28)$$

$$h_3 = -J_1(m_2 + m_4) - 3J_2m_1, \quad (4.29)$$

$$h_4 = -J_1(m_1 + m_3) - 3J_2m_2. \quad (4.30)$$

Consequentemente, considerando os valores de  $h$ , a energia livre é escrita da forma

$$F_c(T, J_1, J_2, g, h) = F_c^0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 h_i m_i \quad (4.31)$$

$$F_c(T, J_1, J_2, g, h) \rightarrow F_c(T, J_1, J_2, g) = -\beta^{-1} \ln Z_c^0 - J_1(m_1 + m_3)(m_2 + m_4) - 3J_2(m_1m_3 + m_2m_4). \quad (4.32)$$

Com  $F_c$  sendo escrita em função da magnetização. Por meio dos métodos numéricos empregados, é possível a obtenção do comportamento dos parâmetros de ordem e da energia livre para determinar as fases e transições do sistema. Em relação ao tamanho do cluster na formulação proposta, a escolha mencionada se deve a questões computacionais e de possibilidade de comparativos com limites existentes (vide modelo clássico). Tais pontos serão melhor discutidos nas próximas seções.

## 4.2 Modelo fermiônico frustrado $J_1 - J_2$ com interação BCS

Aplicando o pareamento BCS sobre todo o sistema, não somente localmente como foi mostrado na Seção 4.1, é possível mapear uma ordem de par/buraco no sistema a partir de novos parâmetros de ordem. Neste caso, o hamiltoniano é dado por

$$\hat{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - g \sum_{\langle i,j \rangle} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\uparrow}, \quad (4.33)$$

onde os dois primeiro termos são referentes ao modelo  $J_1 - J_2$  e o terceiro termo é o pareamento BCS de primeiros vizinhos, ocorrendo agora sobre todo o sistema, não somente como termo intra-cluster ( $\langle\langle i,j \rangle\rangle^0 \rightarrow \langle i,j \rangle$ ).

Pelo método variacional, com o termo BCS atuando sobre todo o sistema, é necessário a inclusão de novos campos auxiliares  $\nu$  e  $\nu^\dagger$ . Com isso, o hamiltoniano do cluster toma forma

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_c^0 &= J_1 \sum_{\langle i,j \rangle_c^0} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle_c^0} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - g \sum_{\langle i,j \rangle_c^0} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} \\ &\quad - \sum_{i=1}^n h_i \hat{S}_i^z - \sum_{i=1}^n \left( \nu_i^\dagger c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + \nu_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \right). \end{aligned} \quad (4.34)$$

Na eq. 4.34, os três primeiros termos são referentes as interações intra-cluster, seguidos dos termos de campo auxiliar das interações tanto de spin, quanto par/buraco e buraco/par.

Utilizando da metodologia empregada na seção 4.1 é possível resolver o modelo, mesmo com os novos campos auxiliares. Consequentemente, a energia livre do cluster não minimizada é

$$\begin{aligned} F_c(T, J_{ij}, g, h, \nu, \nu^\dagger) &= F_c^0 + \langle \hat{H}_c - \hat{\mathcal{H}}_c^0 \rangle_0 \\ &= F_c^0 + \frac{1}{2} \sum_{(ij)'} J_{ij} \langle \hat{S}_i^z \rangle_0 \langle \hat{S}_j^z \rangle_0 - \frac{g}{2} \sum_{\langle i,j \rangle'} \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle_0 \langle c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} \rangle_0 \\ &\quad + \sum_{i=1}^n h_i \langle \hat{S}_i^z \rangle_0 + \sum_{i=1}^n \left[ \nu_i^\dagger \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle_0 + \nu_i \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle_0 \right], \end{aligned} \quad (4.35)$$

sendo o primeiro termo  $F_c^0 = \beta^{-1} \ln Z_c^0$ , seguido das interações de spin e par/buraco inter-cluster ( $J_{ij}$  e  $g$ ), finalizando com os campos auxiliares ( $h_i$ ,  $\nu_i$  e  $\nu_i^\dagger$ ).

A fim de minimizar a energia livre, o método de ponto de sela aplicado na energia livre em função dos campos auxiliares da forma

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial F_c}{\partial h_k} = 0, \quad \frac{1}{\beta} \frac{\partial F_c}{\partial \nu_k} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{1}{\beta} \frac{\partial F_c}{\partial \nu_k^\dagger} = 0, \quad (4.36)$$

é utilizado. Com a minimização, os campos auxiliares são substituídos pelas suas funções autoconsistentes. Consequentemente, a energia livre passa a não ter uma dependência explícita dos campos auxiliares, se tornando

$$F_c(T, J_{ij}, g, h, \nu, \nu^\dagger) \xrightarrow{\text{min}} F_c(T, J_{ij}, g). \quad (4.37)$$

Sabendo que as seguintes derivações são da forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle_0}{\partial h_k} &= \beta \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \hat{S}_k^z \rangle_0 - \beta \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle_0 \langle \hat{S}_k^z \rangle_0 \\ &= \beta \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle_0 \langle \hat{S}_k^z \rangle_0 - \beta \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle_0 \langle \hat{S}_k^z \rangle_0 = 0, \end{aligned} \quad (4.38)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle_0}{\partial h_k} &= \beta \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \hat{S}_k^z \rangle_0 - \beta \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle_0 \langle \hat{S}_k^z \rangle_0 \\ &= \beta \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle_0 \langle \hat{S}_k^z \rangle_0 - \beta \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle_0 \langle \hat{S}_k^z \rangle_0 = 0, \end{aligned} \quad (4.39)$$

podemos perceber que pela derivação de  $F_c$  em relação a  $h_k$ , retornamos ao mesmo resultado obtido na seção 4.1 com

$$h_i = - \sum_{(j)'} J_{ij} m_j. \quad (4.40)$$

Para as derivações em função de  $\nu$  e  $\nu^\dagger$ , as seguintes derivações são aplicadas

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_c^0}{\partial \nu_k} &= - \frac{1}{\beta Z_c^0} \frac{\partial Z_c^0}{\partial \nu_k} \\ &= - \frac{1}{Z_c^0} \text{Tr} [c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger e^{-\beta E_c^0}] \\ &= - \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \rangle_0, \end{aligned} \quad (4.41)$$

$$\frac{\partial \langle \hat{S}_i^z \rangle_0}{\partial \nu_k} = \beta \langle \hat{S}_i^z \rangle_0 \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \rangle_0 - \beta \langle \hat{S}_i^z \rangle_0 \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \rangle_0 = 0, \quad (4.42)$$

$$\frac{\partial \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle_0}{\partial \nu_k} = \beta \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \rangle_0 - \beta \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle_0 \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \rangle_0, \quad (4.43)$$

$$\frac{\partial \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle_0}{\partial \nu_k} = \beta \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \rangle_0 - \beta \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle_0 \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \rangle_0. \quad (4.44)$$

Aplicando agora o método de ponto de sela para  $\nu$  e  $\nu^\dagger$ , obtemos o resultado

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \frac{\partial F_c}{\partial \nu_k} &= -g \sum_{\langle i, j' \rangle} [\langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \rangle_0 - \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle_0 \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \rangle_0] \langle c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} \rangle_0 \\ &\quad -g \sum_{\langle i, j' \rangle} \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle_0 [\langle c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \rangle_0 - \langle c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} \rangle_0 \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \rangle_0] \\ &\quad + \sum_{i=1}^n \left\{ \nu_i^\dagger [\langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \rangle_0 - \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle_0 \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \rangle_0] \right\} \\ &\quad + \sum_{i=1}^n \left\{ \nu_i [\langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \rangle_0 - \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle_0 \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \rangle_0] \right\} \\ &= \sum_{i=1}^n [\langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \rangle_0 - \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle_0 \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \rangle_0] \left( \nu_i - g \sum_{j'} \langle c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} \rangle_0 \right) \\ &\quad + \sum_{i=1}^n [\langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \rangle_0 - \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle_0 \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \rangle_0] \left( \nu_i^\dagger - g \sum_{j'} \langle c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \rangle_0 \right) = 0. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Com isso, os campos auxiliares  $\nu$  e  $\nu^\dagger$  são funções autoconsistentes dadas por

$$\nu_i = g \sum_{j'} \langle c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} \rangle_0, \quad (4.46)$$

$$\nu_i^\dagger = g \sum_{j'} \langle c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \rangle_0. \quad (4.47)$$

Aplicando os valores para os campos auxiliares e minimizando a energia livre, obtemos que a energia livre minimizada é

$$F_c = F_c^0 + \frac{1}{2} \sum_i h_i \langle \hat{S}_i^z \rangle_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (\nu_i^\dagger \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle_0 + \nu_i \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle_0). \quad (4.48)$$

Ademais, um comparativo entre formulações clássica e fermiônica, bem como resultados para os modelos fermiônicos frustrados  $J_1 - J_2$  com BCS local e  $J_1 - J_2$  com BCS mencionados nesta seção, são apresentados no Capítulo 6.

## 5 Métodos numéricos

A grande dificuldade com modelos que possuem frustração é a realização dos cálculos da Mecânica Estatística. Métodos de Monte Carlo têm sido empregados neste tipo de problema com bons resultados (JIN et al., 2013), consumindo alto recurso computacional no entanto. Alternativamente, conforme mencionado em sessões prévias, a frustração pode ser estudada via tratamentos analíticos. Especificamente para esta proposta, a frustração é analisada via modelo  $J_1 - J_2$  em teoria de campo médio com cluster. Em essência, o método que não necessita de alto poder computacional e apresenta uma grande confiabilidade para sistemas pequenos (número de sítios:  $n < 20$ ). Este tem como importante característica ser um método de solução exata no cluster. Em outras palavras, através do método variacional e teoria de campo médio (mencionados na Seção 3.1.2 e no Capítulo 4), somente os termos intra-cluster ( $\hat{H}_c^0$ ) são dados de forma exata. Desta forma, o método de solução exata é aplicado sobre o cluster, com campos auxiliares sendo introduzidos para a aproximação de campo médio. No cenário computacional, as demandas a seguir são necessárias para o problema sugerido. A partir do tratamento analítico para frustração proposto, são obtidas equações auto consistentes que só possuem solução numérica. Mais importante, como os cálculos de média e da função de partição são feitos exatamente no cluster, todos os estados acessíveis do sistema devem ser conhecidos, e uma forma de realizar este levantamento é a partir do emprego do método de contagem por *bits*.

O método de contagem por *bits* é uma maneira de representar e contar os estados usando a representação de *bits*. Como estamos em um espaço de fase onde cada sítio pode ter valores de  $\pm 1$  ( $\uparrow\downarrow$ ) do formalismo clássico ou  $\pm 1$  e 0 do formalismo fermiônico, os *bits* 0 ou 1 podem ser usados para a sua representação. De igual modo, um *bit* 0 pode representar um estado +1 ( $\uparrow$ ) do sítio e um *bit* 1 pode representar um estado  $-1$  ( $\downarrow$ ) do sítio, no formalismo clássico.

Tabela 1 – Esquema da representação dos estados clássicos por *bits* para 2 sítios.

Autoestado ( $2^2 - 1$ )	Sítios(1, 2; $\uparrow\downarrow$ )	Sítios( <i>bits</i> )	Representação Numérica dos <i>bits</i>
0	$\uparrow, \uparrow$	0 0	0
1	$\uparrow, \downarrow$	0 1	1
2	$\downarrow, \uparrow$	1 0	2
3	$\downarrow, \downarrow$	1 1	3

A Tabela 1 mostra como é feita essa representação para 2 sítios clássicos, em que todos os estados são percorridos. Para este caso, temos  $2^n - 1$  como auto-estado máximo no formalismo de *bits*. Com isso, é possível calcular de forma exata a função de partição e qualquer valor médio pelo método de *bits*.

Tabela 2 – Esquema da representação dos estados fermiônicos por *bits* para 2 sítios.

Autoestado ( $4^2 - 1$ )	Sítios(1, 2; $\uparrow\downarrow -$ )	Sítios( <i>bits</i> )	Representação Numérica dos <i>bits</i>
$ 0\rangle$	--, --	0 0 0 0	0
$ 1\rangle$	--, - $\uparrow$	0 0 0 1	1
:	:	:	:
$ 14\rangle$	$\downarrow -$ , $\downarrow\uparrow$	0 1 1 1	14
$ 15\rangle$	$\downarrow\uparrow$ , $\downarrow\uparrow$	1 1 1 1	15

Para implementação do caso fermiônico, temos um espaço de fase que vai de  $2^n$  para  $4^n$ . Logo, dois *bits* são atribuídos para cada sítio, onde um *bit* é atribuído para uma ocupação *up* ( $\uparrow$ ) e outro para ocupação *down* ( $\downarrow$ ). Com isso, o espaço de fase no formalismo fermiônico de cada sítio fica  $(--, \uparrow -, - \downarrow, \uparrow\downarrow) = (00, 10, 01, 11)$ .

Pela Tabela 2 temos a representação dos autoestados para 2 sítios no formalismo fermiônico, em que podemos ver até 16 autoestados. Neste caso, é possível a construção dos operadores que podem medir e/ou operar o auto-estado do sistema, como por exemplo

$$c_1^\dagger |0\rangle = |1\rangle. \quad (5.1)$$

Deste modo, as matrizes podem ser construídas e operadas para calcular qualquer quantidade.

No contexto fermiônico, em função do parâmetro de ordem da magnetização ser uma função autoconsistente, há necessidade da diagonalização da matriz hamiltoniana e a troca para base de energia. Com a finalidade de resolver tais tarefas, os métodos numéricos discutidos a seguir foram empregados. Para resolver as funções autoconsistentes o método do ponto fixo é utilizado (BARROSO, 1987). Este consiste em um método iterativo para cálculo de zero de função onde, por meio de uma solução tentativa ( $x_0$ ), é possível determinar o zero da função

$$x_1 = f(x_0) \rightarrow x_2 = f(x_1) \rightarrow x_3 = f(x_2) \rightarrow \dots \rightarrow x_k = f(x_{k-1}). \quad (5.2)$$

Para as matrizes não diagonais, a diagonalização é feita de forma numérica utilizando a sub-rotina *dsyev*<sup>1</sup> da biblioteca *LAPACK*<sup>2</sup>. Assim, obtemos os autovalores e autovetores da matriz associada. Desta forma, é possível a troca de base dos parâmetros de ordem por meio da multiplicação das matrizes.

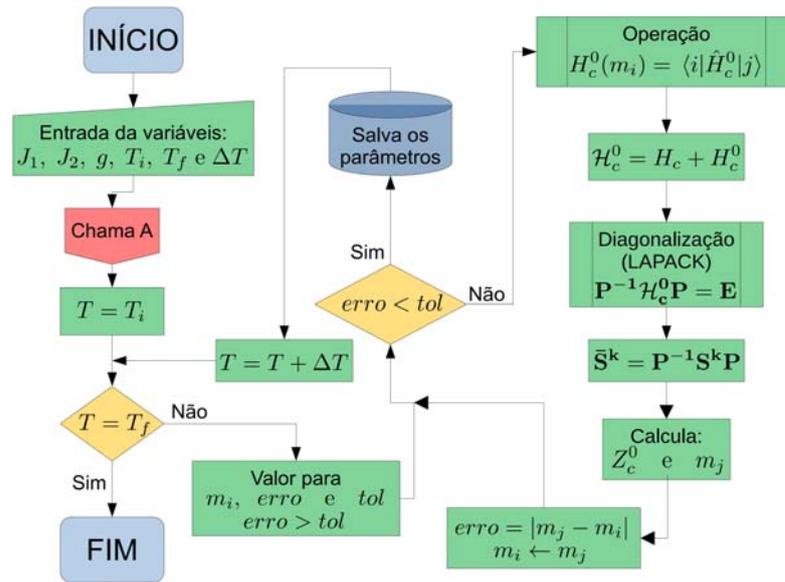
Os códigos foram escritos em linguagem *FORTTRAN* por meio de sub-rotinas dos métodos mencionados e rodados nos computadores do grupo GTCMC<sup>3</sup>.

<sup>1</sup> FONTE: <<http://www.netlib.org/lapack/explore-3.1.1-html/dsyev.f.html>>

<sup>2</sup> LAPACK: "*Linear Algebra Package*". Biblioteca de softwares numéricos de álgebra linear, de livre acesso.

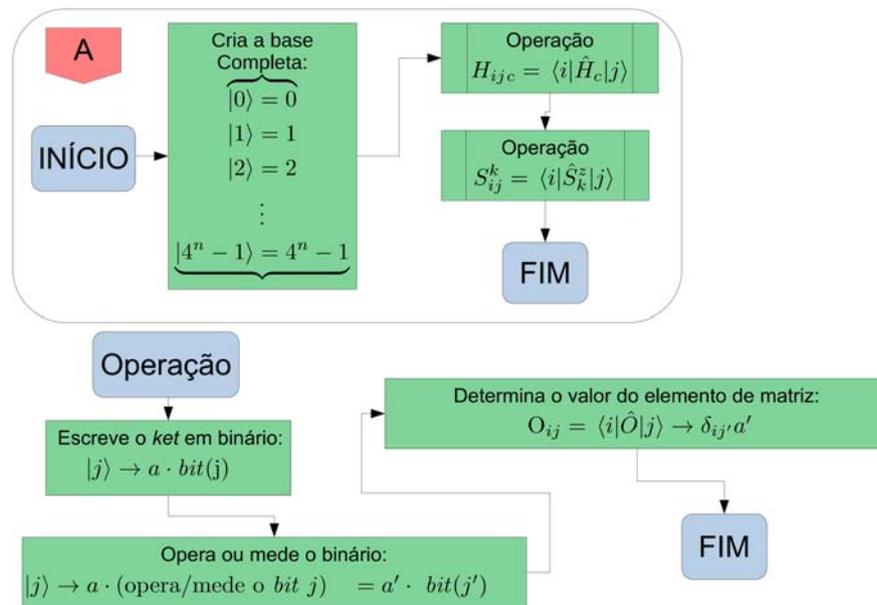
<sup>3</sup> Grupo Teórico-Computacional de Matéria Condensada - UFPel.

Figura 17 – Rotina para cálculo dos parâmetros em função de  $T$ .



Fonte: Arthur Krindges(2023)

Figura 18 – Sub-rotina de cálculo das matrizes.



Fonte: Arthur Krindges(2023)

Para um melhor entendimento dos métodos e processos computacionais utilizados, os fluxogramas das Figuras 17 e 18 são apresentados. No fluxograma da Figura 17, temos todo o algoritmo para o cálculo envolvendo o ciclo em  $T$ . Primeiramente, as variáveis de

entrada são fornecidas e a sub-rotina (Figura 18) é chamada. Nesta sub-rotina, a base é criada pelo método dos *bits* e as matrizes de  $\mathbf{H}_c$  e  $\mathbf{S}$  são confeccionadas usando a função Operação. A função Operação utiliza os *bits*, que forma a base, para obter os valores dos elementos das matrizes requeridas.

Com a sub-rotina finalizada o programa entra no ciclo de  $T$ , em que o método do ponto fixo é utilizado para obtenção e armazenamento dos parâmetros. O ciclo é iniciado com um valor tentativa para os parâmetros, encerrando o método do ponto fixo em seguida. Dentro do método do ponto fixo, com base no valor inicial dado, a matriz de  $\mathbf{H}_c^0$  é construída por meio da função Operação. Em seguida, as matrizes hamiltonianas são incorporadas em uma única matriz que é diagonalizada pela função da biblioteca *LAPACK*. Com a diagonalização, os auto-vetores fazem a mudança de base na matriz  $\mathbf{S}$  e então as quantidades termodinâmicas são determinadas. Caso os parâmetros calculados não sejam iguais aos valores iniciais, o método do ponto fixo é reiniciado, e os parâmetros calculados se tornam os valores iniciais.

Quando a condição do método de ponto fixo é satisfeita, o programa continua o ciclo em  $T$  armazenando os parâmetros e varrendo os próximos valores de  $T$ . Com o ciclo finalizado, o programa é encerrado e os diagramas podem ser construídos utilizando o banco de dados gerado pelo programa. Parte dos códigos utilizados podem ser encontrados no Apêndice C, onde são mostrados como os operadores atuam na base de *bits* e outras etapas, como por exemplo a subrotina de varredura de temperatura.

## 6 Resultados e Considerações

Aplicando os cálculos numéricos, vistos no capítulo 5, os parâmetros de ordem e as energias livres são obtidos para o modelo frustrado  $J_1 - J_2$ , tanto na abordagem clássica quanto fermiônica. Conseqüentemente, essas grandezas são analisadas e os diagramas de fase são construídos. Primeiramente, os resultados se concentram em comparar as abordagens clássica e fermiônica. Em segundo lugar, o parâmetro  $g$  é ativado, o que favorece a ocupação dupla. Como resultado, analisam-se os efeitos na redistribuição dos momentos magnéticos sobre a transição. Em particular, destaca-se que na abordagem numérica, um tamanho de cluster quadrado  $2 \times 2$  foi adotado. Esta dimensão foi considerada por questões computacionais acerca da implementação do formalismo fermiônico. Tal escolha propicia um comparativo com a literatura (JIN et al., 2013). Mais importante, para este tamanho de cluster, deve-se enfatizar que os estados não magnéticos incluídos na abordagem fermiônica aumentam a complexidade numérica quando comparados ao clássico, aumentando o espaço de fase e conseqüentemente o tempo computacional. Contudo, a presente proposta pode ser considerada uma primeira tentativa na adição de uma dinâmica quântica relacionada a graus de liberdade adicionais, tanto no contexto do pareamento BCS local (dentro do cluster) quanto BCS completo (dentro e fora do cluster).

### 6.1 Parâmetro de ordem

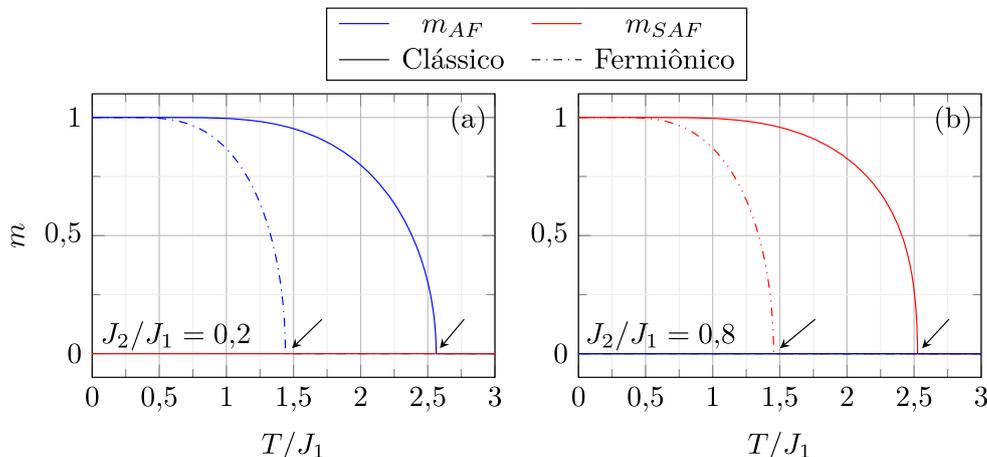
O comportamento do parâmetro de ordem  $m$  versus  $T/J_1$  para  $J_2/J_1 = 0,2$  e  $g/J_1 = 0$  para abordagens clássicas e fermiônicas é mostrado na Figura 19(a). Os valores escolhidos apontam para interações de primeiros vizinhos dominantes, correspondendo a um regime antiferromagnético ( $AF^1$ ). O resultado indica uma transição de fase AF/paramagnética (PM) de segunda ordem que passa de  $T_c = 2,65J_1$  no regime clássico para  $T_c = 1,44J_1$  no fermiônico. A partir da comparação, observa-se uma diminuição da temperatura crítica. Tal diminuição está relacionada à presença de um espaço de fase maior do formalismo fermiônico. Conseqüentemente, o peso probabilístico dos estados magnéticos no formalismo fermiônico acaba sendo menor que no clássico. Neste contexto, os parâmetros de ordem são mais suscetíveis ao aumento de  $T$  no caso fermiônico, com uma diminuição mais acentuada de  $m$  até  $T_c$ .

Com o aumento de  $J_2/J_1$  para  $J_2/J_1 = 0,8$ , temos a dominância das interações de segundos vizinhos, correspondendo a um regime super antiferromagnético ( $SAF^2$ ) que é analisado na Fig. 19(b). Nesta, o parâmetro de ordem  $m$  versus  $T/J_1$  nas abordagens

<sup>1</sup> Estado AF corresponde a  $m_{AF} = (m_1 - m_2 + m_3 - m_4)/4 \neq 0$ .

<sup>2</sup> Estado SAF corresponde a  $m_{SAF} = (m_1 + m_2 - m_3 - m_4)/4 \neq 0$ .

Figura 19 – Magnetizações  $m_{AF}$  e  $m_{SAF}$  em função de  $T/J_1$  do modelo clássico e fermiônico para  $J_2/J_1 = 0,2$  (a) e  $J_2/J_1 = 0,8$  (b). Setas indicam o ponto da transição de fase de segunda ordem.



Fonte: Arthur Krindges(2023)

clássicas e fermiônicas ( $g/J_1 = 0$ ) é analisado. O resultado mostra uma transição de fase SAF/PM de segunda ordem em  $T_c = 2,65J_1$  e  $T_c = 1,44J_1$  para os regimes clássico e fermiônico, respectivamente. Novamente, a mudança no  $T_c$  está relacionada com a presença de estados não magnéticos. Logo, o resultado mostra que o aumento do espaço de fase impacta tanto a fase AF quanto SAF.

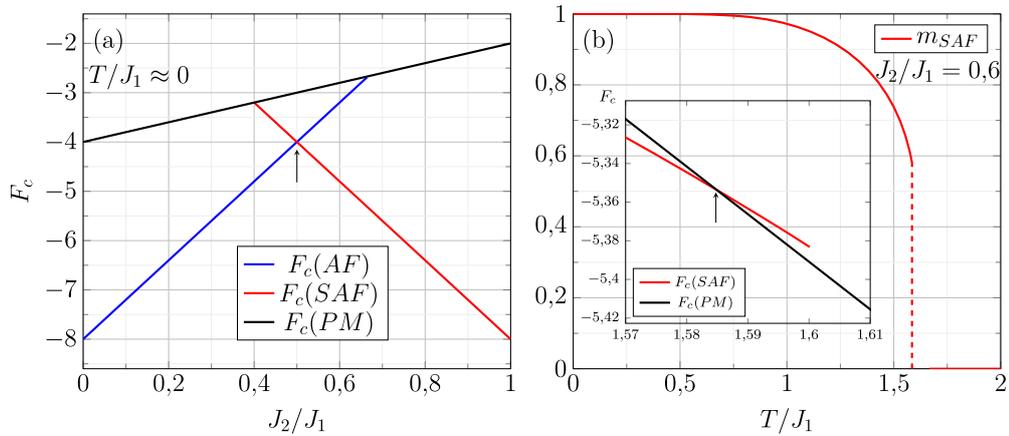
## 6.2 Energia livre e transições de primeira ordem

Na análise da frustração e formação de pares, existem os seguintes mecanismos competindo entre si: as flutuações térmicas impulsionadas pela temperatura, o regime de frustração por  $J_2/J_1$  e a redistribuição de cargas por  $g$  que contribui nos estados de dupla ocupação. Como resultado, um rico cenário termodinâmico pode ser encontrado. Por exemplo, abaixo de uma determinada temperatura, os parâmetros de ordem tornam-se descontínuos. Por conseguinte, para localizar as transições de primeira ordem, as energias livres das diferentes soluções obtidas no problema são equacionadas. Com isso, a transição de primeira ordem é marcada na intersecção destas soluções.

Equacionando as soluções temos a Figura 20(a). Nesta, o estado fundamental do modelo clássico pode ser determinado pelo comparativo das energias livres das três possíveis soluções (PM, AF e SAF) em função de  $J_2/J_1$ . A partir da solução fisicamente aceitável, a de menor energia na comparação, temos a presença das ordens AF e SAF com a transição de primeira ordem em  $J_2/J_1 = 0,5$  como marca a seta. Logo, podemos determinar que o estado fundamental do modelo frustrado  $J_1 - J_2$  clássico é dado por uma fase AF no intervalo  $0 < J_2/J_1 \leq 0,5$  seguida da fase SAF para  $J_2/J_1 \geq 0,5$ . Em particular, na Figura

20(b) o parâmetro  $m_{SAF}$  é mostrado em função de  $T/J_1$  com  $J_2/J_1 = 0,6$  do modelo clássico, apresentando a descontinuidade do parâmetro com a ocorrência da transição de primeira ordem, sendo a transição localizada via energia livre, a qual é mostrada na inserção.

Figura 20 – (a) Energia livre do modelo clássico em função de  $J_2/J_1$  para as soluções  $AF$ ,  $SAF$  e  $PM$  no estado fundamental. (b) Magnetização  $m_{SAF}$  do modelo clássico em função de  $T/J_1$  para  $J_2/J_1 = 0,6$ , inserção mostra a energia livre em função de  $T/J_1$  para solução  $SAF$  e  $PM$ . Setas indicam as transições de primeira ordem.



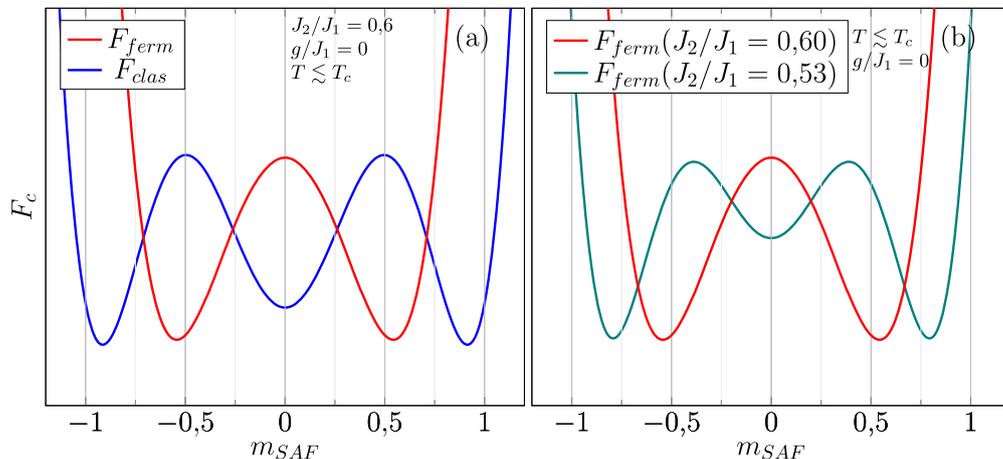
Fonte: Arthur Krindges(2023)

### 6.3 Comparativo entre abordagem clássica e fermiônica

A Figura 21 permite analisar o comportamento da energia livre *versus*  $m_{SAF}$  com intuito de caracterizar as transições de segunda e primeira ordem, tanto do modelo clássico quanto fermiônico. Logo, são confrontadas as energias livres advindas de cada modelo no mesmo cenário de frustração ( $J_2/J_1$  iguais). Nesses cálculos, os valores escolhidos de  $T/J_1$  estão logo abaixo de  $T_c$ , para mostrar a presença e/ou ausência de múltiplas soluções entre as formulações.

Particularmente, as energias livres clássicas ( $F_{clas}$ ) e fermiônicas ( $F_{ferm}$ ) *versus*  $m_{SAF}$  são comparadas para o mesmo valor de  $J_2/J_1$  (Figura 21(a)). Neste caso, podem-se observar três extremos para o resultado fermiônico (linha vermelha) no intervalo  $-1 \leq m_{SAF} \leq 1$ . Ressalta-se que os mínimos estão localizados em  $m_{SAF} \neq 0$ , com apenas uma solução utilizada sendo  $m_{SAF} > 0$ , já que as duas soluções são simétricas. Essencialmente, o comportamento apresentado pela energia livre fermiônica indica uma transição de segunda ordem do tipo SAF/PM. Este resultado contrasta com o caso clássico (linha azul), que exhibe até cinco extremos no intervalo  $-1 \leq m_{SAF} \leq 1$ . Para  $m_{SAF} \geq 0$ , existem três soluções possíveis para  $m_{SAF}$ , indicadas pelos três extremos. Neste caso, o

Figura 21 – (a) Comparação entre a energia do modelo  $J_1 - J_2$  clássico e fermiônico em função de  $m_{SAF}$  para  $J_2/J_1 = 0,6$  com  $T \leq T_c$ . (b) Energia livre em função de  $m_{SAF}$  para dois valores de  $J_2/J_1$  com  $g/J_1 = 0$  e  $T \lesssim T_c$ . Com  $J_2/J_1 = 0,6$  e  $J_2/J_1 = 0,53$  tendo 3 e 5 extremos, respectivamente.



Fonte: Arthur Krindges(2023)

valor  $m_{SAF}$  que corresponde ao valor mínimo de  $F_c$  é a solução física correta. Assim, a presença de dois mínimos não simétricos ( $m_{SAF} \approx 0,9$  e  $m_{SAF} = 0$ ) no caso clássico indica qualitativamente uma transição de primeira ordem SAF/PM, conforme a teoria de Landau para transições de fase (STANLEY, 1987). Fundamentalmente, para o mesmo conjunto de parâmetros  $J_2/J_1$ ,  $g/J_1$  e  $T/J_1$ , a análise exibe transições de fase de primeira e segunda ordem para casos clássicos e fermiônicos, respectivamente, indicando uma mudança na criticalidade com a troca de formalismo do modelo.

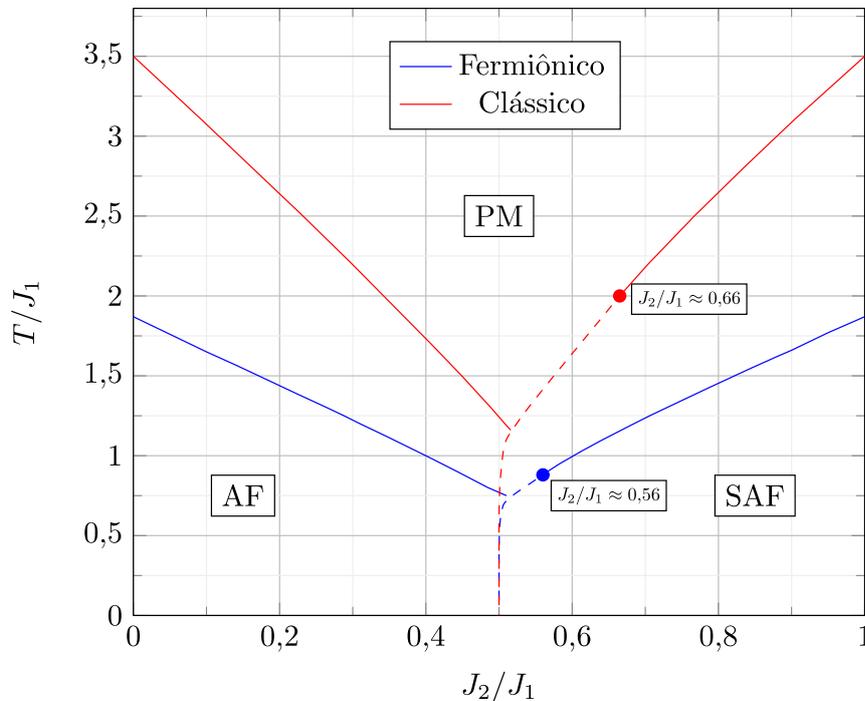
A Figura 21(b) foca na comparação de energias livres fermiônicas para  $J_2/J_1 = 0,6$  e  $J_2/J_1 = 0,53$ . Como principal resultado, pode-se observar que o cenário de múltiplas soluções aceitáveis para  $m_{SAF} \geq 0$ , indicado por 3 extremos, aparece apenas para valores menores  $J_2/J_1$  ( $J_2/J_1 = 0,53$ ) em comparação com o clássico ( $J_2/J_1 = 0,6$ ). Portanto, a verificação sugere que as transições de primeira ordem não são tão proeminentes na linha de transição SAF/PM, quando comparadas ao caso clássico.

A mudança na criticalidade do modelo frustração  $J_1 - J_2$  com a alteração do formalismo parece estar associada ao aumento do espaço de fase do modelo, gerado pelo formalismo fermiônico que é escrito no espaço de Fock. Com o aumento do espaço de fase novas configurações possíveis para o sistema são incorporadas. Mudança similar na criticalidade pode ser vista quando o modelo clássico de spin 1, de três estados  $S = \pm 1, 0$ , estudado por Balcerzak et al. (2018) é comparado com o modelo clássico de spin 1/2  $S = \pm 1$ . Ademais, é possível especular qual mecanismo conduz a alteração da criticalidade com relação a transição de fase PM/SAF. Se a transição de primeira ordem for pensada ser devida a efeitos da competição entre interações de primeiros e segundos vizinhos, pode-se

conjecturar que o aumento nos graus de liberdade poderia conduzir a uma mitigação dos efeitos de frustração.

Um panorama geral da comparação do modelo clássico e fermiônico pode ser visto no diagrama da Figura 22. O diagrama de fases do modelo clássico (vermelho) e fermiônico (azul) em função de  $J_2/J_1$  e  $T/J_1$  mostra as transições de primeira ordem (linhas tracejadas) e de segunda ordem (cheias), bem como os pontos tricríticos em  $J_2/J_1 \approx 0,66$  para o caso clássico e  $J_2/J_1 \approx 0,56$  para o fermiônico. Fica nítida a diminuição das  $T_c$  do modelo fermiônico em comparação ao clássico. Outro ponto é a alteração da criticalidade: a região de primeira ordem é menos predominante na versão fermiônica, mostrando que os estados não magnéticos influenciam na frustração, aumentando a estabilidade da fase. Entretanto o estado fundamental permanece inalterado, mostrando a característica de dominância dos estados magnéticos neste contexto.

Figura 22 – Comparação dos diagramas de fases dos modelos  $J_1 - J_2$  clássico e fermiônico em função de  $J_2/J_1$  e  $T/J_1$ . Linhas tracejadas indicam transição de primeira ordem e linhas cheias indicam transição de segunda ordem. Pontos marcam os pontos tricríticos, com transições AF/SAF na região de maior frustração ( $J_2/J_1 = 0,5$ ), AF/PM e SAF/PM.



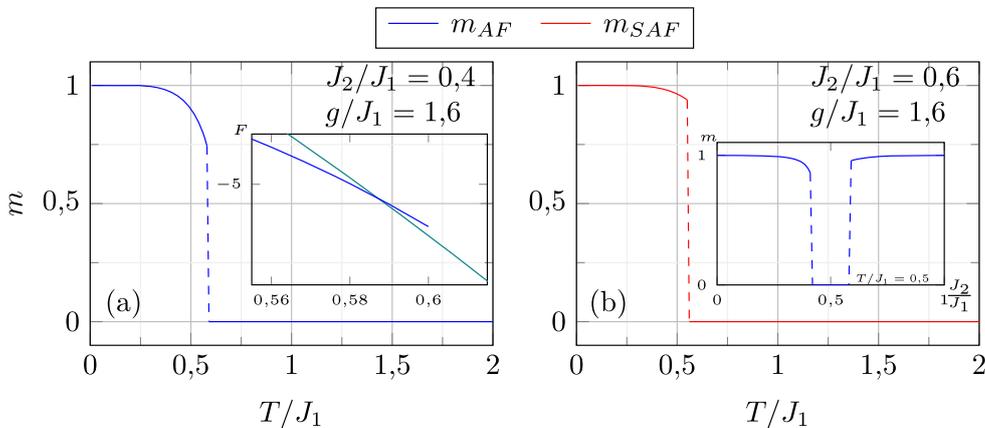
Fonte: Arthur Krindges(2023)

## 6.4 Resultados com ajuste do parâmetro de formação de pares

Apresentamos aqui os resultados dos cálculos numéricos do modelo com pareamento local (somente no cluster) e não local (termo de campo médio), que são realizados a seguir. O modelo de cluster único (eq. 4.32) efetivo é avaliado considerando o espaço de Fock - com os quatro estados possíveis por sítio - em diferentes regimes de desordem térmica ( $T$ ), frustração ( $J_2/J_1$ ) e intensidade do pareamento BCS ( $g$ ).

Após, obtemos a energia livre de Helmholtz da qual derivamos as outras grandezas termodinâmicas, como a magnetização e os valores médios de dupla ocupação e vazio por sítio. Em particular, com a presença das interações de troca, mediadas por  $J_1$  e  $J_2$ , a razão  $J_2/J_1$  pode mostrar o aparecimento de diferentes tipos de ordem AF. Por exemplo, a fase Néel AF é favorecida pelas interações dominantes de primeiro vizinho ( $J_1$ ) enquanto uma fase SAF é favorecida pelos acoplamentos de segundos vizinhos ( $J_2$ ). O padrão dos momentos magnéticos locais nas fases AF e SAF são mostrados na Figura 15. Por exemplo, os parâmetros de ordem  $m_{AF}$ <sup>3</sup> e  $m_{SAF}$ <sup>4</sup>, relacionados à magnetização, em que a ordem AF é caracterizada por  $m_{AF} \neq 0$  com  $m_{SAF} = 0$ , para a fase SAF quando  $m_{AF} = 0$  com  $m_{SAF} \neq 0$  e a PM é encontrada quando  $m_{AF} = m_{SAF} = 0$ . Além disso, a expansão da energia livre termodinâmica em potências de magnetizações locais (ver Apêndice B), seguindo a Teoria de Landau, também é utilizada para complementar a investigação das transições de fase.

Figura 23 – Magnetizações  $m_{AF}$  e  $m_{SAF}$  do modelo fermiônico em função de  $T/J_1$  para os valores de (a)  $J_2/J_1 = 0,4$  e (b)  $J_2/J_1 = 0,6$  com  $g/J_1 = 1,6$ . Inserte em (a) mostra a intersecção entre a energia livre de solução AF (azul) e PM (ciano). Inserte em (b) mostra a magnetização de 1 sítio em função de  $J_2/J_1$  para  $T/J_1 = 0,5$ .



Fonte: Arthur Krindges(2023)

<sup>3</sup>  $m_{AF} = (m_1 - m_2 + m_3 - m_4)/4$ .

<sup>4</sup>  $m_{SAF} = (m_1 + m_4 - m_3 - m_2)/4$  ou  $m_{SAF} = (m_1 + m_2 - m_3 - m_4)/4$ .

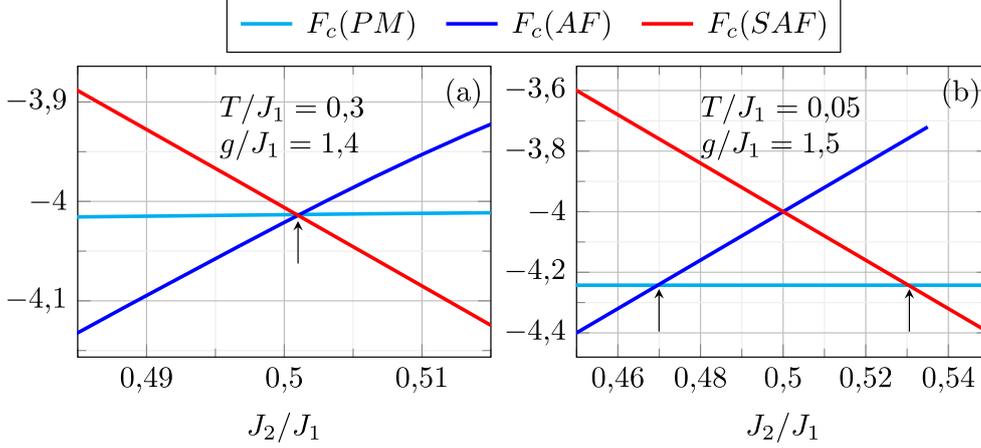
A **formação de pares local** via ( $g \neq 0$ ) foi analisada primeiramente pela Figura 23, em que as magnetizações  $m_{AF}$  e  $m_{SAF}$  são dadas em função de  $T/J_1$  para diferentes regimes, via ajuste de  $J_2/J_1$  e  $g/J_1 = 1,6$ . Pela Figura 23(a), temos a magnetização  $m_{AF}$  no regime de  $J_2/J_1 = 0,4$ . Nesta, é possível perceber a descontinuidade do parâmetro (linha tracejada). Tal comportamento indica uma transição de primeira ordem. Neste contexto, as energias das soluções PM (ciano) e AF (azul) são equacionadas para localização da transição no ponto de intersecção. Na Figura 23(b), a magnetização  $m_{SAF}$  é mostrada para o regime de  $J_2/J_1 = 0,6$ , com resultado semelhante ao mostrado anteriormente (Figura 20), onde a transição de primeira ordem é observada. Entretanto, na inserção da Figura 23(b) temos a magnetização de um único sítio em função de  $J_2/J_1$  para  $T/J_1 = 0,5$ . Verifica-se nesta, a existência das duas transições de primeira ordem em tal regime, dando indícios da mudança na criticalidade quando  $g$  é diferente de zero.

A Figura 24 apresenta o comportamento da energia livre em função de  $J_2/J_1$  para as diferentes soluções PM, AF e SAF em distintos regimes de  $T/J_1$  e  $g/J_1$ . Na Figura 24(a), as energias livres são apresentadas para os valores de  $T/J_1 = 0,3$  e  $g/J_1 = 1,4$ . Basicamente, podemos perceber que existe um ponto (marcado pela seta) onde as 3 soluções se cruzam. Neste cruzamento, temos uma transição de primeira ordem, sendo este o ponto triplo. Pela Figura 24(b) as energias são mostradas para  $g/J_1 = 1,5$  em um regime mais próximo do estado fundamental ( $T \rightarrow 0$ ) com  $T/J_1 = 0,05$ . Podemos ver que existem dois cruzamentos (setas) envolvendo as soluções AF/PM e SAF/PM. Este comportamento indica duas transições de primeira ordem AF/PM e PM/SAF em um regime em torno do estado fundamental. No comparativo, este resultado é diferente daquele obtido a partir do modelo sem favorecimento de formação de pares ( $g = 0$ ), como mostra a Figura 20(a). Conseqüentemente, observa-se que para um certo valor crítico de  $g = g_c$  é possível encontrar um estado fundamental diferente. Com  $g < g_c$ , o estado fundamental é composto pelas ordens AF e SAF com transição de primeira ordem, enquanto que para  $g \geq g_c$ , este é dado pelas ordens AF, PM e SAF com transições de primeira ordem AF/PM e PM/SAF.

Para uma melhor descrição das fases, a análise dos parâmetros de ordem e correlações spin-spin para diferentes regimes de acoplamento  $J_2/J_1$  e formação de pares  $g/J_1$  é feita na Figura 25. No painel (a), onde  $g/J_1 = 0$ , ocorre uma transição de fase AF/PM de segunda ordem quando  $J_2/J_1 = 0,4$ . Na fase AF, as correlações entre os primeiros vizinhos  $\langle \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z \rangle$  são antiferromagnéticas, enquanto que entre os segundos vizinhos  $\langle \hat{S}_i^z \hat{S}_k^z \rangle$  são ferromagnéticas. É interessante notar que a autocorrelação de spin  $\langle (\hat{S}_i^z)^2 \rangle$  depende da temperatura<sup>5</sup>, que é uma diferença importante do problema clássico de spin ( $S = \pm 1$ ), onde esta correlação é sempre 1. De fato, os estados não magnéticos (sítios vazios e duplamente ocupados) introduzidos na formulação fermiônica são responsáveis pela

<sup>5</sup> Existe uma relação entre dupla ocupação e autocorrelação de spin:  $\langle (\hat{S}_i^z)^2 \rangle = \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle + \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle - 2\langle \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle$ . No semi-preenchimento  $\langle \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle = \left(1 - \langle (\hat{S}_i^z)^2 \rangle\right)/2$ .

Figura 24 – (a) Energia em função de  $J_2/J_1$  para  $T/J_1 = 0,3$  e  $g/J_1 = 1,4$ , usando solução PM, AF e SAF. A seta indica a transição de primeira ordem. (b) Energia em função de  $J_2/J_1$  para  $T/J_1 = 0,05$  e  $g/J_1 = 1,5$ , usando solução PM, AF e SAF. Setas indicam as transições de primeira ordem.



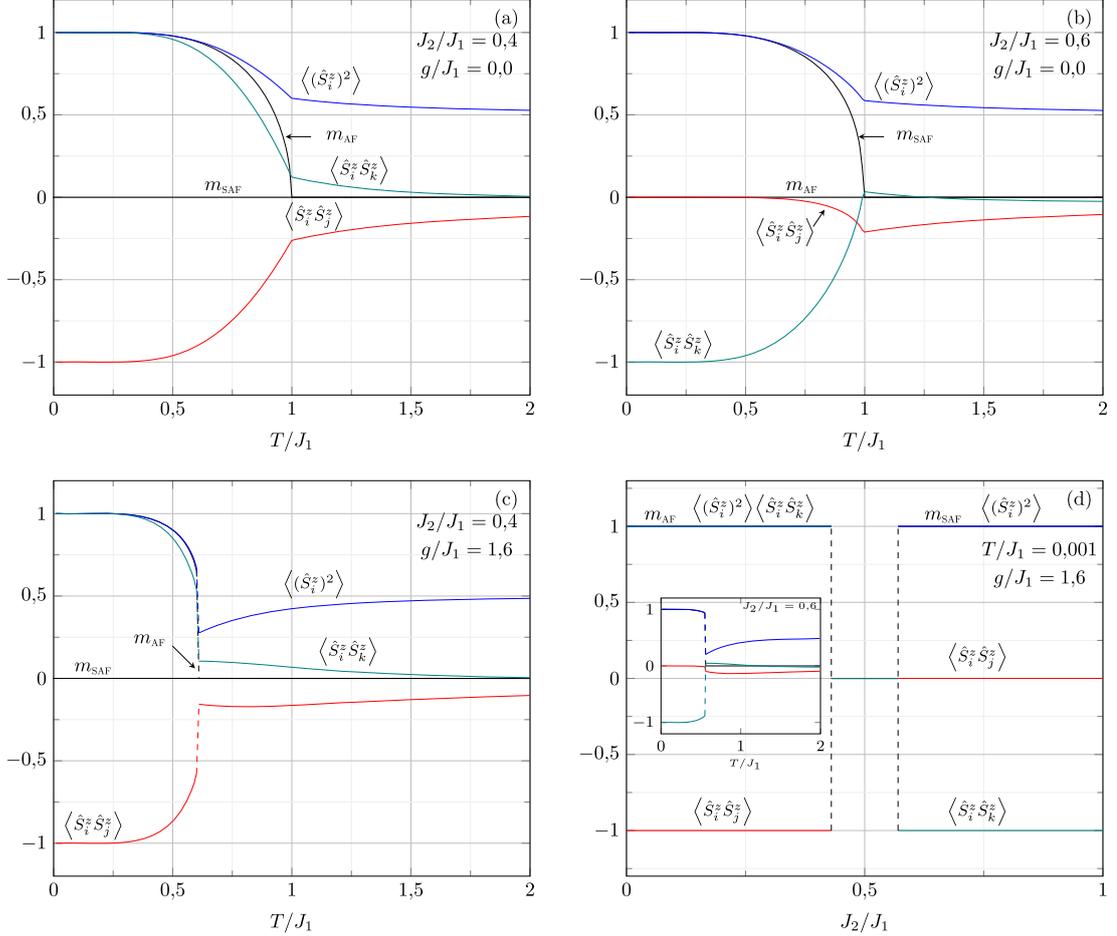
Fonte: Arthur Krindges(2023)

dependência térmica da autocorrelação de spin, que vai para 0,5 em temperaturas mais altas (ver correlações de único férmion na Fig. 25) quando os quatro estados fermiônicos são equiprováveis. Isso mostra que o peso dos estados magnéticos é menor no formalismo fermiônico, já que o espaço de fase é maior com a presença de estados magnéticos e não magnéticos.

No entanto, quando a temperatura se aproxima de zero  $\langle(\hat{S}_i^z)^2\rangle \rightarrow 1$ , sugere-se que apenas os estados magnéticos (ocupados por um único férmion) são relevantes no limite  $T \rightarrow 0$  no caso fermiônico com  $g = 0$ . Essencialmente, para  $\langle(\hat{S}_i^z)^2\rangle = 1$  temos que  $\langle\hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}\rangle = 0$ . Logo, o valor médio de dupla ocupação é zero. Este resultado é esperado uma vez que o estado fundamental é magnético, sem formação de pares. Quando  $J_2/J_1$  aumenta para 0,6, ocorre uma transição de fase PM/SAF de segunda ordem, indicando uma mudança na ordem de baixa temperatura, conforme mostrado na Figura 25(b). A correlação de spin entre segundos vizinhos torna-se antiferromagnética e  $\langle\hat{S}_i^z\hat{S}_j^z\rangle \rightarrow 0$ , caracterizando a fase SAF. Além disso, a natureza da transição de fase pode mudar quando o limite altamente competitivo ( $J_2/J_1 = 0,5$ ) é atingido.

Analisando o comportamento dos parâmetros de ordem e das correlações de spin no regime de pares ( $g \neq 0$ ), podemos observar como a termodinâmica do modelo é afetada. Pela Figura 25(c), temos as correlações de spin e os parâmetros de ordem  $m_{AF}$  e  $m_{SAF}$  em função de  $T/J_1$  para  $J_2/J_1 = 0,4$  e  $g/J_1 = 1,6$ . Podemos perceber que existe uma descontinuidade nos parâmetros e nas correlações neste regime, indicando a transição de primeira ordem entre AF/PM e na inserção da Figura 25(d). Já na Figura 25(d) os parâmetros e as correlações são dadas em função de  $J_2/J_1$  para  $g/J_1 = 1,6$  em um estado

Figura 25 – Parâmetros de ordem ( $m_{AF}$  e  $m_{SAF}$  respectivamente) e correlações de spin em função de  $T/J_1$  onde (a)  $J_2/J_1 = 0,4$  e (b)  $J_2/J_1 = 0,6$  para  $g/J_1 = 0$ . Em (c)  $J_2/J_1 = 0,4$  com  $g/J_1 = 1,6$ , aparecimento de descontinuidades. Para (d) os parâmetros de ordem e as correlações em função de  $J_2/J_1$  com  $T/J_1 = 0,001$  e  $g/J_1 = 1,6$ , é perceptível o *gap* na região de maior frustração ( $J_2/J_1 \rightarrow 0,5$ ).



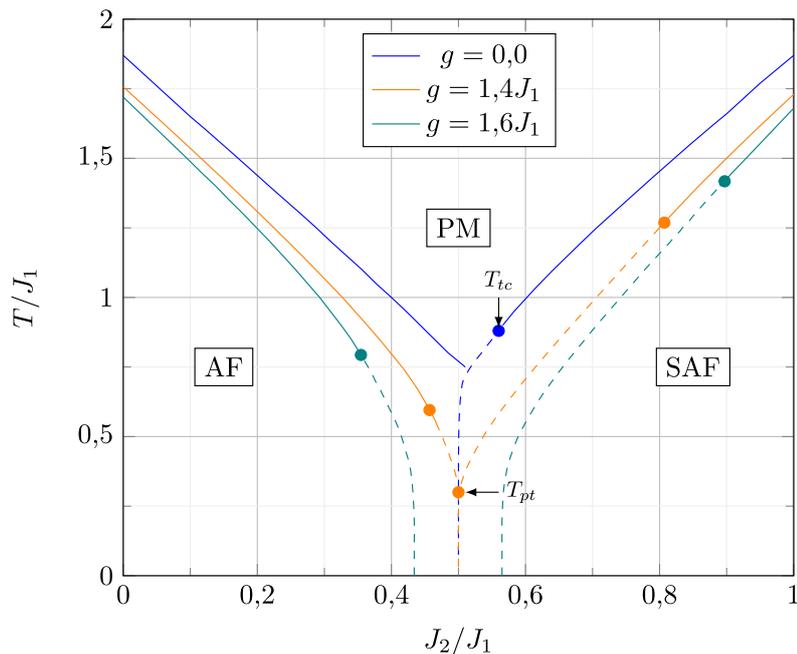
Fonte: Arthur Krindges(2023)

muito próximo do fundamental ( $T/J_1 = 0,001$ ). Aqui fica claro o *gap* entre as fases AF e SAF na região de maior frustração ( $J_2/J_1 \rightarrow 0,5$ ). Esta fase formada entre AF/SAF é dita ser paramagnética, mas com natureza distinta da fase PM encontrada em alta  $T$ . Basicamente, nesta região os parâmetros de ordem e as correlações de spin são zero, sugerindo uma fase não magnética com alta formação de pares.

Quando analisamos o diagrama de fases da Figura 26 para diferentes intensidades de pareamento local ( $g/J_1 = 1,4$  e  $1,6$ ) podemos perceber as mudanças de criticalidade. Uma delas é a alteração das temperaturas críticas, diminuindo conforme  $g$  aumenta, juntamente com o aparecimento da linha de coexistência entre AF/PM (transição de primeira ordem, linha tracejada) com  $g/J_1 \geq 1,4$ . Outros pontos a serem destacados são o deslocamento do ponto tricrítico ( $T_{tc}$ ) com o aumento de  $g$ , o aparecimento de

novos pontos  $T_{tc}$  (transição AF/PM) e de um ponto triplo ( $T_{pt}$ ), marcando a coexistência das três fase AF/PM/SAF. O ponto de maior destaque no entanto é a abertura de um *gap* entre as fases AF e SAF com  $g/J_1 = 1,6$ , ocorrendo na região de maior frustração, introduzindo um estado fundamental PM, caracterizado pela alta presença de estados não magnéticos e duplamente ocupados. Isto sugere que a frustração pode fornecer um cenário propício para início de um estado fundamental quântico não magnético, o qual surge no regime altamente frustrado. É enfatizado ainda que os resultados e discussões desta seção encontram-se atualmente submetidos para revista *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* (JMMM).

Figura 26 – Diagrama do modelo fermiônico em função de  $J_2/J_1$  e  $T/J_1$  para os valores de  $g/J_1 = 0,0$ ,  $g/J_1 = 1,4$  e  $g/J_1 = 1,6$ . Linhas tracejadas marcam as transições de primeira ordem, linhas cheias transições de segunda ordem, pontos marcam os pontos tricríticos ( $T_{tc}$ ) e o ponto triplo ( $T_{pt}$ ). Submetido ao JMMM.

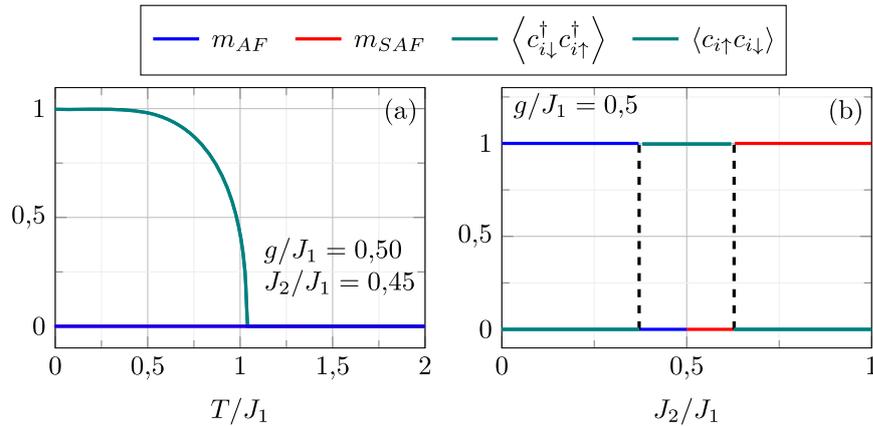


Fonte: Arthur Krindges(2023)

Aplicando o **pareamento BCS sobre todo o sistema** temos a inclusão de novos parâmetros de ordem relacionado aos estados de dupla ocupação ( $\langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger \rangle$ ) e vazio ( $\langle c_{i\uparrow} c_{i\downarrow} \rangle$ ) por sítio. Estes foram introduzidos pelo método de campo médio em clusters, para comportar as interações de borda do tipo BCS que foram perdidas pelo método de clusters. Portanto, uma nova termodinâmica pode ser analisada.

Essencialmente, a interpretação dos resultados indica que uma nova fase foi mapeada, a fase de Pares. Nesta, temos os parâmetros de dupla ocupação e vazio são diferentes de zero, enquanto que o parâmetro relacionado a magnetização é nulo<sup>6</sup>. Assim, a fase de Pares que é reflexo não somente da presença como também da intensidade de estados não magnéticos quando o termo de interação de pareamento é ajustado. Em tal fase, pode-se verificar o impacto da frustração ( $J_1 - J_2$ ) e da desordem ( $T$ ).

Figura 27 – Parâmetros de ordem da magnetização ( $m_{AF}$  e  $m_{SAF}$ ) e de Pares ( $\langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger \rangle$  e  $\langle c_{i\uparrow} c_{i\downarrow} \rangle \neq 0$ ) em função de (a)  $T/J_1$  para  $J_2/J_1 = 0,45$  e  $g/J_1 = 0,50$ , (b) em função de  $J_2/J_1$  para  $T/J_1 = 0$  e  $g/J_1 = 0,50$ . Linhas tracejadas indicam descontinuidade dos parâmetros.



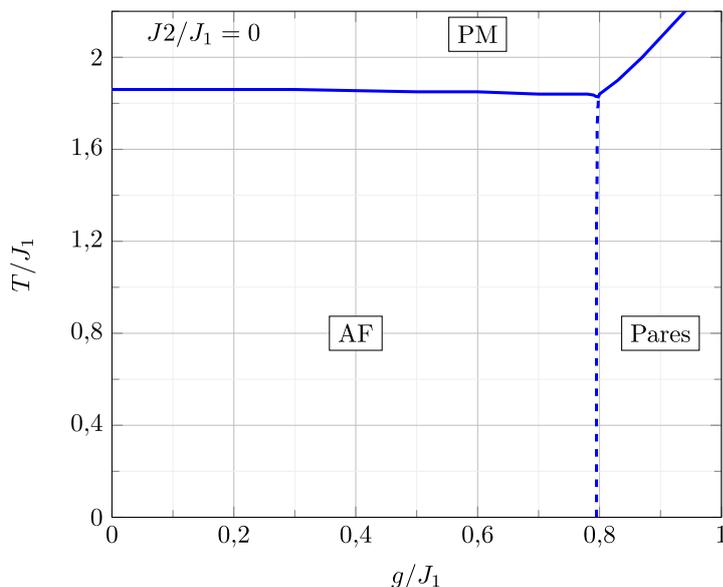
Fonte: Arthur Krindges(2023)

O primeiro resultado para o modelo com formação de pares agregada de correção de campo médio é dado pela Figura 27. Nesta, os comportamentos dos parâmetros de ordem do modelo são apresentados. Na Figura 27(a), estes são dados em função de  $T/J_1$  para  $g/J_1 = 0,5$  e  $J_2/J_1 = 0,45$ . Em tal regime, podemos perceber a diminuição dos parâmetros de par/buraco com o aumento de  $T/J_1$ , enquanto que os parâmetros magnéticos são nulos. Pela Figura 27(b), os parâmetros são dados em função de  $J_2/J_1$  no estado fundamental. Neste regime, os parâmetros magnéticos são diferentes de zero, menos no intervalo  $0,37 < J_2/J_1 < 0,63$ , em que para este intervalo os parâmetros de par/buraco são diferentes de zero indicando a presença da fase de Pares. Vale ressaltar que na presença de ordens magnéticas, os parâmetros de par/buraco são nulos, indicando

<sup>6</sup> Pares:  $\langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger \rangle = \langle c_{i\uparrow} c_{i\downarrow} \rangle \neq 0$  e  $m_i = 0$ .

que nas fases magnéticas os estados par/buraco são suprimidos. Em contra partida, na fase de Pares as ordens magnéticas são suprimidas. Com isso, temos a indicação de uma transição de primeira ordem entre as fases magnéticas e Pares em  $J_2/J_1 = 0,37$  (AF/Pares) e  $J_2/J_1 = 0,63$  (SAF/Pares).

Figura 28 – Diagrama do modelo  $J_1 - J_2$  fermiônico com pareamento em função de  $g/J_1$  e  $T/J_1$  com  $J_2/J_1 = 0$ . Linha tracejada marca a transição de primeira ordem e linhas cheias de segunda ordem.

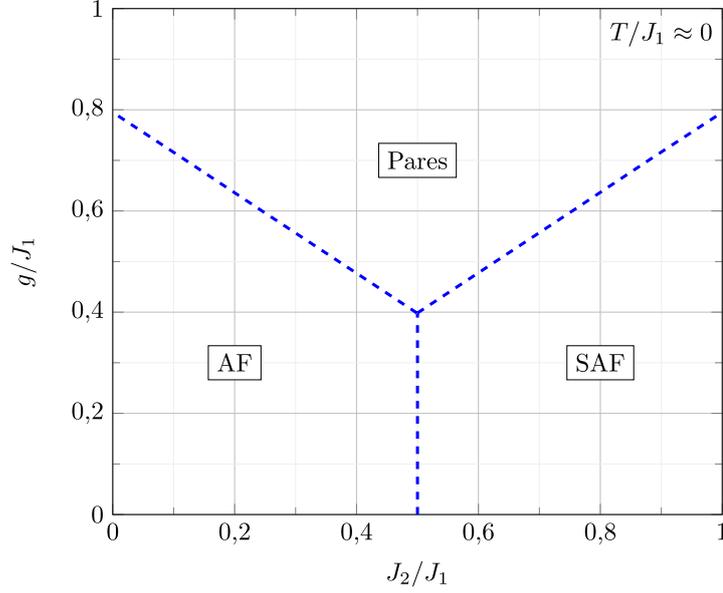


Fonte: **Arthur Krindges**(2023)

Mapeando o modelo em função de  $g/J_1$  e  $T/J_1$  para o regime sem frustração ( $J_2/J_1 = 0$ ), é possível analisar a competição entre os estados magnéticos e não-magnéticos no sistema, como mostra a Figura 28. Podemos perceber o aparecimento de três fases, duas magnéticas (PM e AF) e uma não magnética (Pares), com transição de segunda ordem AF/PM, transição de primeira ordem envolvendo AF/Pares, e outra de segunda ordem Pares/PM. Vale ressaltar que neste regime não frustrado, há possibilidade do estado fundamental ser AF ou Pares, com a transição entre estes próximo de  $g/J_1 \approx 0,8$ . Observa-se ainda que este ponto de transição é mantido mesmo para temperaturas maiores. Um ponto interessante é o comportamento aproximadamente constante da linha de transição AF/PM com o aumento de  $g/J_1$ . Isto sugere que somente um limiar alto ( $g/J_1 \approx 0,8$ ) é capaz de causar uma alteração nas transições. Nesse sentido, pode-se especular que a redistribuição de carga não é suficiente intensa para afetar a fase AF até o limiar indicado.

O estado fundamental ( $T/J_1 \approx 0$ ) para o modelo é visto na Figura 29. Com a análise das energias livres das quatro possíveis soluções (PM, AF, SAF e Pares) em função de  $J_2/J_1$  e  $g/J_1$ , foi possível a construção do diagrama de fases. Marcando a solução

Figura 29 – Estado fundamental ( $T/J_1 \approx 0$ ) do modelo fermiônico em função de  $J_2/J_1$  e  $g/J_1$ . Linhas tracejadas marcam as transições de primeira ordem.

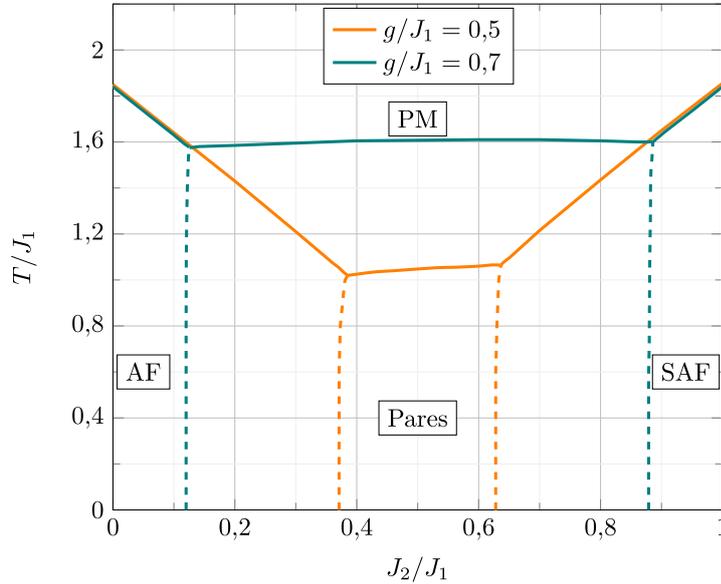


Fonte: **Arthur Krindges**(2023)

fisicamente aceitável, aquela de menor energia, obtemos um diagrama composto por três fases, uma não magnética (Pares) e duas magnéticas (AF e SAF). Podemos notar que para um  $g$  menor que um  $g_c$  ( $g_c \approx 0,4J_1$ ), obtemos somente as fases AF e SAF com transição de primeira ordem entre elas em  $J_2/J_1 = 0,5$ , sendo o regime altamente frustrado. Entretanto, com  $g > g_c$  temos o aparecimento da fase de Pares, que se inicia justamente na região de maior frustração ( $J_2/J_1 = 0,5$ ). Para  $g/J_1 > 0,8$ , as fases magnéticas AF e SAF são extinguidas dando lugar somente a fase de Pares. Com isso, o diagrama de fases do estado fundamental do modelo mostrou que a frustração permite antecipar o surgimento de uma fase não magnética (Pares), quando comparado ao sistema sem frustração ( $J_2/J_1 = 0$  tem transição MAG/Pares em  $g/J_1 \approx 0,8$ ).

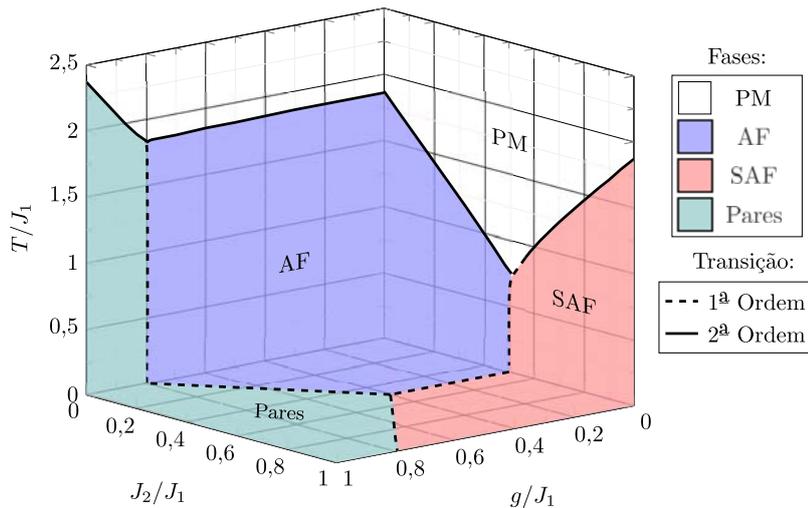
Analisando o impacto do aumento de  $g/J_1$  nas transições de fase, o que envolve a variação de  $J_2/J_1$  e  $T/J_1$ , obtemos a Figura 30. A figura apresenta o diagrama de fases do modelo em função de  $J_2/J_1$  e  $T/J_1$ , para os valores de  $g/J_1 = 0,5$  e  $g/J_1 = 0,7$ . Nesta, podemos perceber que a região da fase de Pares é menor em  $g/J_1 = 0,5$ , quando comparada com  $g/J_1 = 0,7$ . É evidente que aumentar  $g$  favorece pareamentos e por consequência a fase de Pares. Além disso, a transição que envolve as fases magnéticas e de Pares é de primeira ordem, resultado da descontinuidade dos parâmetros  $m$  e  $\langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger \rangle / \langle c_{i\uparrow} c_{i\downarrow} \rangle$  na transição. Vale ressaltar que todas as transições que envolvem a fase PM são de segunda ordem, diferente do que foi visto no diagrama da Figura 26.

Figura 30 – Diagrama do modelo fermiônico em função de  $J_2/J_1$  e  $T/J_1$  para os valores de  $g/J_1 = 0,5$  e  $g/J_1 = 0,7$ . Linhas tracejadas marcam as transições de primeira ordem, linhas cheias transições de segunda ordem.



Fonte: Arthur Krindges(2023)

Figura 31 – Diagrama do modelo fermiônico em função de  $J_2/J_1$ ,  $g/J_1$  e  $T/J_1$ . Linhas tracejadas marcam as transições de primeira ordem, linhas cheias transições de segunda ordem.



Fonte: Arthur Krindges(2023)

Por fim, um panorama geral do modelo fermiônico frustrado  $J_1 - J_2$  com interação BCS pode ser verificado no diagrama de fases da Figura 31, sendo uma superposição de resultados das Figuras 26, 28 e 29. A figura apresenta um diagrama tridimensional com

coordenadas  $J_2/J_1$ ,  $g/J_1$  e  $T/J_1$ , que apresenta transições de primeira (linhas tracejadas) e segunda (linhas cheias) ordem. Temos também a presença das quatro fases presentes no modelo, sendo elas: PM (branco), AF (azul), SAF (vermelho) e Pares (verde). O diagrama possibilita uma compreensão do impacto no ajuste das diferentes variáveis de controle do modelo. O primeiro ponto de interesse, refere-se ao comportamento quase constante da transição de fase AF/PM com  $J_2/J_1 = 0$  para  $g/J_1$  no intervalo  $[0, 0,8]$ . Este resultado mostra um baixo impacto do termo de pareamento na fase AF, para  $g/J_1 < 0,8$ . Neste regime, a fase AF não apresenta qualquer competição de interações que conduz a frustração (FS), acarretando em uma maior estabilidade da fase. Entretanto, com  $J_2/J_1 \rightarrow 0,5$  temos o aparecimento de FS, perturbando as fases magnéticas. Consequentemente, há o aparecimento da fase de Pares, primeiramente na região de alta FS conforme comportamento no estado fundamental visto no diagrama. Estes resultados mostraram que a introdução de FS desfavorece os estados magnéticos permitindo assim uma menor energia de pareamento ( $g$  menor). Como consequência, se favorece a formação de pares, permitindo o surgimento da fase de Pares. Portanto, a FS aparenta ser relevante para o surgimento inicial da fase de Pares, enfraquecendo as ordens magnéticas, antecipando o aparecimento da fase de Pares.



## 7 Conclusão

O presente trabalho investigou a interação entre frustração e formação de pares adotando o modelo  $J_1 - J_2$  em um formalismo fermiônico com mecanismo de interação de pares no espaço real. Este problema fermiônico é analisado em regime de semi-preenchimento, onde os momentos magnéticos são escritos combinando operadores de número de ocupação, permitindo quatro estados por sítio. Os sítios ocupados por um único férmion correspondem aos estados de interação magnética (como  $S = \pm 1$  no espaço de spin), enquanto os sítios vazios ou ocupados duplamente levam a estados magneticamente não interagentes. O modelo é analisado dentro de uma estrutura de campo médio de cluster, em que o parâmetro  $g$  favorece a formação de pares de férmions dentro dos clusters. Este mecanismo de pareamento pode redistribuir os momentos magnéticos, levando a sítios duplamente ocupados.

Nossas descobertas indicam que a versão fermiônica do modelo  $J_1 - J_2$  sem interações de pareamento pode apresentar um cenário altamente competitivo. As fases AF e SAF são separadas por uma transição de fase de primeira ordem em  $J_2/J_1 \approx 0,5$ , na qual a frustração se torna máxima e a transição de fase ordem-desordem (AF-SAF/PM) atinge sua temperatura mais baixa. Para  $J_2/J_1 > 0,5$ , a ordem SAF torna-se estável, com a transição de fase PM/SAF mudando de primeira ordem para segunda ordem em um ponto tricrítico quando  $J_2/J_1$  aumenta. Em particular, esta descrição termodinâmica das transições de fase é qualitativamente semelhante à encontrada no modelo clássico. No entanto, algumas diferenças podem ser sinalizadas. Por exemplo, a versão fermiônica apresenta temperaturas de transição ligeiramente inferiores ao modelo clássico devido à presença de estados não magnéticos. No entanto, esses estados são desfavorecidos à medida que a temperatura diminui e ambos os modelos apresentam os mesmos resultados no estado fundamental para  $g = 0$ . Além disso, a transição de primeira ordem PM/SAF aparece em uma faixa menor de  $J_2/J_1$  no caso fermiônico.

Quanto à presença de um mecanismo de pareamento, novas propriedades termodinâmicas são obtidas. A natureza das transições de fase é fortemente afetada pela intensidade de interação de pareamento. O intervalo de  $J_2/J_1$  no qual as transições de primeira ordem PM/SAF ocorrem aumenta e uma transição de primeira ordem PM/AF surge à medida que  $g$  é aumentado. Além disso, também pode ser encontrado um ponto triplo, onde coexistem as fases PM, AF e SAF. Isso sugere que o momento magnético médio dos sítios é fortemente afetado pela redistribuição de férmions para satisfazer a interação de pareamento, o que leva à transição de primeira ordem AF/PM. Nossos achados indicam que a interação de pareamento introduz uma competição adicional ao favorecer estados não magnéticos. Nesse contexto, o cenário competitivo introduzido pelos acoplamentos

magnéticos e as interações de pareamento aumentam a instabilidade, potencializando as transições de primeira ordem. Além disso, para uma interação de pareamento intensa o suficiente, o estado fundamental do sistema exibe uma faixa de  $J_2/J_1$  em torno da frustração máxima sem ordem magnética. Portanto, as fases AF e SAF são separadas por uma fase PM de baixa temperatura com alta densidade de sítios duplamente ocupados. É válido mencionar que esta fase PM de baixa temperatura ocorre em  $J_2/J_1 \approx 0,5$  para um  $g$  baixo. Isto sugere que o regime altamente frustrado é mais sensível à interação de pareamento.

Ademais, com a introdução do termo de pareamento BCS sobre todo o sistema, incluindo interações intra e inter-cluster, novos comportamentos foram observados. Para inclusão deste termo, ajustes nos métodos utilizados foram necessários, entre eles, a inserção de novos parâmetros de ordem relacionados aos estados de dupla ocupação e vazio. Com isso, uma nova fase pode ser identificada no modelo, a fase de Pares, composta pelos estados não magnéticos de dupla ocupação e vazio.

Entre os pontos pertinentes analisados, podemos destacar a natureza do aparecimento da fase de Pares, bem como os impactos da FS ( $J_2/J_1$ ), termo de pareamento ( $g/J_1$ ) e desordem térmica ( $T/J_1$ ) sobre esta fase. Um ponto importante a ser destacado diz respeito a natureza das transições envolvendo as fases magnéticas (AF e SAF) e de Pares. Foram observadas, através da análise dos parâmetros de ordem, transições de primeira ordem envolvendo estas fases. Outro ponto de destaque foi o aparecimento da fase de Pares na região de maior frustração. Este resultado é condizente com aqueles obtidos anteriormente para o modelo com pareamento em cluster local, onde uma fase não magnética era prevista. Vale ressaltar que o ajuste da variável  $J_2/J_1$  não trouxe mudanças singulares na criticalidade da fase de Pares. Entretanto, os efeitos combinados de  $J_2/J_1$  e  $g/J_1$  mostraram ser indispensáveis para o enfraquecimento das ordens magnéticas e no surgimento da fase de Pares, como foi verificado no diagrama do estado fundamental.

Para resumir, nossas descobertas indicam que a natureza das transições de fase é dependente do pareamento. Além disso, sugere-se que as interações magnéticas competitivas podem intensificar a formação de pares, levando a um estado fundamental quântico não magnético. Portanto, o trabalho trouxe resultados que podem contribuir para a descrição de sistemas que possuem estas características de frustração e supercondutividade combinadas. Como possibilidade de trabalhos futuros, destaca-se a possibilidade de melhoramento da técnica, a partir do emprego de modelos de Heisenberg, os quais tem sido usados para tratamento de supercondutividade (HUANG; SHENG, 2022).

## Referências

ARUTE, F. et al. Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. Nature, v. 574, n. 7779, p. 505–510, out. 2019. ISSN 1476-4687. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/s41586-019-1666-5>>.

BALCERZAK, T. et al. Phase diagram of the  $J_1 - J_2$  frustrated anisotropic antiferromagnet with spin  $S = 1$  on the quadratic lattice. Physical Review E, v. 98, n. 2, p. 022123, ago. 2018. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.98.022123>>.

BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. Theory of Superconductivity. Physical Review, v. 108, n. 5, p. 1175–1204, dez. 1957. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.108.1175>>.

BARROSO, L. C. Cálculo Numérico. 2<sup>a</sup> edição. ed. [S.l.]: Harbra, 1987. ISBN 978-85-294-0089-1.

BATES, J. B.; HENDRICKS, R. W.; SHAFFER, L. B. Neutron irradiation effects and structure of noncrystalline SiO<sub>2</sub>. The Journal of Chemical Physics, v. 61, n. 10, p. 4163–4176, nov. 1974. ISSN 0021-9606. Publisher: American Institute of Physics. Disponível em: <<https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.1681714>>.

BERG, E. et al. Striped superconductors: how spin, charge and superconducting orders intertwine in the cuprates. New Journal of Physics, v. 11, n. 11, p. 115004, nov. 2009. ISSN 1367-2630. Disponível em: <<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1367-2630/11/11/115004>>.

BINDER, K.; YOUNG, A. P. Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions. Reviews of Modern Physics, v. 58, n. 4, p. 801–976, out. 1986. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.58.801>>.

BISWAL, G.; MOHANTA, K. L. A recent review on iron-based superconductor. Materials Today: Proceedings, v. 35, p. 207–215, jan. 2021. ISSN 2214-7853. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2214785320331254>>.

BOGOLUBOV, N. N. J. Introduction to Quantum Statistical Mechanics. [S.l.]: World Scientific, 2010. Google-Books-ID: v0iIZD6itpsC. ISBN 978-981-4295-19-2.

BOUCHIAT, V. et al. Quantum coherence with a single Cooper pair. Physica Scripta, v. 1998, n. T76, p. 165, jan. 1998. ISSN 1402-4896. Publisher: IOP Publishing. Disponível em: <<https://iopscience.iop.org/article/10.1238/Physica.Topical.076a00165/meta>>.

BRAGG, W. H.; BRAGG, W. L. The nobel prize in physics 1915. 1915. Disponível em: <<https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1915/summary/>>.

BRAGG, W. L.; WILLIAMS, E. J. The effect of thermal agitation on atomic arrangement in alloys. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character, v. 145, n. 855, p. 699–730, jul. 1934. Publisher:

Royal Society. Disponível em: <<https://royalsocietypublishing.org/doi/10.1098/rspa.1934.0132>>.

BRINI, E. et al. How Water's Properties Are Encoded in Its Molecular Structure and Energies. *Chemical Reviews*, v. 117, n. 19, p. 12385–12414, out. 2017. ISSN 0009-2665. Publisher: American Chemical Society. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.7b00259>>.

BUSCHOW, K. H. J.; BOER, F. R. D. *Physics of Magnetism and Magnetic Materials*. Softcover reprint of the original 1st 2003 ed. edição. [S.l.]: Springer, 2012. ISBN 978-1-4757-0567-6.

CALLEN, H. B.; CALLEN. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. 2nd revised ed. edição. ed. New York: Wiley, 1985. ISBN 978-0-471-86256-7.

CAMPBELL, P. *Permanent Magnet Materials and Their Application*. Illustrated edição. Cambridge: Cambridge University Press, 1996. ISBN 978-0-521-56688-9.

CHRISTIANSEN, L.; SIEBNER, H. R. Chapter 7 - Tools to explore neuroplasticity in humans: Combining interventional neurophysiology with functional and structural magnetic resonance imaging and spectroscopy. In: QUARTARONE, A.; GHILARDI, M. F.; BOLLER, F. (Ed.). *Handbook of Clinical Neurology*. Elsevier, 2022, (Neuroplasticity, v. 184). p. 105–119. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780128194102000321>>.

COEY, J. M. D. Permanent magnet applications. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 248, n. 3, p. 441–456, ago. 2002. ISSN 0304-8853. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885302003359>>.

COEY, J. M. D. *Magnetism and Magnetic Materials*. 1<sup>a</sup> edição. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 2010.

COSTA, M. B. S.; PAVÃO, A. C. Supercondutividade: um século de desafios e superação. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 34, p. 2602–2615, jun. 2012. ISSN 1806-1117, 1806-9126. Publisher: Sociedade Brasileira de Física. Disponível em: <<http://www.scielo.br/j/rbef/a/3FwKrZdXXNvMTHs8j4qtMjz/abstract/?lang=pt>>.

DAVIDOV, D. et al. Coexistence of superconductivity and spin glass magnetic freezing. *Journal of Physics F: Metal Physics*, v. 7, n. 2, p. L47–L52, fev. 1977. ISSN 0305-4608. Publisher: IOP Publishing. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0305-4608/7/2/001>>.

EDWARDS, S. F.; ANDERSON, P. W. Theory of spin glasses. *Journal of Physics F: Metal Physics*, v. 5, n. 5, p. 965, maio 1975. ISSN 0305-4608. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0305-4608/5/5/017>>.

ELSAYED, M. et al. A review on the applications of nuclear magnetic resonance (NMR) in the oil and gas industry: laboratory and field-scale measurements. *Journal of Petroleum Exploration and Production Technology*, v. 12, n. 10, p. 2747–2784, out. 2022. ISSN 2190-0566. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s13202-022-01476-3>>.

EMERY, V. J.; KIVELSON, S. A.; TRANQUADA, J. M. Stripe phases in high-temperature superconductors. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, v. 96, n. 16, p. 8814–8817, ago. 1999. ISSN 0027-8424. Disponível em: <<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC33690/>>.

- FETTER, A. L.; WALECKA, J. D.; PHYSICS. Quantum Theory of Many-Particle Systems. Illustrated edição. Mineola, N.Y: Dover Publications, 2003. ISBN 978-0-486-42827-7.
- FISCHER, K. H.; HERTZ, J. A. Spin Glasses. [S.l.]: Cambridge University Press, 1991. (Cambridge Studies in Magnetism).
- FRIEDEL, J.; NOGUERA, C. Some considerations on  $u_{eff}$  values entering the hubbard hamiltonian. International Journal of Quantum Chemistry, v. 23, n. 4, p. 1209–1221, 1983. ISSN 1097-461X. \_eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/qua.560230411>. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/qua.560230411>.
- FU, X. et al. Hidden Quantum Hall Stripes in  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_{0.24}\text{Ga}_{0.76}\text{As}$  Quantum Wells. Physical Review Letters, v. 125, n. 23, p. 236803, dez. 2020. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.125.236803>.
- GRIGORIEVA, I. V.; SCHMIDT, V. V. The Physics of Superconductors: Introduction to Fundamentals and Applications. 1997<sup>a</sup> edição. ed. Berlin ; New York: Springer, 1997. ISBN 978-3-540-61243-8.
- HAYASHIDA, S. et al. Magnetic order in the chemically substituted frustrated antiferromagnet  $\text{CsCrF}_4$ . Physical Review B, v. 102, n. 17, p. 174440, nov. 2020. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.102.174440>.
- HE, Y.-C.; SHENG, D.; CHEN, Y. Chiral Spin Liquid in a Frustrated Anisotropic Kagome Heisenberg Model. Physical Review Letters, v. 112, n. 13, p. 137202, abr. 2014. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.112.137202>.
- HERRMANN, J. et al. Realizing quantum convolutional neural networks on a superconducting quantum processor to recognize quantum phases. Nature Communications, v. 13, n. 1, p. 4144, jul. 2022. ISSN 2041-1723. Number: 1 Publisher: Nature Publishing Group. Disponível em: <https://www.nature.com/articles/s41467-022-31679-5>.
- HOPFIELD, J. J. Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, v. 79, n. 8, p. 2554–2558, abr. 1982. ISSN 0027-8424. Disponível em: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC346238/>.
- HORNER, H. Glassy Dynamics and Aging in Disordered Systems. In: RADONS, G.; JUST, W.; HÄUSSLER, P. (Ed.). Collective Dynamics of Nonlinear and Disordered Systems. Berlin, Heidelberg: Springer, 2005. p. 203–236. ISBN 978-3-540-26869-7. Disponível em: [https://doi.org/10.1007/3-540-26869-3\\_10](https://doi.org/10.1007/3-540-26869-3_10).
- HOTT, R. et al. Review on superconducting materials. In: digital Encyclopedia of Applied Physics. John Wiley & Sons, Ltd, 2016. p. 1–55. ISBN 978-3-527-60043-4. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/3527600434.eap790>.
- HUANG, Y.; SHENG, D. Topological Chiral and Nematic Superconductivity by Doping Mott Insulators on Triangular Lattice. Physical Review X, v. 12, n. 3, p. 031009, jul. 2022. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.12.031009>.

- HÜSER, D. et al. Dynamical behavior of the susceptibility around the freezing temperature in (Eu,Sr)S. Physical Review B, v. 27, n. 5, p. 3100–3103, mar. 1983. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.27.3100>>.
- IORIO, A. et al. Low-temperature magnetic and transport anisotropy in manganite thin films. Journal of Physics: Condensed Matter, v. 21, n. 45, p. 456002, out. 2009. ISSN 0953-8984. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/21/45/456002>>.
- JILES, D. Introduction to Magnetism and Magnetic Materials. 3rd edition. ed. Boca Raton: CRC Press, 2015. ISBN 978-1-4822-3887-7.
- JIN, C. et al. Stripe phases in WSe<sub>2</sub>/WS<sub>2</sub> moiré superlattices. Nature Materials, v. 20, n. 7, p. 940–944, jul. 2021. ISSN 1476-4660. Number: 7 Publisher: Nature Publishing Group. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/s41563-021-00959-8>>.
- JIN, S. et al. Phase transitions in the frustrated Ising model on the square lattice. Physical Review B, v. 87, n. 14, p. 144406, abr. 2013. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.144406>>.
- JR, N. N. B.; BOGOLUBOV, N. N.; GUPTA, V. P. Introduction to Quantum Statistical Mechanics. Singapore: World Scientific Publishing Company, 1982. ISBN 978-9971-950-04-0.
- KELLERMANN, N. Efeitos de flutuações quânticas em um modelo vidro de spin com cluster. Dissertação (Mestrado em Física) — Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria - RS, mai 2019. Accepted: 2019-12-16T14:42:34Z. Disponível em: <<http://repositorio.ufsm.br/handle/1/19156>>.
- KELLERMANN, N.; SCHMIDT, M.; ZIMMER, F. M. Quantum Ising model on the frustrated square lattice. Physical Review E, v. 99, n. 1, p. 012134, jan. 2019. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.99.012134>>.
- KETTERSON, J. B. The Physics of Solids. 1ª edição. ed. [S.l.]: OUP Oxford, 2016.
- KITTEL, C. Introduction to Solid State Physics. 8th ed. ed. [S.l.]: Wiley, 2005. ISBN 9780471415268; 047141526X; 0471680575; 9780471680574.
- KLINOVAJA, J.; LOSS, D. Integer and fractional quantum Hall effect in a strip of stripes. The European Physical Journal B, v. 87, n. 8, p. 171, ago. 2014. ISSN 1434-6036. Disponível em: <<https://doi.org/10.1140/epjb/e2014-50395-6>>.
- KORTUS, J. et al. Superconductivity of metallic boron in mgb<sub>2</sub>. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 86, p. 4656–4659, May 2001. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.86.4656>>.
- KUMAR, A.; TANDON, R. P.; AWANA, V. P. S. Study of spin glass and cluster ferromagnetism in RuSr<sub>2</sub>Eu<sub>1.4</sub>Ce<sub>0.6</sub>Cu<sub>2</sub>O<sub>10-δ</sub> magneto superconductor. Journal of Applied Physics, v. 110, n. 4, p. 043926, ago. 2011. ISSN 0021-8979. Publisher: American Institute of Physics. Disponível em: <<https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.3626824>>.
- LACROIX, C.; MENDELS, P.; MILA, F. (Ed.). Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory. 2011th edition. ed. Berlin: Springer, 2013. ISBN 978-3-642-26676-8.

LANGEVIN, P. M. P. Magnétisme et théorie des électrons. Annales de chimie et de physique, n. 5, p. 70, out. 1905.

LI, J.-R. et al. A stripe phase with supersolid properties in spin-orbit-coupled Bose-Einstein condensates. Nature, v. 543, n. 7643, p. 91–94, mar. 2017. ISSN 1476-4687. Number: 7643 Publisher: Nature Publishing Group. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/nature21431>>.

MAGALHÃES, S. G.; SCHMIDT, A. A. Fermionic Heisenberg model for spin glasses with BCS pairing interaction. Physical Review B, v. 62, n. 17, p. 11686–11693, nov. 2000. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.62.11686>>.

MALDOVAN, M.; THOMAS, E. L. Diamond-structured photonic crystals. Nature Materials, v. 3, n. 9, p. 593–600, set. 2004. ISSN 1476-4660. Number: 9 Publisher: Nature Publishing Group. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/nmat1201>>.

MANABE, S.; HASSELMANN, K.; PARISI, G. The nobel prize in physics 2021. 2021. Disponível em: <<https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2021/press-release/>>.

MARTINIS, J. M. Superconducting phase qubits. Quantum Information Processing, v. 8, n. 2, p. 81–103, jun. 2009. ISSN 1573-1332. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11128-009-0105-1>>.

MASSALKER, Y.; SEMBIRA, A. N.; BARAM, J. Processing characteristics and properties of BiSrCaCuO superconducting glass ceramics prepared by melt-quenching. Journal of Materials Research, v. 8, n. 10, p. 2445–2457, out. 1993. ISSN 2044-5326, 0884-2914. Publisher: Cambridge University Press.

MAY, A. et al. Realisation of a frustrated 3D magnetic nanowire lattice. Communications Physics, v. 2, n. 1, p. 1–9, fev. 2019. ISSN 2399-3650. Number: 1 Publisher: Nature Publishing Group. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/s42005-018-0104-6>>.

MIRANDA, M. M. J. et al. Phase diagram of a frustrated Heisenberg model: From disorder to order and back again. Physical Review B, v. 104, n. 5, p. 054201, ago. 2021. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.104.054201>>.

MOESSNER, R.; RAMIREZ, A. P. Geometrical frustration. Physics Today, v. 59, n. 2, p. 24–29, fev. 2006. ISSN 0031-9228. Publisher: American Institute of Physics. Disponível em: <<https://physicstoday.scitation.org/doi/10.1063/1.2186278>>.

MURTAZAEV, K. S. et al. Ising model on a body-centered cubic lattice with competing exchange interactions in strong magnetic fields. Low Temperature Physics, v. 47, n. 6, p. 478–482, jun. 2021. ISSN 1063-777X. Publisher: American Institute of Physics. Disponível em: <<https://aip.scitation.org/doi/10.1063/10.0004970>>.

NAGATA, S.; KEESOM, P. H.; HARRISON, H. R. Low-dc-field susceptibility of CuMn spin glass. Physical Review B, v. 19, n. 3, p. 1633–1638, fev 1979. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.19.1633>>.

- NAYAK, B. P. Bragg-williams theory of phase transition: Ising model and black hole. Prayas Students' Journal of Physics, 2008.
- NIGGLI, P. Atomic Structure of Minerals. Nature, v. 140, n. 3549, p. 783–784, nov. 1937. ISSN 1476-4687. Number: 3549 Publisher: Nature Publishing Group. Disponível em: <https://www.nature.com/articles/140783a0>.
- NISHIMORI, H. Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing: An Introduction. [S.l.]: Oxford University Press, 2001. Google-Books-ID: w1WvobSSRr0C. ISBN 978-0-19-850941-7.
- OFER, O. et al. Origin of magnetic freezing in pyrochlore  $Y_2Mo_2O_7$ . Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 82, p. 092403, Sep 2010. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.092403>.
- PENSON, K. A.; KOLB, M. Real-space pairing in fermion systems. Physical Review B, v. 33, n. 3, p. 1663–1666, fev. 1986. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.33.1663>.
- PIRES, A. S. T. The Heisenberg model. Theoretical Tools for Spin Models in Magnetic Systems, abr. 2021. Publisher: IOP Publishing. Disponível em: <https://iopscience.iop.org/book/mono/978-0-7503-3879-0/chapter/bk978-0-7503-3879-0ch1>.
- POHLE, R.; YAN, H.; SHANNON, N. Theory of  $Ca_{10}Cr_7O_{28}$  as a bilayer breathing-kagome magnet: Classical thermodynamics and semiclassical dynamics. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 104, p. 024426, Jul 2021. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.104.024426>.
- POOLE, C. P. et al. 5 - Magnetic properties. In: POOLE, C. P. et al. (Ed.). Superconductivity (Third Edition). London: Elsevier, 2014. p. 183–223. ISBN 978-0-12-409509-0. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780124095090000056>.
- PSAROUDAKI, C.; PANAGOPOULOS, C. Skyrmion Qubits: A New Class of Quantum Logic Elements Based on Nanoscale Magnetization. Physical Review Letters, v. 127, n. 6, p. 067201, ago. 2021. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.127.067201>.
- RAMIRES, A. Frustration can be critical. Nature Physics, v. 15, n. 12, p. 1212–1214, dez. 2019. ISSN 1745-2481. Number: 12 Publisher: Nature Publishing Group. Disponível em: <https://www.nature.com/articles/s41567-019-0668-4>.
- RAMIREZ, A. P. Strongly Geometrically Frustrated Magnets. Annual Review of Materials Science, v. 24, n. 1, p. 453–480, ago. 1994. ISSN 0084-6600. Publisher: Annual Reviews. Disponível em: <https://www.annualreviews.org/doi/10.1146/annurev.ms.24.080194.002321>.
- RAMIREZ, A. P. Geometric frustration: Magic moments. Nature, v. 421, n. 6922, p. 483–483, jan. 2003. ISSN 1476-4687. Number: 6922 Publisher: Nature Publishing Group. Disponível em: <https://www.nature.com/articles/421483a>.
- REYNOLDS, C. A. et al. Superconductivity of Isotopes of Mercury. Physical Review, v. 78, n. 4, p. 487–487, maio 1950. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.78.487>.

ROHLF, J. W. Modern Physics from Alpha to  $Z^0$ . 1ª edição. ed. New York: Wiley, 1994. ISBN 978-0-471-57270-1.

RUDERMAN, M. A.; KITTEL, C. Indirect Exchange Coupling of Nuclear Magnetic Moments by Conduction Electrons. Physical Review, v. 96, n. 1, p. 99–102, out. 1954. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.96.99>>.

SACHDEVA, R.; TENGSTRAND, M. N.; REIMANN, S. M. Self-bound supersolid stripe phase in binary Bose-Einstein condensates. Physical Review A, v. 102, n. 4, p. 043304, out. 2020. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.102.043304>>.

SADOC, J.-F.; MOSSERI, R. Geometrical Frustration. Revised edition. Cambridge ; New York: Cambridge University Press, 2006. ISBN 978-0-521-03187-5.

SAHA, S. K. et al. Modeling the spin-peierls transition of spin- $\frac{1}{2}$  chains with correlated states:  $J_1$ – $J_2$  model,  $\text{CuGeO}_3$ , and TTF –  $\text{CuS}_4\text{C}_4(\text{CF}_3)_4$ . Physical Review B, v. 101, n. 5, p. 054411, fev. 2020. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.101.054411>>.

SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J.; DAHMEN, S. R. Mecânica Quântica Moderna. 2ª edição. ed. Porto Alegre: Bookman, 2012. ISBN 978-85-65837-09-5.

SALINAS, S. R. A. Introdução à Física Estatística. 2ª edição. ed. São Paulo: EDUSP, 2013. ISBN 978-85-314-0386-6.

SARKIS, C. L. et al. Partial antiferromagnetic helical order in single-crystal  $\text{Fe}_3\text{PO}_4\text{O}_3$ . Physical Review B, v. 101, n. 18, p. 184417, maio 2020. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.101.184417>>.

SCALAPINO, D. J. The case for  $d_{x^2y^2}$  pairing in the cuprate superconductors. Physics Reports, v. 250, n. 6, p. 329–365, jan. 1995. ISSN 0370-1573. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037015739400086I>>.

SCHMIDT, B.; SHANNON, N.; THALMEIER, P. The frustrated  $J_1$  –  $J_2$  model in high magnetic fields. Journal of Physics: Condensed Matter, v. 19, n. 14, p. 145211, mar. 2007. ISSN 0953-8984. Publisher: IOP Publishing. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0953-8984/19/14/145211>>.

SCHWEIKA, W. et al. Chiral Spin Liquid Ground State in  $\text{YBaCo}_3\text{FeO}_7$ . Physical Review X, v. 12, n. 2, p. 021029, maio 2022. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.12.021029>>.

SHERRINGTON, D.; KIRKPATRICK, S. Solvable Model of a Spin-Glass. Physical Review Letters, v. 35, n. 26, p. 1792–1796, dez. 1975. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.35.1792>>.

SIMUTIS, G. et al. Single-domain stripe order in a high-temperature superconductor. Communications Physics, v. 5, n. 1, p. 1–7, nov. 2022. ISSN 2399-3650. Number: 1 Publisher: Nature Publishing Group. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/s42005-022-01061-4>>.

- STANLEY, H. E. Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena. Revised ed. edição. New York: Oxford University Press, USA, 1987. ISBN 978-0-19-505316-6.
- SUZUKI, M. Decomposition formulas of exponential operators and Lie exponentials with some applications to quantum mechanics and statistical physics. Journal of Mathematical Physics, v. 26, n. 4, p. 601–612, abr. 1985. ISSN 0022-2488. Publisher: American Institute of Physics. Disponível em: <<https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.526596>>.
- TINDALL, J. et al. Dynamical Order and Superconductivity in a Frustrated Many-Body System. Physical Review Letters, v. 125, n. 13, p. 137001, set. 2020. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.125.137001>>.
- TOPAL, U.; AKDOGAN, M. Structural and superconducting properties of YBaCuO superconductors at different atomic compositions. Journal of Alloys and Compounds, v. 503, n. 1, p. 1–5, jul. 2010. ISSN 0925-8388. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925838810010911>>.
- WANG, Y.-L. et al. Switchable geometric frustration in an artificial-spin-ice–superconductor heterosystem. Nature Nanotechnology, v. 13, n. 7, p. 560–565, jul. 2018. ISSN 1748-3395. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/s41565-018-0162-7>>.
- WANG, Y.-L. et al. Rewritable artificial magnetic charge ice. Science, v. 352, n. 6288, p. 962–966, maio 2016. Publisher: American Association for the Advancement of Science. Disponível em: <<https://www.science.org/doi/10.1126/science.aad8037>>.
- WATANABE, H.; SEO, H.; YUNOKI, S. Mechanism of superconductivity and electron-hole doping asymmetry in k-type molecular conductors. Nature Communications, v. 10, n. 1, p. 3167, jul. 2019. ISSN 2041-1723. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/s41467-019-11022-1>>.
- WEIS, J.; GERHARDTS, R. R. Quantum Hall Effect. In: Reference Module in Materials Science and Materials Engineering. Elsevier, 2016. ISBN 978-0-12-803581-8. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780128035818012881>>.
- WEN, J. et al. Experimental identification of quantum spin liquids. npj Quantum Materials, v. 4, n. 1, p. 1–9, abr. 2019. ISSN 2397-4648. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/s41535-019-0151-6>>.
- WIESER, R. Cluster mean-field theory studies of the frustrated two-dimensional quantum-mechanical  $J_1 - J_2$  Heisenberg model. Annals of Physics, v. 427, p. 168414, abr. 2021. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491621000208>>.
- WU, M. K. et al. Superconductivity at 93 k in a new mixed-phase y-ba-cu-o compound system at ambient pressure. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 58, p. 908–910, Mar 1987. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.58.908>>.
- YOON, S. et al. Quantum disordered state in the  $J_1 - J_2$  square-lattice antiferromagnet  $\text{Sr}_2\text{Cu}(\text{Te}_{0.95}\text{W}_{0.05})\text{O}_6$ . Physical Review Materials, v. 5, n. 1, p. 014411, jan. 2021. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevMaterials.5.014411>>.

YUNOKI, S.; SORELLA, S. Two spin liquid phases in the spatially anisotropic triangular Heisenberg model. Physical Review B, v. 74, n. 1, p. 014408, jul. 2006. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.014408>>.

ZENG, H. et al. Kondo effect and superconductivity in niobium with iron impurities. Scientific Reports, v. 11, n. 1, p. 14256, jul. 2021. ISSN 2045-2322. Number: 1 Publisher: Nature Publishing Group. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/s41598-021-93731-6>>.

ZHU, Z.; WHITE, S. R. Spin liquid phase of the  $S = \frac{1}{2}$   $J_1 - J_2$  Heisenberg model on the triangular lattice. Physical Review B, v. 92, n. 4, p. 041105, jul. 2015. Publisher: American Physical Society. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.92.041105>>.



# Apêndices



# APÊNDICE A – Segunda Quantização e o Espaço de Fock

Para a descrição de sistemas quânticos, constituídos por um grande número de partículas idênticas, técnicas mais sofisticadas devem ser empregadas, em comparação com os métodos usuais de funções de onda. Entre estas técnicas está a **Segunda Quantização** (SQ) e o emprego do espaço de Fock (FETTER; WALECKA; PHYSICS, 2003). Basicamente, a SQ trata o problema a partir da indistinguibilidade das partículas, sendo elas férmions ou bósons. Em tal cenário, analisa-se o número de ocupantes em cada estado quântico possível, o chamado **número de ocupação** ( $n$ ) (JR; BOGOLUBOV; GUPTA, 1982). Em função do número de partículas não ser fixo é utilizado o espaço de Fock, sendo ele um espaço de Hilbert para  $N$  partículas idênticas. Desta forma, um estado  $\lambda$  no espaço de Fock é dado por

$$|n_0, n_1, \dots, n_k\rangle_\lambda = |\psi_0\rangle^{n_0} |\psi_1\rangle^{n_1} \dots |\psi_k\rangle^{n_k}, \quad (\text{A.1})$$

onde  $|\psi_i\rangle$  é o estado de partícula única no espaço de Hilbert para  $n_i$  partículas idênticas. Além disso, o número total de partículas  $N$  é a soma das partículas em cada estado

$$N = \sum_{i=0}^k n_i. \quad (\text{A.2})$$

Desta forma, os operadores de destruição ( $c$ ) e criação ( $c^\dagger$ ) podem ser utilizados para a construção e operação de cada estado. Neste sentido, o  $c_i$  destrói uma partícula no estado  $i$  e  $c_i^\dagger$  constrói uma partícula no estado  $i$ . Desta maneira, as operações ocorrem da seguinte forma

$$c_i |i\rangle = |0\rangle, \quad (\text{A.3})$$

$$c_i^\dagger |0\rangle = |i\rangle, \quad (\text{A.4})$$

sendo  $|0\rangle$  o estado de vácuo. Além disso, o operador  $n_i$  é distinto para bósons e férmions

$$n_i = \begin{cases} 0, 1 & \text{férmions,} \\ 0, 1, 2, \dots & \text{bósons,} \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

visto que, a ocupação de férmions é limitada pelo princípio de exclusão de Pauli, que não permite mais de um férmion ocupar o mesmo estado quântico. Do mesmo modo, a comutatividade dos operadores é distinta entre bósons e férmions,

$$[c_i, c_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [c_i, c_j] = [c_i^\dagger, c_j^\dagger] = 0 \quad (\text{bósons}), \quad (\text{A.6})$$

$$\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \quad \{c_i, c_j\} = \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0 \quad (\text{férmions}), \quad (\text{A.7})$$

para bósons as operações comutam e para férmions anti-comutam. Por fim, a utilização da SQ permite o tratamento de sistemas quânticos compostos por muitas partículas idênticas.



## APÊNDICE B – Tricriticalidade

Para determinar as transições de fase de segunda ordem e o ponto tricrítico, a energia livre foi expandida em série de potência das magnetizações locais  $m_i = \langle \hat{S}_i^z \rangle_0$  (Teoria de Landau (STANLEY, 1987)). Começando pela Eq. (4.32) e assumindo o cluster da Fig. 14. A fase SAF equivale a  $m \equiv m_1 = m_2 = -m_3 = -m_4$  (ou  $m \equiv m_1 = m_4 = -m_2 = -m_3$ ), sendo assim

$$F_{SAF} = a_0 + \frac{a_2}{2}m^2 + \frac{a_4}{4!}m^4 + O(m^6), \quad (\text{B.1})$$

onde

$$a_2 = 12J_2 - 9\beta J_2^2 \langle \bar{S}_{SAF}^2 \rangle_0, \quad (\text{B.2})$$

$$a_4 = -3^4 \beta^3 J_2^4 \left[ \langle \bar{S}_{SAF}^4 \rangle_0 - 3 \langle \bar{S}_{SAF}^2 \rangle_0^2 \right], \quad (\text{B.3})$$

sendo  $\bar{S}_{SAF} = -(\hat{S}_1^z + \hat{S}_2^z) + (\hat{S}_3^z + \hat{S}_4^z)$  (ou  $\bar{S}_{SAF} = -(\hat{S}_1^z + \hat{S}_4^z) + (\hat{S}_2^z + \hat{S}_3^z)$ ). A transição de segunda ordem entre SAF/PM acontece quando  $a_2 = 0$  e  $a_4 > 0$ , sendo o ponto tricrítico localizado quando  $a_2 = 0$  e  $a_4 = 0$ .

Para localizar as transições de segunda ordem entre AF/PM tomamos a magnetização como  $m \equiv m_1 = -m_2 = m_3 = -m_4$ , sendo assim

$$F_{AF} = b_0 + \frac{b_2}{2}m^2 + \frac{b_4}{4!}m^4 + O(m^6), \quad (\text{B.4})$$

onde

$$b_2 = (-8J_1 + 12J_2) - \beta(-2J_1 + 3J_2)^2 \langle \bar{S}_{AF}^2 \rangle_0, \quad (\text{B.5})$$

$$b_4 = -\beta^3(-2J_1 + 3J_2)^4 \left[ \langle \bar{S}_{AF}^4 \rangle_0 - 3 \langle \bar{S}_{AF}^2 \rangle_0^2 \right] \quad (\text{B.6})$$

sendo  $\bar{S}_{AF} = (\hat{S}_1^z + \hat{S}_3^z) - (\hat{S}_2^z + \hat{S}_4^z)$ . A transição de segunda ordem entre AF/PM acontece quando  $b_2 = 0$  e  $b_4 > 0$ , sendo o ponto tricrítico localizado quando  $b_2 = 0$  e  $b_4 = 0$ .



## APÊNDICE C – Códigos

Para obtenção dos resultados, os seguintes códigos em linguagem *FORTRAN* foram desenvolvidos:

- As funções dos operadores  $\hat{S}^z$ ,  $c$ ,  $c^\dagger$  e  $\hat{H}$  estão presentes nos respectivos códigos C.4, C.1, C.2 e C.3;
- Para a construção da matriz hamiltoniana, a sub-rotina utilizada se encontra no Código C.5. Operações de multiplicação envolvendo matrizes foi utilizado a função descrita no Código C.6, utilizando paralelismo, pela biblioteca *OPENMP*;
- O cálculo de valor médio esperado foi efetuado pela função presente no Código C.7;
- Por fim, parte do código principal, que varre a temperatura para a fase AF no modelo fermiônico, esta escrito no Código C.8.

Código C.1 – Função operador de Spin.

```

1  function OSz(au, i) result(aun)      ! Operador Sz
2  integer, intent(in):: au(2)
3  integer, intent(in):: i
4  integer:: aun(2)
5  aun = au
6  if ((btest(aun(2), i)).and.(btest(aun(2), i+1))) then
7    aun(1) = 0
8  else if (btest(aun(2), i)) then
9    aun(1) = au(1)
10 else if (btest(aun(2), i+1)) then
11   aun(1) = -au(1)
12 else
13   aun(1) = 0
14 end if
15 end function OSz

```

Código C.2 – Função operador destruição.

```

1  function OD(au, i) result(aun)      ! Operador destruição, au-> autovetor,
    i-> posição destruída
2  integer, intent(in):: au(2)
3  integer, intent(in):: i
4  integer:: aun(2)
5  aun = au
6  if (aun(1)<1) then
7    return
8  else if (btest(aun(2), i)) then    ! verifica a ocupação
9    aun(2)=ibclr(aun(2), i)          ! destroi na posição i
10 else
11   aun(1)=0                          ! caso não esteja ocupado manda o valor
    zero
12 end if
13 end function OD

```

Código C.3 – Função operador criação.

```

1  function OC(au, i) result(aun)      ! Operador criação, au-> autovetor,
    i-> posição destruída
2  integer, intent(in):: au(2)
3  integer, intent(in):: i
4  integer:: aun(2)
5  aun = au
6  if (aun(1)<1) then
7    return
8  else if (btest(aun(2), i)) then    ! verifica a ocupação
9    aun(1)=0                          ! caso esteja ocupado autovalor = 0
10 else
11   aun(2)=ibset(aun(2), i)           ! cria na posição i
12 end if
13 end function OC

```

## Código C.4 – Função operador hamiltoniano.

```

1  real(dp) function hamilt(au1, au2) result(ham) ! sanduiche do operador H-->
    <av1|H|av2>
2  integer, intent(in):: au1, au2
3  integer:: av1(2), av2(2)
4  av1(1) = 1
5  av2(1) = 1
6  av1(2) = au1
7  av2(2) = au2
8  ham = 0.0_dp
9
10 ! OPERADORES ATUAM NO KET DA DIREITA
11 ! CADA SITIO CONTEM 2 ESPAÇOS PARA OCUPACAO LOGO
    OSz(autovetor, 2*i) com i = 0 ate N-1
12 ! Ex.:
13 ! ham = ham+delta(av1, OSz(OSz(av2, 2), 0)) ! E + <av1|Sz_1 Sz_2|av2>
14 ! ham = ham+delta(av1, OC(OD(av2, 0), 0)) ! E + <av1|Oc_0
    Od_0|av2>
15 ! ham = ham+delta(av1, OC(OC(OD(OD(av2, 0), 1), 2), 3)) ! E +
    <av1|Oc_3 Oc_2 Od_1 Od_0|av2>
16
17 ham = ham + (J1)*(delta(av1, OSz(OSz(av2, 2), 0))+delta(av1, OSz(OSz(av2,
    4), 0))) ! J_1 do sitio 1/2 e 1/3
18 ham = ham + (J1)*(delta(av1, OSz(OSz(av2, 6), 2))+delta(av1, OSz(OSz(av2,
    6), 4))) ! J_1 de 2/4 e 3/4
19 ham = ham + (J2)*(delta(av1, OSz(OSz(av2, 6), 0))+delta(av1, OSz(OSz(av2,
    4), 2))) ! J_2 de 1/4 e 2/3
20 ham = ham-g*delta(av1, OC(OC(OD(OD(av2, 2), 3), 1), 0)) ! g de 1/2
21 ham = ham-g*delta(av1, OC(OC(OD(OD(av2, 4), 5), 1), 0)) ! g de 1/3
22 ham = ham-g*delta(av1, OC(OC(OD(OD(av2, 6), 7), 3), 2)) ! g de 2/4
23 ham = ham-g*delta(av1, OC(OC(OD(OD(av2, 6), 7), 5), 4)) ! g de 3/4
24 ham = ham-ex_H*(delta(av1, OSz(av2, 0))+delta(av1, OSz(av2,
    2))+delta(av1, OSz(av2, 4))+delta(av1, OSz(av2, 6)))
25
26 end function hamilt

```

Código C.5 – Sub-rotina para calculo da matriz  $\mathbf{H}$ , podendo alterar entre clássico e fermiônico.

```

1  subroutine matrizH ! cria a matriz H
2  implicit none
3  integer:: i, j
4  matH = 0.0_dp
5  do i = 0, NA
6    if (((any(i == Classico)).eqv(.false.)).and.(chave)) cycle ! verifica se i
      pertence ao clássico
7    do j = i, NA
8      if (((any(j == Classico)).eqv(.false.)).and.(chave)) cycle ! verifica se
      j pertence ao clássico
9      matH(i, j) = hamilt(i, j) ! calcula o E(i, j) pelo operado H
10     matH(j, i) = matH(i, j)
11   end do
12 end do
13 end subroutine matrizH

```

Código C.6 – Multiplicação de matrizes utilizando paralelismo.

```

1  function multiplic(mat1, mat2) result(matr)
2  implicit none
3  real(dp):: mat1(0:NA, 0:NA), mat2(0:NA, 0:NA), matr(0:NA, 0:NA)
4  integer:: ii, j, k
5  matr = 0.0_dp
6  !$omp parallel private(ii, j, k)
7  !$omp do schedule(static)
8    do ii = 0, NA
9      do k = 0, NA
10     do j = 0, NA
11       matr(ii, j) = matr(ii, j) + mat1(ii, k)*mat2(k, j)
12     end do
13   end do
14 end do
15 !$omp end do
16 !$omp end parallel
17 end function

```

Código C.7 – Função que calcula o valor médio esperado do observável  $O$ .

```

1  real(dp) function media_O(mat_O, i, E0, Z) result(media) ! calcula a media do
   operador O
2    real(dp), intent(in):: E0(0:NA), mat_O(0:NA, 0:NA, 0:N-1)
3    real(dp):: beta, Z
4    integer, intent(in):: i
5    integer:: j
6    beta = 1.0_dp/T
7    media = 0.0_dp
8    do j = 0, NA
9      if (((any(j == Classico)).eqv(.false.)) .and.(chave)) cycle
10     media = media+mat_O(j, j, i)*exp(-beta*(E0(j)-emin))
11   end do
12   media = media/Z
13 end function media_O

```

Código C.8 – Parte do código principal que varre a temperatura.

```

1  J2 = 0.0_dp
2  call matrizH
3  T = 0.0001_dp
4  do while(T <= 2.0_dp)
5    h = 0.0_dp
6    mud = 0.0_dp
7    muc = 0.0_dp
8    call pontofixo(h, mud, muc, matHd)
9    do i = 0, NA
10     E0(i) = matHd(i, i)
11   end do
12   emin = minval(E0)
13   Z = funZ(E0) ! calcula a função de partição com ma matrizH
14   do i = 0, N-1
15     Szi(i) = media_O(mat_Sz, i, E0, Z) ! calcula a media Sz_i
16     Gcm(i) = media_O(mat_Gc, i, E0, Z)
17     Gdm(i) = media_O(mat_Gd, i, E0, Z)
18     ff(i) = Szi(i)*h(i)+muc(i)*Gdm(i)+mud(i)*Gcm(i)
19   end do
20   F = emin-T*log(Z)+sum(ff)*0.50_dp
21   m = (Szi(0)+Szi(N-1))/2.0_dp
22   write(10, '(8f11.6)') T, F, m, h(0), mud(0), media_quad(E0, Z),
   media_prime(E0, Z), media_segun(E0, Z)
23   write(20, '(9f11.6)')T, Gcm, Gdm
24   T = T+0.01_dp
25 end do
26 print*, "OK"

```