



Modelo $J_1 - J_2$ Frustrado com Campos Uniforme e Aleatório

Ezequiel Lopes Soares^{1*}; Matheus Jatkoske Lazo¹
Carlos Alberto Vaz de Moraes Junior²; Fábio Mallmann Zimmer³

Resumo: Este trabalho investiga efeitos magnéticos desordenados e frustrados em uma rede quadrada 2×2 (4 sítios) utilizando o modelo $J_1 - J_2$ frustrado com campos aleatórios locais de spins de Ising (RFIM). Os parâmetros J_1 e J_2 representam interações entre sítios primeiros e segundos vizinhos. A frustração por interação ocorre quando $J_2 < 0$ (antiparalelo) e $J_1 > 0$ (paralelo), resultando em um sistema altamente degenerado sem estado de energia mínima bem definido. Utilizando métodos de campo médio em cluster, investigamos os efeitos dos campos aleatórios (h_0) e externos uniformes (h_u) nos parâmetros de ordem. Nossos resultados mostram que, para $h_u = h_0 = 0$, ocorrem transições entre as fases antiferromagnética (AF) e paramagnética (PM) para $g \leq 0.5$, e entre as fases super antiferromagnética (SAF) e PM para $g \geq 0.5$. Ajustando os campos h_u e h_0 a valores não nulos, identificamos uma rica termodinâmica, com tricriticalidade nas transições AF/PM e SAF/PM, e magnetização induzida na presença de h_u . Além disso, observamos que h_0 suprime mais significativamente as fases AF e SAF do que h_u . Na região de máxima frustração ($g = 0.5$), a supressão de AF e SAF é ainda mais pronunciada, e todas as transições são de primeira ordem. Platôs nas curvas de magnetização em função de h_u são observados, sugerindo que h_0 pode desempenhar um papel importante na formação de platôs adicionais de magnetização.

Palavras-chave: Magnetismo; Frustração; Campo Médio em Clusters; RFIM; Platôs de Magnetização.

*elsoares@protonmail.com

¹Instituto de Matemática, Física e Estatística - Universidade Federal do Rio Grande.

²Instituto de Física e Matemática - Universidade Federal de Pelotas.

³Instituto de Física - Universidade Federal do Mato Grosso do Sul.

1 INTRODUÇÃO

A pesquisa e análise dos fenômenos associados às fases magnéticas desempenham um papel crucial em diversas áreas científicas e tecnológicas, especialmente na física da matéria condensada (Binder e Young, 1986 e Psaroudaki e Panagopoulos, 2021). Particular interesse acadêmico é posto na análise das ordens magnéticas na presença de frustração e desordem mediada pelo modelo de Ising de campo aleatório (RFIM¹), como em certos materiais magnéticos (Duijn *et al.*, 2004). É sugerido que o mecanismo de frustração tem papel fundamental em diversos fenômenos magnéticos exóticos (Ramirez, 1994 e Ramirez, 2003). Nesse contexto, o estudo de modelos teóricos com frustração e desordem a partir da implementação de modelagem computacional são fundamentais para a compreensão desses fenômenos.

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

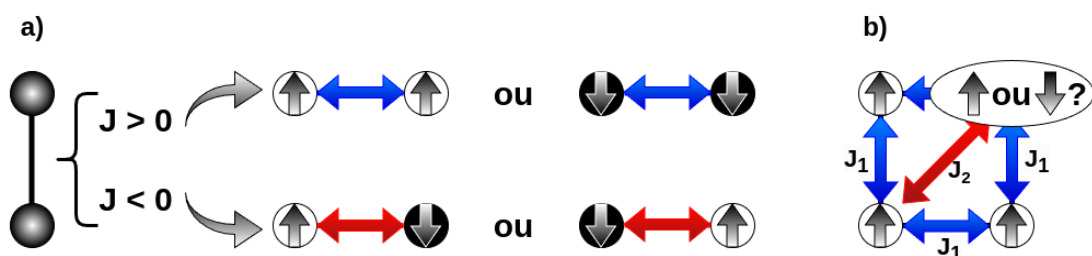


Figura 1: a) Esquema que ilustra os tipos de energia de interação, J , entre os sítios, em que cada um destes representa um estado de spins de Ising, $+1$ ou -1 . b) Ilustração de uma rede de sítios magnéticos frustrados. Fonte: Os autores.

Uma característica interessante desse modelo, exemplificada na Figura 1-b, é a chamada frustração por interação ($g = J_2/|J_1|$), que ocorre quando $J_2 < 0$ (antiparalelo, $\uparrow\downarrow$ ou $\downarrow\uparrow$) em uma rede com interações $J_1 > 0$ (paralelas, $\uparrow\uparrow$ ou $\downarrow\downarrow$). Nesse cenário, não é possível encontrar um único estado de spin que satisfaça simultaneamente todas as interações, resultando em um sistema altamente degenerado, ou seja, sem um estado de menor energia definido. Além disso, é possível introduzir desordem no modelo por meio de campos aleatórios locais RFIM nos sítios da rede de spins. Isso seria um paralelo à diluição de impurezas em uma liga metálica (Ahrens *et al.*, 2013).

O campo uniforme externo também é um elemento fundamental na modelagem, pois aproxima o comportamento do sistema ao que é observado experimentalmente. Muitos métodos de detecção de propriedades magnéticas, como a ressonância magnética e a

¹Random Field Ising Model.

magnetometria, requerem a aplicação de um campo externo para estimular as respostas do material (Lundgren, Svedlindh, e Beckman, 1981 e Wosnitzer, Zvyagin, e Zherlitsyn, 2016). Além disso, em materiais reais, a distribuição dos constituintes fundamentais não é perfeitamente uniforme, o que pode gerar a influência de campos internos. Portanto, a inclusão de um campo uniforme no modelo reflete melhor as condições reais, onde há heterogeneidades que podem induzir efeitos semelhantes aos de um campo externo aplicado.

Nesse contexto, este trabalho tem como objetivo analisar computacionalmente o comportamento de sistemas magneticamente frustrados na presença de RFIM e campo uniforme externo em uma rede 2x2 (4 sítios). Para aproximar os resultados obtidos de comportamentos macroscópicos, será utilizada a aproximação de campo médio em clusters. Pretendemos identificar parâmetros de ordem na rede, que estão diretamente relacionados a observáveis físicos, como a magnetização média. Adicionalmente, buscaremos identificar pontos críticos de transição de fase e determinar grandezas termodinâmicas relevantes, oferecendo uma compreensão mais aprofundada do comportamento da frustração magnética associada a desordem por meio do RFIM.

2 METODOLOGIA

A fim de realizar a modelagem computacional, uma rede infinita foi aproximada e dividida em clusters (sub redes), conforme ilustrado na Figura 2. A rede intra-cluster foi resolvida de forma exata, enquanto as sub redes inter-cluster foram tratadas com uma aproximação baseada em campo médio.

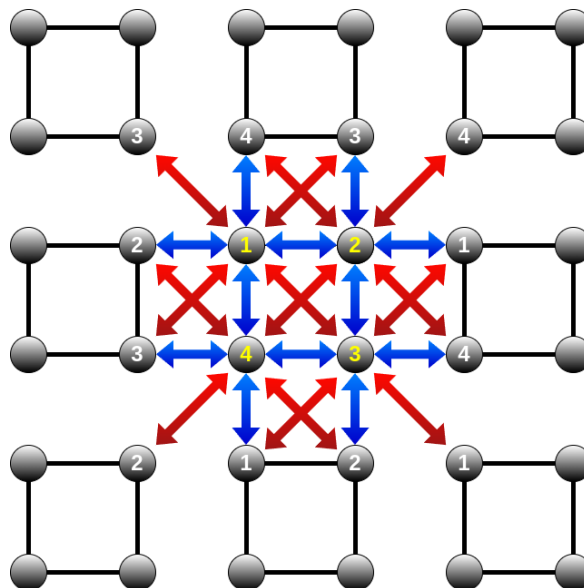


Figura 2: Esquema da rede intra-cluster (números amarelos) e inter-cluster (números brancos). Fonte: Os autores.

Foi elaborado um código em FORTRAN, em que a partir do modelo, pudessem ser obtidos parâmetros de ordem, pontos críticos de transição de fase, além de determinar

grandezas termodinâmicas relevantes. A escolha da linguagem FORTRAN foi motivada pela sua eficácia computacional e adequação para lidar com sucessivos cálculos em loop.

Aplicando o algoritmo numérico descrito através de cálculos computacionais em um cluster 2×2 , ou seja $N = 4$ sítios no modelo frustrado $J_1 - J_2$, sem campos, com campos locais aleatórios e com campo externo uniforme, analisamos os parâmetros de ordem dos sistemas e as energias livres nos pontos de transição de fase. Especificamente, os resultados apresentados a seguir foram obtidos com J_1 mantido constante ($J_1 = 1$), de forma que: $0 \leq J_2/|J_1| \leq 1$, respeitando-se às condições especificadas na Figura 3. A constante de Boltzmann é considerada adimensionalmente e fixada em $k_B = 1$. Além disso, cada sítio da rede pode assumir duas configurações de spins de Ising possíveis, $S = \pm 1$.

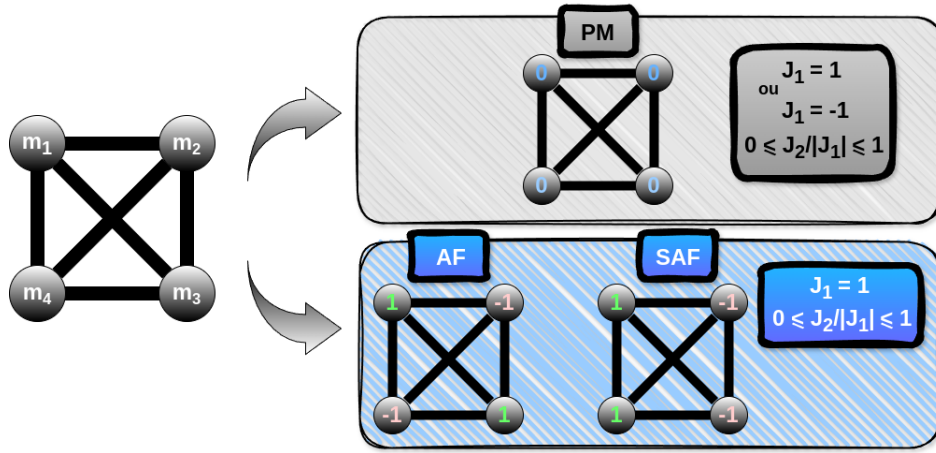


Figura 3: Chutes iniciais das magnetizações locais de cada sítio da rede para aproximação de campo médio. Fonte: Os autores.

O Hamiltoniano do modelo é dado pela seguinte expressão:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{intra} + \mathcal{H}_{inter} + \mathcal{H}_h, \quad (1)$$

onde \mathcal{H}_{intra} se refere à contribuição intra-cluster de solução exata, \mathcal{H}_{inter} à contribuição inter-cluster da solução obtida com a aproximação de campo médio, e \mathcal{H}_h à contribuição dos campos uniforme e aleatório.

Explicitando cada termo, temos:

$$\mathcal{H}_{intra} = J_1 \sum_{(ij)_1}^N S_i S_j + J_2 \sum_{(ij)_2}^N S_i S_j, \quad (2)$$

$$\mathcal{H}_{inter} = J_1 \sum_{(ij)_3}^N \left(S_i m_j - \frac{m_i m_j}{2} \right) + J_2 \sum_{(ij)_4}^N \left(S_i m_j - \frac{m_i m_j}{2} \right), \quad (3)$$

$$\mathcal{H}_h = - \sum_{i=1}^N (h_u + h_i) S_i, \quad (4)$$

onde os índices (i, j) referem-se ao par de sítios no cluster, sendo que $S_{ij} = \pm 1$. $J_{1,2}$ é a energia de interação de um par de sítios ij , h_u é o campo uniforme externo e h_i refere-se

ao campo aleatório, cujos valores, neste trabalho, são determinados por uma distribuição bimodal, dada por:

$$\mathcal{P}(h_i) = \frac{1}{2} [\delta(h_i - h_0) + \delta(h_i + h_0)], \quad (5)$$

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

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

$$m = \frac{1}{N} \text{Tr} \left[\left(\sum_i S_i \right) \frac{e^{-\beta \mathcal{H}}}{Z} \right], \quad (6)$$

em que $N = 4$ é o número de sítios na rede, $\beta = 1/kT$, com k sendo a constante de Boltzmann (considerado $k = 1$) e T a temperatura. O termo Z é a função partição total.

A aproximação de campo médio envolve equações auto-consistentes que requerem chutes iniciais para os valores de magnetização local da rede (Figura 3). Cada ordem magnética é caracterizada por um arranjo específico de spins, que será utilizado como ponto de partida para a aproximação de campo médio. A magnetização média da rede será $m_{med} = (m_1 + m_2 + m_3 + m_4)/4$.

3 RESULTADOS

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

Primeiramente, analisamos o modelo com campos nulos ($h_0/|J_1| = h_u/|J_1| = 0$), comparando os resultados com a referência Jin *et al.* (2013). O parâmetro de ordem foi inferido a partir da magnetização dos sistemas AF e SAF em função da temperatura, $T/|J_1|$, como mostrado na Figura 4-a,b. Observamos que, com o aumento de $T/|J_1|$, a magnetização diminui até se anular, definindo a transição para a fase PM. À medida que $g \rightarrow 0,5$ (frustração máxima), $T_c/|J_1|$ diminui. Além disso, 4-b indica transições SAF/PM de primeira ordem para $g = 0,5$ e $0,6$. O campo uniforme reduz $T_c/|J_1|$ e induz magnetização residual ($m \neq 0$), como visto em 4-c,d. O aumento dos campos aleatórios locais, mostrado em 4-e,f, reduz $T_c/|J_1|$ e favorece transições de primeira ordem.

Consequentemente, diagramas de fase foram construídos para examinar de forma combinada os efeitos da frustração, dos campos aleatórios e do campo uniforme no sistema magnético proposto. Na Figura 5-a, observa-se o diagrama do modelo com campos nulos. Na região $g < 0,5$, identificam-se pontos de transição entre as fases AF

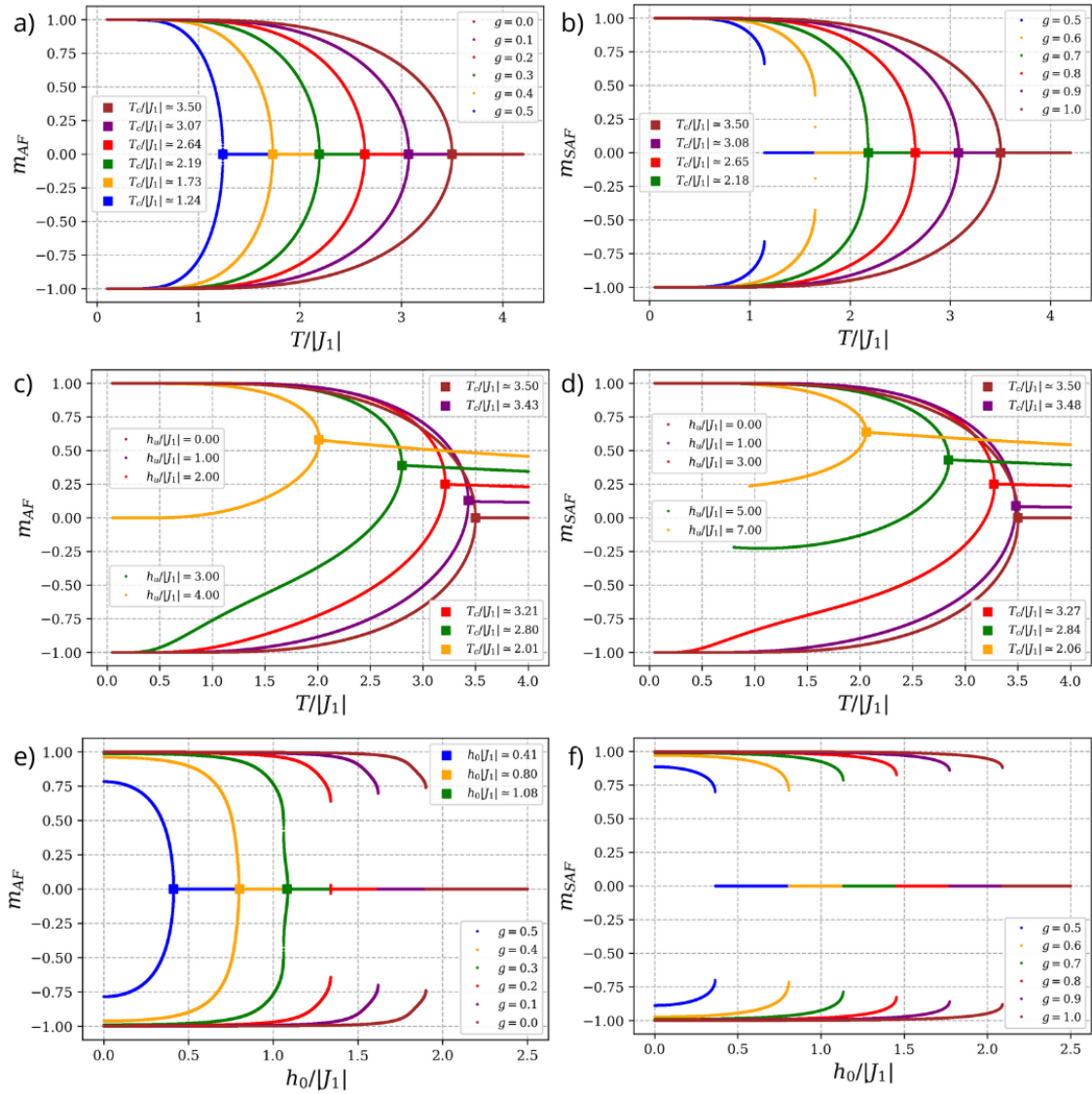


Figura 4: Gráficos do parâmetros de ordem sob influência das variáveis: frustração, campos aleatórios locais e campo uniforme externo. Fonte: Os autores.

e PM. O aumento de g reduz $T_c/|J_1|$, indicando uma relação direta entre o aumento da frustração e a correspondente indução de desordem no sistema, com a máxima frustração ocorrendo em $g \approx 0,5$. Na região $g > 0,5$, são observadas transições entre as fases SAF e PM.

Com a aplicação de um campo uniforme h_u , como mostrado nas Figuras 5-b e 6-a, as regiões das fases ordenadas AF e SAF se reduzem, dando lugar à fase MI, que, embora desordenada, apresenta indução de magnetização residual decorrente de h_u . Além disso, o campo h_u tende a induzir mais transições de primeira ordem para AF/MI e de segunda ordem para SAF/MI. Aplicando os campos aleatórios locais h_0 , como visto em 5-c e 6-b, nota-se um aumento da fase desordenada PM em detrimento das fases ordenadas AF e SAF, o que está de acordo com o esperado aumento de desordem no sistema devido à introdução de campos aleatórios locais nos sítios da rede. Também foi observado que

h_0 provoca mais transições de primeira ordem tanto para AF/PM quanto para SAF/PM. Por fim, em 5-d e 6-c, analisam-se os efeitos combinados de h_0 e h_u no sistema frustrado, onde uma região ainda maior da fase desordenada MI é observada, com mais transições de primeira ordem para AF/MI e de segunda ordem para SAF/MI.

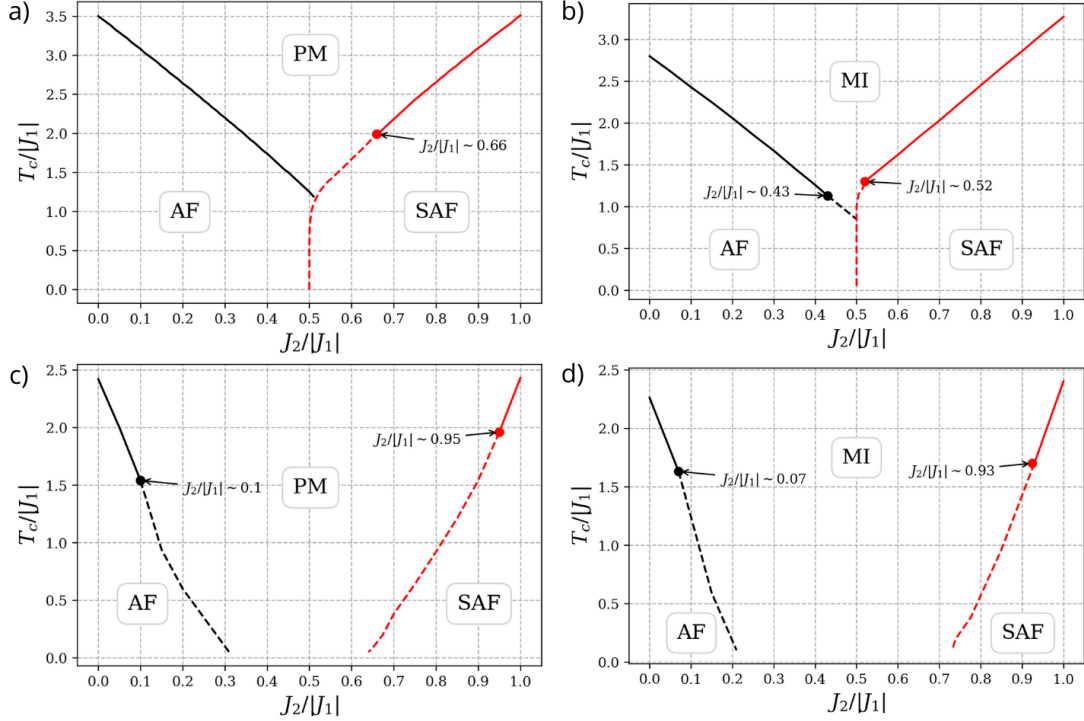


Figura 5: Diagramas de fases do modelo $J_1 - J_2$ com: **a)** Campos nulos; **b)** Campo uniforme $h_u/|J_1| = 3.0$; **c)** Campos aleatórios $h_0/|J_1| = 1.5$; e **d)** Campos aleatórios e uniforme $h_0/|J_1| = h_u/|J_1| = 1.5$. Linhas tracejadas referem-se a transições de primeira ordem e contínuas a transições de segunda ordem. Fonte: Os autores.

Em baixas temperaturas ($T/|J_1| < 0.05$), observam-se platôs nas curvas de magnetização em função de $h_u/|J_1|$, ajustando-se a frustração. Isso indica que $h_0/|J_1|$ pode influenciar na formação de platôs adicionais, como mostrado na Figura 7. O sistema frustrado apresenta um platô central em $1/2$ da magnetização de saturação. Com o aumento de $h_0/|J_1|$, surgem até sete novos platôs em frações da magnetização de saturação, sugerindo um padrão fracionário específico.

4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Em conclusão, este estudo elucidou comportamentos intrigantes de fases magnéticas em sistemas complexos, com foco na influência da frustração de interações e campos aleatórios no modelo $J_1 - J_2$ em uma rede quadrada. A abordagem metodológica, combinando RFIM e aproximação de campo médio, permitiu investigar como se comportam grandezas física termodinâmicas e observáveis macroscópicos de sistemas magnéticos quando associados a frustração e desordem. Além disso, os resultados indicam uma relação entre o surgimento de platôs de magnetização e campos aleatórios locais, abrindo caminho para

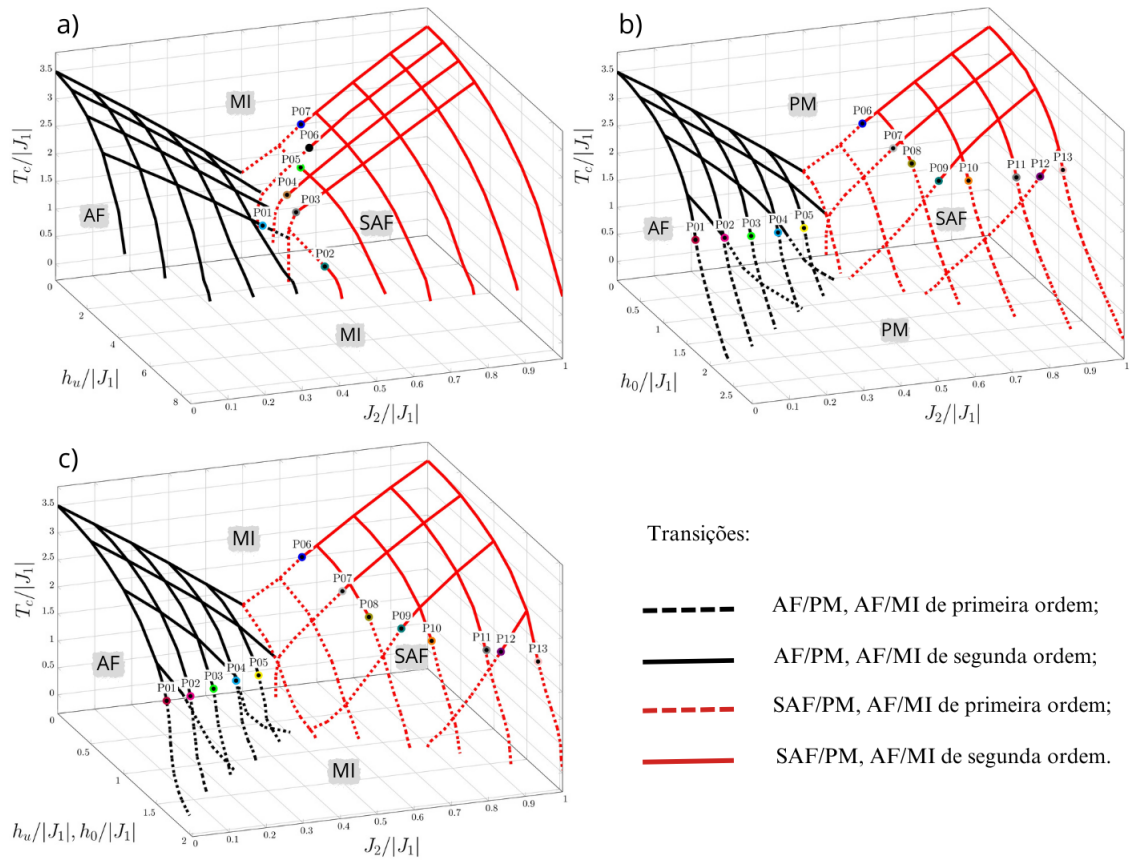


Figura 6: Diagrama de fases do modelo $J_1 - J_2$ com: **a)** Campo uniforme externo; **b)** Campos aleatórios locais; **c)** Campos aleatórios locais e uniforme externo. Os respectivos pontos tricríticos constam na Tabela 1. Fonte: Os autores.

investigações futuras. Olhando para o futuro, o escopo deste trabalho pode ser ampliado para explorar mais a fundo os efeitos combinados de frustração e campos aleatórios.

AGRADECIMENTOS

Agradecimentos à CAPES pelo fomento. Em especiais à Universidade Federal do Rio Grande (FURG), ao PPG-Física/IMEF e ao Grupo Teórico-Computacional de Matéria Condensada (GTCMC) da Universidade Federal de Pelotas (UFPel).

Tabela 1: Pontos tricríticos dos diagramas da Figura 6, em que $g = J_2/|J_1|$, $T'_c = T_c/|J_1|$, $h'_u = h_u/|J_1|$, $h'_0 = h_0/|J_1|$ e $h'_{0,u}$ representa a combinação de $h'_u = h_u/|J_1|$ e $h'_0 = h_0/|J_1|$.

a)	g	h'_u	T'_c	b)	g	h'_0	T'_c	c)	g	$h'_{0,u}$	T'_c
P01	0.43	3.00	1.13	P01	0.00	1.67	1.79	P01	0.00	1.65	1.73
P02	0.50	5.30	0.93	P02	0.10	1.48	1.54	P02	0.10	1.45	1.51
P03	0.52	3.00	1.30	P03	0.20	1.27	1.36	P03	0.20	1.24	1.33
P04	0.54	2.00	1.34	P04	0.30	1.06	1.12	P04	0.30	1.02	1.15
P05	0.60	1.40	1.63	P05	0.40	0.82	0.93	P05	0.40	0.80	0.92
P06	0.64	1.00	1.85	P06	0.66	0.00	2.00	P06	0.66	0.00	2.00
P07	0.66	0.00	2.00	P07	0.68	0.50	1.92	P07	0.68	0.50	1.91
				P08	0.70	0.74	1.81	P08	0.70	0.79	1.74
				P09	0.74	1.00	1.66	P09	0.75	1.00	1.72
				P10	0.80	1.16	1.74	P10	0.80	1.18	1.65
				P11	0.90	1.39	1.90	P11	0.90	1.45	1.70
				P12	0.95	1.50	1.96	P12	0.93	1.50	1.70
				P13	1.00	1.59	2.11	P13	1.00	1.63	1.91

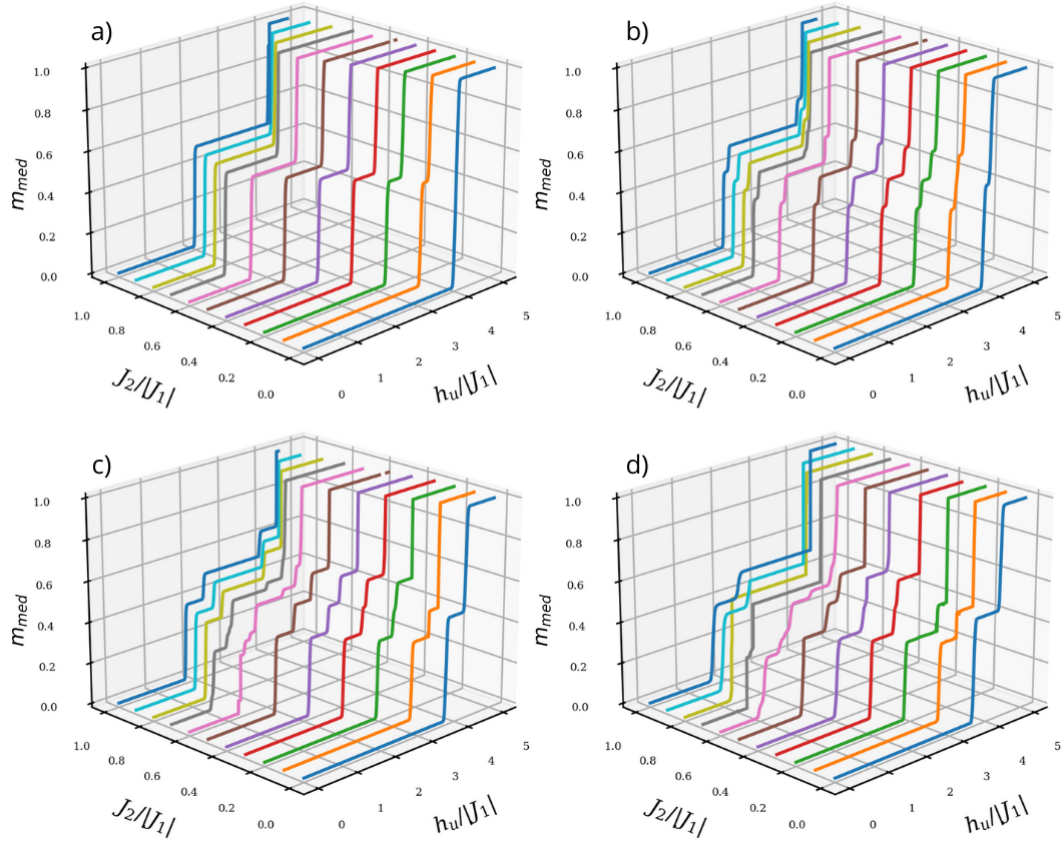


Figura 7: Gráficos dos Parâmetros de ordem com $T/|J_1| = 0.05$. **a)** $h_0/|J_1| = 0$; **b)** $h_0/|J_1| = 0.08$; **c)** $h_0/|J_1| = 0.25$; e **d)** $h_0/|J_1| = 0.35$. Fonte: Os autores.

REFERÊNCIAS

- Abalmasov, V. A. e B. E. Vugmeister (2023). “Metastable states in the J1-J2 Ising model”. Em: *Physical Review E* 107.3. DOI: 10.1103/physreve.107.034124. URL: <https://doi.org/10.1103/physreve.107.034124>.
- Ahrens, B., J. Xiao, A. K. Hartmann, e H. G. Katzgraber (2013). “Diluted antiferromagnets in a field seem to be in a different universality class than the random-field Ising model”. Em: *Physical Review B* 88.17. DOI: 10.1103/physrevb.88.174408. URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.88.174408>.
- Binder, K. e A. P. Young (1986). “Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions”. Em: *Rev. Mod. Phys.* 58 (4), pp. 801–976. DOI: 10.1103/RevModPhys.58.801. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.58.801>.
- van Duijn, J., B. D. Gaulin, M. A. Lumsden, J. P. Castellan, e W. J. L. Buyers (2004). “Random Fields and the Partially Paramagnetic State of CsCo_{0.83}Mg_{0.17}Br₃: Critical Scattering Study”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 92 (7), p. 077202. DOI: 10.1103/PhysRevLett.92.077202. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.92.077202>.
- Jin, S., A. Sen, W. Guo, e A. W. Sandvik (2013). “Phase transitions in the frustrated Ising model on the square lattice”. Em: *Phys. Rev. B* 87 (14), p. 144406. DOI: 10.1103/PhysRevB.87.144406. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.144406>.
- Lundgren, L., P. Svedlindh, e O. Beckman (1981). “Measurement of complex susceptibility on a metallic spin glass with broad relaxation spectrum”. Em: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 25.1, pp. 33–38. DOI: [https://doi.org/10.1016/0304-8853\(81\)90144-X](https://doi.org/10.1016/0304-8853(81)90144-X). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/030488538190144X>.
- Psaroudaki, C. e C. Panagopoulos (2021). “Skyrmion Qubits: A New Class of Quantum Logic Elements Based on Nanoscale Magnetization”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 127 (6), p. 067201. DOI: 10.1103/PhysRevLett.127.067201. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.127.067201>.
- Ramirez, A. P. (1994). “Strongly Geometrically Frustrated Magnets”. Em: *Annual Review of Materials Science* 24.1, pp. 453–480. DOI: 10.1146/annurev.ms.24.080194.002321. URL: <https://doi.org/10.1146/annurev.ms.24.080194.002321>.
- Ramirez, A. P. (2003). “Geometric frustration: Magic moments”. Em: *Nature* 421 (6922), p. 483. DOI: 10.1038/421483a. URL: <https://doi.org/10.1038/421483a>.
- Wosnitza, J, S. A. Zvyagin, e S Zherlitsyn (2016). “Frustrated magnets in high magnetic fields—selected examples”. Em: *Reports on Progress in Physics* 79.7, p. 074504. DOI: 10.1088/0034-4885/79/7/074504. URL: <https://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/79/7/074504>.