**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS**

Michel Marcos Jordão Miranda

**Mecanismo de campo-aleatório induzido por diluição de
acoplamentos em um modelo de Heisenberg frustrado**

São Carlos

2020

Michel Marcos Jordão Miranda

Mecanismo de campo-aleatório induzido por diluição de acoplamentos em um modelo de Heisenberg frustrado

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de concentração: Física Teórica e Experimental

Orientador: Prof. Dr. José Abel Hoyos Neto

Versão corrigida

(versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

São Carlos

2020

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Miranda, Michel Marcos Jordão

Mecanismo de campo-aleatório induzido por diluição de acoplamentos em um modelo de Heisenberg frustrado /

Michel Marcos Jordão Miranda; orientador José Abel Hoyos Neto - versão corrigida -- São Carlos, 2020.

67 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em Física Teórica e Experimental) -- Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2020.

1. magnetismo. 2. frustração. 3. ordem-por-desordem. 4. campo-aleatório. 5. transição de fase. I. Hoyos Neto, José Abel, orient. II. Título.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer meu orientador, Prof. José A. Hoyos, pela partilha de seu saber e visão da física que, em minha opinião, é muito interessante e captura aspectos fundamentais essenciais para se tornar um bom cientista. Também agradeço ao Prof. Eric C. Andrade, pela colaboração e discussões frutíferas que tivemos, que apesar de poucas, foram muito importantes para realizar um bom trabalho.

Agradeço também a minha esposa Ingryd, que me acompanha desde a graduação e é uma das melhores coisas que já me aconteceu. Aprecio demais o apoio incomensurável, cuidando e me encorajando a prosseguir no momentos mais difíceis.

Um grande obrigado devo também a minha mãe, pai e irmãos, que sempre foram minha base e me sustentaram (mesmo que indiretamente ou sem intenção), quando eu precisava de amigos e conforto.

Agradeço aos meus velhos amigos da graduação e aos novos feitos na USP pelos momentos de descontração nos bares de São Carlos, assim como o compartilhamento das dores e experiências vividas, que agregaram alegria e dedicação a minha vida.

Também sou grato pelo suporte técnico do IFSC, sem o qual eu não poderia ter obtidos meus resultados e tampouco um ambiente de trabalho agradável, profissional e confortável.

O presente trabalho foi realizado com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior Brasil (CAPES) Código de financiamento 001.

RESUMO

MIRANDA, M. M. J. **Mecanismo de campo-aleatório induzido por diluição de acoplamentos em um modelo de Heisenberg frustrado.** 2020. 67p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2020.

Investigamos os efeitos de diluição dos acoplamentos de primeiros vizinhos no modelo de Heisenberg clássico com interações de primeiros (J_1) e segundos (J_2) em uma rede quadrada. Utilizando extensivas simulações de Monte Carlo, o comportamento da transição de fase do tipo Ising do caso puro e a ordem de longo alcance associada foram estudadas. Primeiro é evidenciado que as diluições de acoplamento vertical e horizontal funcionam como um campo local que favorece um dos dois estados da simetria Z_2 , que por sua vez nasceu do mecanismo de ordem-por-desordem. Na sequência, estudamos o sistema somente sob diluição vertical. Nossas simulações tornam evidente que a transição foi extinta, mas que a ordem de longo alcance é preservada por conta da média não nula do campo local aleatório. Também investigamos o sistema sob a mesma concentração de diluição vertical e horizontal. Neste caso, nossos resultados mostram que não há nenhum tipo de transição de fase e tampouco alguma ordem de longo alcance, por conta do mecanismo de campo-aleatório emergente.

Palavras-chave: Magnetismo. Frustração. Ordem-por-desordem. Campo-aleatório. Transição de fase.

ABSTRACT

MIRANDA, M. M. J. **Bond dilution induced random-field mechanism in a frustrated Heisenberg model.** 2020. 67p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2020.

We investigated the effects of nearest neighbors bond dilution in the classical Heisenberg model with nearest (J_1) and next-nearest (J_2) neighbors on the square lattice. Mostly using Monte Carlo techniques, the fate of the Ising-like transition of the pure system and the associate long range order, were studied. First, we show that the dilution of vertical and horizontal bonds works as a local field which favors one of the two states of the Z_2 symmetry, which had arisen from the order-by-disorder mechanism. Next we study the system with only vertical bond dilution. From our simulations, it is clear that the phase transition is destroyed, however, the long range order was preserved due the non-zero mean of the local random field. We also investigated the system under the same concentration of vertical and horizontal bond dilution. In this case, our results shows the destruction of the phase transition as well as any type of long range order due the random-field mechanism.

Keywords: Magnetism. Frustration. Order-by-disorder. Random-field. Phase transition.

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 – Pares de spin frustrados no modelo de Heisenberg com interações de primeiros e segundos vizinhos na rede quadrada, Eq. (2.1), se $J_2 > 0$ e $J_1 > 0$, ou se $J_1 < 0$. Por simplicidade ilustramos somente as componentes dos spins coplanares ao plano da rede. 18
- Figura 2 – Ilustração de um possível estado fundamental no regime $|J_1| \gg J_2$ para (a) $J_1 < 0$ e (b) $J_1 > 0$ e; (c) no regime $|J_1| \ll J_2$. Aqui representamos os spins no plano definido pelos primeiros vizinhos, porque assim temos simplificações nos cálculos (veja o texto). 18
- Figura 3 – (a) Um possível estado fundamental do regime $J_2/|J_1| > 1/2$. Veja que $\mathbf{h}_{i,0}^a = -4SJ_2\hat{\mathbf{S}}_i$ (esboço fora de escala) e $\mathbf{h}_{i,0}^b = 0$. (b) Adição de flutuações térmicas ou quânticas no estado fundamental da Fig. 3a e os campos moleculares resultantes em um spin i da sub-rede a . Para maximizar o efeito de tais flutuações, devemos alinhar ou antialinhar estes campos, ou seja, $\delta\mathbf{h}_i^b \parallel \delta\mathbf{h}_i^a$ ou $\delta\mathbf{h}_i^b \parallel -\delta\mathbf{h}_i^a$ 19
- Figura 4 – Estados fundamentais selecionados pelas flutuações quânticas ou térmicas no regime $J_2/|J_1| > 1/2$. O estado (a) possui ângulo $\alpha = 0$ entre as sub-redes e o estado (b) possui ângulo $\alpha = \pi$ 20
- Figura 5 – (a) Dependência em α da energia do estado fundamental quântico da Eq. (2.25) para alguns valores de J_2 . Os estados selecionados pela flutuação quântica são aqueles que minimizam a energia, logo $\alpha = 0$ e $\alpha = \pi$. Utilizamos $J_1 = 1$, $a = 1$ e $S = 1$. (b) Ilustrações de uma plaqueta nos estados fundamentais escolhidos pelas flutuações quânticas. Os respectivos vetores ordenamento são $\mathbf{Q} = (0, \pi)$ e $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$ para $\alpha = 0, \pi$ 25
- Figura 6 – Entropia resultante das flutuações gaussianas, Eq. (2.39), como função do ângulo α entre as sub-redes, para alguns valores de J_2 . Veja que os estados selecionados independem de T e que são os mesmos que as flutuações quânticas selecionam, $\alpha = 0, \pi$, pois estes maximizam a entropia. Utilizamos $a = 1$, $J_1 = 1$ e $k_B = 1$ 28
- Figura 7 – Diagrama de fases para o modelo de Heisenberg J_1 - J_2 clássico. No regime $J_2/J_1 \gg 1/2$ temos $T_c \approx 0.55J_2$. Já para $J_2/J_1 \approx 1/2$, $T_c \rightarrow 0$ com derivada infinita relacionada ao favorecimento do estado Néel pelas flutuações térmicas de alta temperatura. 30

- Figura 8 – (a) Um possível estado fundamental do sistema no regime de ordem por desordem com um sítio magnético removido (ou com uma impureza não-magnética), e o campo molecular da sub-rede b em um spin i , primeiro vizinho da impureza, na sub-rede a . (b) Estado resultante da minimização da energia quando há uma impureza não-magnética na rede. 31
- Figura 9 – Ilustração da simetria contínua da ordem anticolinear. Note que as sub-redes sempre estão perpendiculares e que por isso a ordem anticolinear é mantida e possui simetria contínua, já que a rotação de uma das sub-redes (vermelha no caso) pode ser feita por um ângulo qualquer entre 0 e 2π 31
- Figura 10 – Vetor $\widetilde{\mathbf{M}}_{90}^{(i)}$ calculado em 4 plaquetas com a ordem anticolinear. Note a característica cambaleante que este possui, assim como um estado de Néel. 32
- Figura 11 – Desestabilização da fase ordenada do modelo de Ising 2D clássico ($n = 1$) devido ao mecanismo de campo-aleatório. Cada seta representa a resultante da soma dos campos aleatórios em uma vizinhança centrada na seta. Haverá destruição da fase ordenada se $\bar{\mathbf{h}} = 0 = \langle \mathbf{h} \rangle$, caso contrário a fase ordenada prevalece, mas há quebra forçada de simetria. 37
- Figura 12 – Plaquetas com desordem binária nos primeiros vizinhos (a) verticais e (b) horizontais. As configurações destacadas são energeticamente favoráveis se $J'_1 < J_1$ 39
- Figura 13 – Dependência com a temperatura (a) do parâmetro de ordem colinear por partícula e; (b) do calor específico por partícula, Eq.(4.1), para $J_1 = 1$ e $J_2 = 0.55$ e alguns tamanhos de rede. Note como a derivada de $\langle |m_\sigma| \rangle$ se torna mais divergente em $T \approx 0.2J_1$ conforme aumentamos o tamanho da rede, bem como o deslocamento do pico do calor específico aumenta numa taxa lenta. 42
- Figura 14 – Dependência com a temperatura (a) da suscetibilidade do parâmetro de ordem colinear e; (b) do cumulante de Binder, Eq.(4.1), para $J_1 = 1$ e $J_2 = 0.55$ e alguns tamanhos de rede. Perceba que o pico da suscetibilidade aumenta numa taxa alta conforme aumentamos o tamanho da rede e, que há cruzamento do cumulante em $T \approx 0.2J_1$, provando a existência da transição de fase. 42
- Figura 15 – Cumulante de Binder do parâmetro de ordem colinear (equação da direita na Eq. (14)) em função da temperatura para vários tamanhos de rede. Nesta escala, não resta dúvidas de que há o cruzamento, localizado com a linha tracejada no gráfico no ponto $T_c \approx 0.1967$ 43

Figura 16 – O melhor colapso obtido para (a) o cumulante de Binder e para (b) a suscetibilidade colinear. Para ambos truncamos suas expansões (Eqs. (4.3) e (4.4)) na ordem quártica e calculamos as médias de T_c , ν e γ a partir dos ajustes que forneciam $\bar{R}^2 > 0.97$. Obtemos $T_c = 0.1964(2)$ e $\nu = 1.00(6)$ para o colapso de U_{col} e, usando o valor de ν encontrado, obtemos $T_c = 0.1965(2)$ e $\gamma = 1.72(5)$ para o colapso de χ_{col} . As linhas sólidas são as funções de escala $f_{U_{\text{col}}}(x)$ e $f_{\chi_{\text{col}}}(x)$. Incertezas não mostradas.	44
Figura 17 – Distribuição do parâmetro de ordem, $P(m_\sigma)$, no caso limpo, (a) e (b), e no caso com $x_v = 0.005$, (c) e (d), para $T = 0.010J_1$ (esquerda) e $T = 0.184J_1$ (direita) e para vários tamanhos de rede. Utilizamos $J_1 = 1$ e $J_2 = 0.55$	46
Figura 18 – Mapa no espaço real da média de MC do parâmetro de ordem colinear modificado, Eq. (4.6), para uma configuração de desordem do sistema de tamanho $L = 60$ com $J_1 = 1$, $J_2 = 0.55$ e $x_v = 0.02$. As colunas 1, 2 e 3, da esquerda para a direita, indicam as temperaturas nas quais as médias foram calculadas. Os retângulos verticais localizam as diluições de acoplamentos verticais. Note que temos quebra forçada de simetria e morte lenta da ordem de longo alcance.	47
Figura 19 – Dependência com a temperatura (a) do parâmetro de ordem colinear; (b) do calor específico por spin; (c) da suscetibilidade do parâmetro de ordem e; (d) do cumulante de Binder, para vários tamanhos de rede e para $x_v = 0.02$, $J_1 = 1$ e $J_2 = 0.55$. Note que tais quantidades não apresentam as características de transição de fase.	48
Figura 20 – Painéis (a) e (b): distribuição do parâmetro de ordem, $P(m_\sigma)$, para vários tamanhos de rede, para $x_v = x_h = 0.01$ e para as temperaturas $T = 0.010J_1$ (a) e $T = 0.184J_1$ (b). Painéis (c) - (e): mapa no espaço real (para uma configuração de desordem) do parâmetro de ordem na plaqueta, Eq. (2.26), na metade (c) e no final da simulação (d) e a média (e), para $L = 20$, $T = 0.203J_1$ e $x_v = x_h = 0.02$. Utilizamos $J_1 = 1$, $J_2 = 0.55$. Os retângulos verticais (horizontais) localizam as diluições de acoplamentos verticais (horizontais). Note o tamanho dos domínios e o mecanismo de Imry-Ma.	49
Figura 21 – Mapa no espaço real do parâmetro de ordem colinear modificado, Eq. (4.6), para uma configuração de desordem do sistema de tamanho $L = 60$ com $J_1 = 1$, $J_2 = 0.55$ e $x_v = x_h = 0.02$. As colunas 1, 2 e 3, da esquerda para a direita, indicam em qual passo de MC os cálculos foram feitos. Observe a competição entre os domínios induzida pelo mecanismo de campo-aleatório.	50

Figura 22 – Dependência com a temperatura (a) do parâmetro de ordem colinear; (b) do calor específico por spin; (c) da suscetibilidade do parâmetro de ordem e; (d) do cumulante de Binder, para vários tamanhos de rede e para $x_v = x_h = 0.02$, $J_1 = 1$ e $J_2 = 0.55$. Note que tais quantidades não apresentam as características de transição de fase.	51
Figura 23 – Dependência com a temperatura (a) do parâmetro de ordem anticolinear $\widetilde{m}_{90}$ e (b) do módulo do parâmetro de ordem anticolinear vetorial m_{90} , para vários tamanhos de rede. Utilizamos $J_1 = 1$, $J_2 = 0.55$ e $x_v = x_h = 0.02$. Note que não há nenhum sinal de ordenamento de longo alcance bem como nenhuma singularidade.	53
Figura 24 – Mapeamento no espaço real, para a configuração de desordem da Fig. 21, das componentes do parâmetro de ordem anticolinear vetorial $\mathbf{M}_{90}^{(i)}$ (Eq. 2.41) – linhas de 1 até 3 de cima para baixo –, e do parâmetro de ordem anticolinear $\widetilde{M}_{90}^{(i)}$ (Eq. 2.40) – linha 4 –, para $L = 60$, $J_1 = 1$, $J_2 = 0.55$, $T = 0.1J_1$ e $x_v = x_h = 0.02$. As colunas 1, 2 e 3, da esquerda para a direita, indicam em qual passo de MC os cálculos foram feitos.	54
Figura 25 – Sequencia de rotações feitas para alinhar o campo molecular com o eixo z . Denotamos $\mathbf{A}'_i = R_z(\Phi_i)\mathbf{A}_i$ e $\tilde{\mathbf{A}}_i = R_y(\Theta_i)\mathbf{A}'_i$. Quando $\mathbf{B}_i$ se alinha com o eixo z , a coordenada θ_i de $\mathbf{S}_i$ é também o ângulo entre $\mathbf{S}_i$ e $\mathbf{B}_i$	64
Figura 26 – Ilustração do processo de construção dos blocos do método de Jackknife para cálculos de incerteza. Nesse caso temos $N_{\text{mcs}} = 20$ e escolhemos $N_b = 5$ blocos. Portanto, cada bloco contém $\ell_b = 16$ medidas.	66

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	15
2	O MECANISMO DE ORDEM-POR-DESORDEM	17
2.1	Modelo de Heisenberg J_1-J_2	17
2.1.1	Flutuações Quânticas	19
2.1.2	Flutuações Térmicas	26
2.1.2.1	Transição de Fase do Tipo Ising	29
2.1.3	Desordem Estrutural (Sítios não-magnéticos)	30
3	O MECANISMO DE CAMPO-ALEATÓRIO	35
3.1	O Critério de Imry-Ma	35
3.2	Modelo de Heisenberg J_1-J_2 Clássico	37
4	PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO MODELO DE HEISENBERG J_1-J_2 CLÁSSICO	41
4.1	Caso Limpo	41
4.2	Desordem Vertical ($\bar{h} \neq 0$)	45
4.3	Desordem Vertical e Horizontal ($\bar{h} = 0$)	49
4.3.1	Ordenamento Anticolinear	52
5	CONCLUSÃO	55
	REFERÊNCIAS	57
	APÊNDICES	61
	APÊNDICE A – DETALHES SOBRE AS SIMULAÇÕES DE MONTE CARLO	63

1 INTRODUÇÃO

Magnetos frustrados apresentam uma fenomenologia rica e envolvente, graças aos seus aspectos naturais que impedem vínculos de serem satisfeitos. Alguns dos fenômenos que emergem da frustração (ou por conta dela) possuem assinaturas nas propriedades termodinâmicas, quânticas e críticas do modelo estudado. Usualmente, encontramos características marcantes em magnetos frustrados, como entropia residual,¹ resultante da grande degenerescência de estados fundamentais do sistema, fases do tipo vidros de spin² e seleção de estados pelo mecanismo de ordem-por-desordem.^{3,4} Este último nos revela aspectos fundamentais de sistemas frustrados a partir de uma ideia simples. O princípio desse mecanismo se apoia no fato de que flutuações térmicas ou quânticas são de grande importância para as propriedades do modelo, em particular, para o estado fundamental do mesmo. Quando se tem uma degenerescência macroscópica do estado fundamental, as flutuações térmicas ou quânticas, mesmo de mais baixa ordem, podem dar preferência a alguns estados da variedade de estados fundamentais. Por conta disso, energeticamente (flutuações quânticas) ou entropicamente (flutuações térmicas), será mais favorável quebrar a degenerescência do que mantê-la, e o sistema ganha uma “ordem” devido à “desordem”. Desde sua descoberta, o mecanismo de ordem-por-desordem tem sido amplamente estudado teoricamente em modelos clássicos bi-dimensionais como o XY e Heisenberg⁵⁻⁸ e experimentalmente em materiais protótipos de sistemas descritos pelo modelo de Heisenberg quântico 2D⁹⁻¹² mas que apontam a veracidade de fatos teóricos propostos no regime clássico. Dessa maneira, teoria e experimentação têm proporcionado um melhor entendimento das características e peculiaridades fundamentais desses sistemas.

Mesmo que interessante por si só, a física desses modelos nas condições mais simples como, por exemplo, sem desordem (no sentido de impurezas ou acoplamentos aleatórios) e campo magnético, pode não ser suficiente para explicar todas as particularidades de sistemas reais. Sem hesitar, deve-se buscar quando, quanto e como os fenômenos se modificam em circunstâncias diferentes. Motivações para isso são encontradas em várias direções: experimentos que sugerem que estados supercondutores não-convencionais ocorrem próximos de estados parentes magnéticos;^{13,14} trabalhos experimentais^{15,16} e teóricos¹⁷ argumentando que impurezas influenciam nas propriedades magnéticas e supercondutoras de alguns sistemas e; investigações baseadas em Monte Carlo, explorando como a desordem de massa (random-mass) pode despertar mecanismos efetivos como o de campo-aleatório.^{18,19}

Apesar da motivação, existem poucos resultados concretos. Em particular, no modelo de Heisenberg clássico na rede quadrada com interações de primeiros (J_1) e segundos vizinhos (J_2), o trabalho de Weber e Mila,²⁰ que analisa como impurezas não magnéticas afetam a ordem de longo alcance, é um dos poucos para esse modelo. Nesse sistema há

frustração quando $J_1 \neq 0$ e $J_2 > 0$ e para $J_2/|J_1| > 1/2$ o estado fundamental consiste em duas sub-redes formadas pelos segundos vizinhos em estado Néel. A degenerescência do estado fundamental é parametrizada pelo ângulo entre estas sub-redes e flutuações térmicas e quânticas selecionam dois estados da variedade degenerada, através do mecanismo de ordem-por-desordem.⁵ Curiosamente, os estados selecionados possuem configurações de alinhamento colinear entre as sub-redes: são estados com vetor ordenamento $(\pi, 0)$ e $(0, \pi)$ ou ângulo π e 0 entre as sub-redes, respectivamente. Por conta disto há a estabilização de uma simetria $O(3) \times Z_2$ que pode ser caracterizada através de um parâmetro de ordem Ising. Em temperatura finita, as flutuações térmicas tomam partido e impulsionam uma transição de fase na classe de universalidade do modelo de Ising 2D.⁸ Ainda, em temperaturas baixas e na presença de impurezas, a escolha das flutuações muda e passa a ser favorável que as sub-redes sejam anticolineares, ou seja, com um ângulo de $\pi/2$ entre as elas.^{4,8} Alguns efeitos intrigantes surgem nesse cenário, como o de screening na impureza devido as flutuações térmicas mais fortes (que originam a transição) que resultam no reaparecimento da ordem colinear e da transição de fase.

Entusiasmados pela competição entre o mecanismo de ordem-por-desordem oriundo das flutuações térmicas/quânticas e o originário da desordem estrutural (impurezas) no modelo supracitado, podemos nos perguntar: o que acontece ao se introduzir desordem de acoplamentos? A transição sobrevive? A ordem de longo alcance muda? Como as propriedades termodinâmicas são afetadas? Há surgimento de algum mecanismo efetivo? O objetivo principal deste trabalho é analisar todos estes aspectos no caso da diluição de acoplamentos de primeiros vizinhos utilizando simulações de Monte Carlo. Para isso, primeiramente revisamos resultados já sabidos para o modelo no Capítulo 2, como o mecanismo de ordem-por-desordem quântico, térmico e devido a desordem estrutural, bem como a transição de fase do tipo Ising. Prosseguimos no Capítulo 3 e Seção 3.1, derivando os resultados de Imry e Ma,²¹ que explicam o surgimento do mecanismo de campo-aleatório em modelos de spin contínuo e discreto. Após isto, mostramos como esse efeito pode aparecer no modelo de Heisenberg em questão na Seção 3.2. No Capítulo 4, apresentamos os resultados das nossas simulações no caso do sistema limpo, Seção 4.1, com diluição de acoplamentos verticais, Seção 4.2 e, com diluição de acoplamentos verticais e horizontais, Seção 4.3. Finalizamos com uma breve conclusão.

2 O MECANISMO DE ORDEM-POR-DESORDEM

Neste capítulo exploraremos o fenômeno e a física emergente do mecanismo de ordem-por-desordem no modelo de Heisenberg com interação de primeiros (J_1) e segundos (J_2) vizinhos. Na única seção deste capítulo, apresentamos o modelo e exploramos o fenômeno citado que emerge das flutuações quânticas (Subseção 2.1.1) e/ou térmicas (Subseção 2.1.2) selecionando alguns estados entre os infinitos do regime $J_2/J_1 > 1/2$. Concluimos argumentando que deve haver uma transição de fase do tipo Ising em temperatura finita por conta de uma simetria Z_2 oriunda da ordem pela desordem e estimamos sua temperatura crítica.

2.1 Modelo de Heisenberg J_1 - J_2

O modelo de Heisenberg com interações de primeiros (J_1) e segundos (J_2) vizinhos é definido pelo Hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (2.1)$$

com $J_{i,j} = J_1$ se i e j são primeiros vizinhos; $J_{i,j} = J_2$ se i e j são segundos vizinhos e; $J_{i,j} = 0$ caso contrário. Vamos considerar as ambas versões do modelo, clássica e quântica com condições periódicas de contorno. No caso quântico, lidaremos com operadores de spin- S . Já no caso clássico, $\mathbf{S}_i \forall i$ é um vetor tridimensional de norma S . Também iremos omitir a notação vetorial para os vetores da rede de Bravais quando não houver nenhuma ambiguidade.

Vamos estudar a Eq. (2.1) na rede quadrada com vetores primitivos $\mathbf{a}_1 = a\hat{\mathbf{x}}$ e $\mathbf{a}_2 = a\hat{\mathbf{y}}$. Nesse caso, temos frustração se $J_1 \neq 0$ e $J_2 > 0$, porque não podemos cumprir todos os vínculos impostos a um spin. Isso é facilmente observado se analisarmos a Fig. 1. Nela temos uma plaqueta de 4 spins onde os segundos vizinhos são forçados a se antialinharem (por causa de J_2), e por isso os primeiros vizinhos inevitavelmente têm seus vínculos violados: se $J_1 < 0$ o par (3, 4) será frustrado, caso contrário se $J_1 > 0$ o par (1, 3) será frustrado. De maneira análoga, poderíamos mostrar que os segundos vizinhos se frustram quando os primeiros vizinhos cumprem os vínculos. Nesse caso, o alinhamento entre primeiros vizinhos é ferro ou antiferromagnético, fazendo com que os segundos vizinhos fiquem sempre alinhados. Esse tipo de frustração é, obviamente, diferente da frustração geométrica* oriunda da rede, porque ela é induzida por interações adicionais – que são os acoplamentos de segundos vizinhos – a uma interação primária – que seriam os acoplamentos de primeiros vizinhos.

* Um exemplo emblemático desse tipo de frustração é o modelo de Ising antiferromagnético na rede triangular.

Figura 1 – Pares de spin frustrados no modelo de Heisenberg com interações de primeiros e segundos vizinhos na rede quadrada, Eq. (2.1), se $J_2 > 0$ e $J_1 > 0$, ou se $J_1 < 0$. Por simplicidade ilustramos somente as componentes dos spins coplanares ao plano da rede.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Nos limites $|J_1| \gg J_2$ e $J_2 \gg |J_1|$, conseguimos determinar o estado fundamental clássico do sistema (vamos nos limitar sempre ao estado fundamental clássico) e sua energia. Para isso, reescrevemos a versão clássica da Eq. (2.1) em função dos ângulos entres os spins, $\alpha_{i,j}$, ficando com

$$H = J_1 S^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\alpha_{i,j}) + J_2 S^2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \cos(\alpha_{i,j}), \quad (2.2)$$

na qual $\langle i,j \rangle$ indica soma entre primeiros vizinhos e $\langle\langle i,j \rangle\rangle$ indica soma entre segundos vizinhos. Tomando agora o limite $|J_1| \gg J_2$, o estado fundamental será ferromagnético – se $J_1 < 0$ – ou Néel – se $J_1 > 0$ –, veja as Figs. 2a e 2b. Em ambos os casos os segundos vizinhos sempre são paralelos e a contribuição energética destes é $2J_2 S^2 N$, onde N é o número total de spins no sistema. Já a contribuição dos primeiros vizinhos é $-2J_1 S^2 N$ se $J_1 > 0$ e $2J_1 S^2 N$ se $J_1 < 0$, ou seja, $-2|J_1| S^2 N$. Logo, a energia total do sistema no estado fundamental é $E_0 = -2|J_1| S^2 N + 2J_2 S^2 N$.

Figura 2 – Ilustração de um possível estado fundamental no regime $|J_1| \gg J_2$ para (a) $J_1 < 0$ e (b) $J_1 > 0$ e; (c) no regime $|J_1| \ll J_2$. Aqui representamos os spins no plano definido pelos primeiros vizinhos, porque assim temos simplificações nos cálculos (veja o texto).

Fonte: Elaborada pelo autor.

No regime $J_2 \gg |J_1|$, o sistema se desacopla em duas sub-redes quadradas $\sqrt{2}a \times \sqrt{2}a$, ambas com estado fundamental Néel, mas com um ângulo α arbitrário entre elas. Impressionantemente, a energia não depende de α , e ele parametriza a degenerescência do

estado fundamental. Analisando a Fig. 2c, temos que $\alpha_{i,j} = \alpha$ se $j - i = a_1$, e $\alpha_{i,j} = \alpha + \pi$ se $j - i = a_2$. Dessa maneira, a energia fica

$$E'_0 = \pm |J_1| S^2 N [\cos(\alpha) + \cos(\alpha + \pi)] - 2J_2 S^2 N = -2J_2 S^2 N. \quad (2.3)$$

Como dois limites diferentes dos parâmetros do Hamiltoniano fornecem estados fundamentais diferentes, com energias diferentes, deve haver uma transição entre esses estados. De fato, isso acontece quando $E'_0 = E_0$ ou $J_2/|J_1| = 1/2$. Como explicitado a seguir, Estaremos interessados no regime onde $E'_0 < E_0$ ou $J_2/|J_1| > 1/2$, onde flutuações térmicas e/ou quânticas selecionam alguns estados da variedade degenerada parametrizada por α .

Seguimos nas subseções posteriores com cálculos perturbativos a nível clássico e quântico, mostrando a escolha das respectivas flutuações para o estado fundamental do sistema.

2.1.1 Flutuações Quânticas

Podemos encontrar o resultado do efeito das flutuações, tanto quânticas como térmicas, de uma maneira heurística e argumentativa,⁴ analisando o efeito que o campo local de um spin tem sobre ele na presença de flutuações. Para isso, considere a Fig. 3a. Nela está ilustrado um possível estado fundamental no regime $J_2/|J_1| > 1/2$, com as duas sub-redes $\sqrt{2}a \times \sqrt{2}a$ denotadas por a (azul) e b (vermelha). Dado um spin $\mathbf{S}_i$, podemos escrever

Figura 3 – (a) Um possível estado fundamental do regime $J_2/|J_1| > 1/2$. Veja que $\mathbf{h}_{i,0}^a = -4SJ_2\hat{\mathbf{S}}_i$ (esboço fora de escala) e $\mathbf{h}_{i,0}^b = 0$. (b) Adição de flutuações térmicas ou quânticas no estado fundamental da Fig. 3a e os campos moleculares resultantes em um spin i da sub-rede a . Para maximizar o efeito de tais flutuações, devemos alinhar ou antialinhar estes campos, ou seja, $\delta\mathbf{h}_i^b \parallel \delta\mathbf{h}_i^a$ ou $\delta\mathbf{h}_i^b \parallel -\delta\mathbf{h}_i^a$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

sua energia como $H_i = \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{h}_i$, onde seu campo molecular é $\mathbf{h}_i = 1/2 \sum_j J_{i,j} \mathbf{S}_j = \mathbf{h}_i^a + \mathbf{h}_i^b$, na qual $\mathbf{h}_i^n$ é o campo molecular no spin i devido aos spins da sub-rede n . Sem perda de generalidade, vamos supor $i \in a$. Perceba que no estado fundamental há degenerescência porque $\mathbf{h}_{i,0}^b = 0$, pois rotacionando todos os spins da sub-rede b altera-se o ângulo α mas

não o fato de que $\mathbf{h}_{i,0}^b = 0$. Adicionando ao estado fundamental as flutuações de mais baixa ordem, teremos o aparecimento de campos moleculares $\delta\mathbf{h}_i^n$ fracos, ou seja, com $\delta h_i^n \ll h_{i,0}^a$ [†], perpendiculares à direção do estado fundamental do spin $\mathbf{S}_i$, já que as próprias flutuações são perpendiculares à esta direção. As flutuações estão ilustradas através de pequenos círculos posicionados logo após a ponta de cada spin na Fig. 3b e os campos moleculares correspondentes estão esboçados junto com $\mathbf{S}_i$. Como as flutuações almejam desorganizar o sistema, devemos ter $\delta\mathbf{h}_i^b \parallel \delta\mathbf{h}_i^a$ ou $\delta\mathbf{h}_i^b \parallel -\delta\mathbf{h}_i^a$, já que essas são as maneiras mais efetivas de causar mudanças em $\mathbf{S}_i$. Porém, como $\mathbf{S}_i \perp \delta\mathbf{h}_i^a$ e $\mathbf{S}_j \perp \delta\mathbf{h}_i^b$ se $j \in b$ – isto é o que caracteriza as flutuações – teremos $\mathbf{S}_i \parallel \mathbf{S}_j$ ou $\mathbf{S}_i \parallel -\mathbf{S}_j$, ou seja, as sub-redes serão colineares. Com efeito, $\alpha = 0, \pi$. Os estados selecionados estão esboçados na Fig. 4 e possuem a característica de listras com vetores ordenamento $\mathbf{Q} = \mathbf{b}_2/2$ para $\alpha = 0$ e $\mathbf{Q} = \mathbf{b}_1/2$ para $\alpha = \pi$, onde $\mathbf{b}_1 = 2\pi\hat{\mathbf{x}}/a$ e $\mathbf{b}_2 = 2\pi\hat{\mathbf{y}}/a$ são os vetores primitivos da rede recíproca da rede quadrada. Frequentemente adotaremos $a = 1$ e escreveremos $\mathbf{Q} = (0, \pi)$ para $\alpha = 0$ e $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$ para $\alpha = \pi$.

Figura 4 – Estados fundamentais selecionados pelas flutuações quânticas ou térmicas no regime $J_2/|J_1| > 1/2$. O estado (a) possui ângulo $\alpha = 0$ entre as sub-redes e o estado (b) possui ângulo $\alpha = \pi$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Com efeito o sistema ganha “ordem” (levantamento a degenerescência) a partir da “desordem” (flutuações térmicas ou quânticas). Veja que aqui a palavra “desordem” carrega consigo um significado de flutuações, de algo dinâmico. Entretanto, ela pode também ser usada para designar algo estático como a desordem em acoplamentos do Hamiltoniano, ou em sítios da rede, ou a adição de impurezas magnéticas, etc. Deixaremos claro quando ela significar um conceito ou outro.

De uma maneira formal e quantitativa, podemos usar a teoria de ondas de spins²² para estudar os efeitos das flutuações quânticas. Nela, aproximamos os operadores de spins

[†] Denotaremos a norma de um vetor $\mathbf{v}$ sem o negrito, $|\mathbf{v}| = v$

para operadores bosônicos através das transformações de Holstein-Primakoff²³

$$\begin{aligned} S_i^z &= S - a_i^\dagger a_i, \\ S_i^+ &= \sqrt{2S - a_i^\dagger a_i} a_i, \\ S_i^- &= a_i^\dagger \sqrt{2S - a_i^\dagger a_i}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

na qual $S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y$; a_i ($a_i^\dagger$) aniquila (cria) um bóson no sítio i e

$$\begin{aligned} [a_i, a_j^\dagger] &= \delta_{i,j}, \\ [a_i, a_j] &= 0 = [a_i^\dagger, a_j^\dagger]. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Cada bóson representa uma excitação que diminui a magnitude na direção z do i -ésimo spin (por isso o operador $a_i^\dagger$ acompanha S_i^-). Por outro lado, cada bóson aniquilado representa a supressão da excitação, logo a magnitude na direção z do spin aumenta (por isso o operador a_i acompanha S_i^+). Abordar problemas com a Eq. (2.4) diretamente é difícil e iremos aproxima-lá. Assumindo que há poucas excitações no sistema, ou seja, que estamos em baixas energias, podemos supor que $\langle a_i^\dagger a_i \rangle \ll S$, onde $\langle A \rangle$ representa a média no estado fundamental do sistema do operador A . Dessa forma, utilizando a expansão $(1 - x)^{1/2} \approx 1 - x/2$, podemos reescrever a Eq. (2.4) até a ordem linear de expansão $x = a_i^\dagger a_i/S$, ficando com

$$\begin{aligned} S_i^z &= S - a_i^\dagger a_i, \\ S_i^+ &\approx \sqrt{2S} a_i, \\ S_i^- &\approx \sqrt{2S} a_i^\dagger. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Para prosseguir com o cálculo, devemos escolher um estado de referência onde iremos incorporar a flutuação bosônica aproximada. Como queremos saber o quão robusta é a degenerescência do estado fundamental no regime $J_2/|J_1| > 1/2$, vamos escolher, por exemplo, a configuração esboçada na Fig. 2c. Para continuar, precisamos escolher o eixo de referência onde a direção z de algum spin aponta e posteriormente rotacionaremos os outros spins de maneira a se alinharem com este eixo. Dessa forma, podemos prosseguir com o cálculo de maneira análoga a feita em um estado ferromagnético.

Como dois vetores linearmente independentes definem um único plano, podemos definir nosso eixo coordenado de tal maneira que seu plano yz coincida com o plano definido por quaisquer primeiros vizinhos. Consequentemente, se o spin $\tilde{\mathbf{S}}_i$ forma um ângulo θ_i com a direção z (vamos indicar os spins não alinhados com $\hat{\mathbf{z}}$ com um til), devemos rotacioná-lo de um ângulo θ_i no sentido anti-horário em torno da direção x para obtermos um vetor paralelo à $\hat{\mathbf{z}}$. Assim, o novo spin paralelo à $\hat{\mathbf{z}}$ é

$$\begin{pmatrix} S_i^x \\ S_i^y \\ S_i^z \end{pmatrix} = R_x(-\theta_i) \tilde{\mathbf{S}}_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta_i & -\sin \theta_i \\ 0 & \sin \theta_i & \cos \theta_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{S}_i^x \\ \tilde{S}_i^y \\ \tilde{S}_i^z \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Entretanto, na Eq. (2.1) devemos escrever os spins não rotacionados, então $\tilde{\mathbf{S}}_i = R_x(\theta_i)\mathbf{S}_i$, e ficamos com

$$\mathbf{S}_i^T R_x(-\theta_i) R_x(\theta_j) \mathbf{S}_j = S_i^x S_j^x + \cos(\theta_i - \theta_j) (S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) + \sin(\theta_i - \theta_j) (S_i^z S_j^y - S_i^y S_j^z), \quad (2.8)$$

escrevendo os operadores de spin em termos dos operadores bosônicos, temos

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{S}}_i \cdot \tilde{\mathbf{S}}_j = & S^2 \cos(\theta_i - \theta_j) - S \cos(\theta_i - \theta_j) (a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j) + S \sin^2\left(\frac{\theta_i - \theta_j}{2}\right) (a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger) + \\ & + S \cos^2\left(\frac{\theta_i - \theta_j}{2}\right) (a_i a_j^\dagger + a_i^\dagger a_j) - iS \sqrt{\frac{S}{2}} \sin(\theta_i - \theta_j) (a_j - a_j^\dagger + a_i^\dagger - a_i) \end{aligned} \quad (2.9)$$

substituindo a Eq. (2.9) na Eq. (2.1) ficamos com

$$H = A + B + C + D + E, \quad (2.10)$$

na qual

$$\begin{aligned} A &= \frac{S^2}{2} \sum_{i,j} J_{i,j} \cos(\theta_i - \theta_j), \\ B &= -\frac{S}{2} \sum_{i,j} J_{i,j} \cos(\theta_i - \theta_j) (a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j), \\ C &= \frac{S}{2} \sum_{i,j} J_{i,j} \sin^2\left(\frac{\theta_i - \theta_j}{2}\right) (a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger), \\ D &= \frac{S}{2} \sum_{i,j} J_{i,j} \cos^2\left(\frac{\theta_i - \theta_j}{2}\right) (a_i a_j^\dagger + a_i^\dagger a_j), \\ E &= -i \left(\frac{S}{2}\right)^{3/2} \sum_{i,j} J_{i,j} \sin(\theta_i - \theta_j) (a_j - a_j^\dagger + a_i^\dagger - a_i). \end{aligned}$$

Agora vamos separar a configuração da Fig. 2c em 4 sub-redes $2a \times 2a$ ferromagnéticas que denotaremos pelos conjuntos $\{\blacktriangledown\}$, $\{\blacktriangleright\}$, $\{\blacktriangleleft\}$ e $\{\blacktriangleleft\}$. Dessa maneira, se fixarmos o eixo z paralelo aos spins da subrede $\{\blacktriangledown\}$, o ângulo que devemos rotacionar cada spin é

$$\theta_i = \begin{cases} 0, & \text{se } i \in \{\blacktriangledown\}, \\ \alpha, & \text{se } i \in \{\blacktriangleright\}, \\ \pi, & \text{se } i \in \{\blacktriangleleft\}, \\ \alpha + \pi, & \text{se } i \in \{\blacktriangleleft\}. \end{cases} \quad (2.11)$$

Abrindo a soma na Eq. (2.10) nestes conjuntos e notando que: os vizinhos de $\{\blacktriangledown\}$ são $\{\blacktriangleright\}$ na direção $\mathbf{a}_1$, $\{\blacktriangleleft\}$ na direção $\mathbf{a}_2$ e $\{\blacktriangledown\}$ na direção $\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$; os vizinhos de $\{\blacktriangleright\}$ são $\{\blacktriangledown\}$ na direção $\mathbf{a}_1$, $\{\blacktriangleleft\}$ na direção $\mathbf{a}_2$ e $\{\blacktriangleright\}$ na direção $\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$; os vizinhos de $\{\blacktriangleleft\}$ são

$\left\{ \nearrow \right\}$ na direção $\mathbf{a}_1$, $\left\{ \nearrow \right\}$ na direção $\mathbf{a}_2$ e $\left\{ \nearrow \right\}$ na direção $\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$ e; os vizinhos de $\left\{ \nearrow \right\}$ são $\left\{ \searrow \right\}$ na direção $\mathbf{a}_1$, $\left\{ \searrow \right\}$ na direção $\mathbf{a}_2$ e $\left\{ \nearrow \right\}$ na direção $\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$, ficamos com

$$\begin{aligned} A &= -2NJ_2S^2 = E_0, \\ E &= 0, \\ B &= \frac{S}{2}J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j), \\ C &= \frac{S}{2} \sum_i \left[J_1 \left(\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) \sum_{j=i\pm\mathbf{a}_1} (a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger) + \cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) \sum_{j=i\pm\mathbf{a}_2} (a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger) \right) + \right. \\ &\quad \left. + J_2 \sum_{j=i\pm\mathbf{a}_1\pm\mathbf{a}_2} (a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger) \right], \\ D &= \frac{S}{2}J_1 \sum_i \left(\cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) \sum_{j=i\pm\mathbf{a}_1} (a_i a_j^\dagger + a_i^\dagger a_j) + \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) \sum_{j=i\pm\mathbf{a}_2} (a_i a_j^\dagger + a_i^\dagger a_j) \right). \end{aligned}$$

Como estamos supondo condições periódicas de contorno, é conveniente utilizar transformada de Fourier para diagonalizar o Hamiltoniano. Com efeito, definimos

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k a_k e^{ik \cdot i}, \quad (2.12)$$

que teremos ortogonalidade das funções da base,

$$\sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot (i + \mathbf{k}')} = N \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'}, \quad (2.13)$$

além de preservarmos a natureza das partículas,

$$\begin{aligned} [a_k, a_{k'}^\dagger] &= \delta_{k, k'}, \\ [a_k, a_{k'}] &= 0 = [a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger]. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Substituindo a Eq. (2.12) na Eq. (2.10), utilizando a Eq. (2.13) e a simetria da 1ª zona de Brillouin[‡] temos

$$H = E_0 + \sum_k \left[B(k, \alpha) a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} A(k, \alpha) (a_k a_{-k} + a_k^\dagger a_{-k}^\dagger) \right], \quad (2.15)$$

na qual

$$A(k, \alpha) = 2J_1S \left(\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cos(k_x a) + \cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cos(k_y a) \right) + 4J_2S \cos(k_x a) \cos(k_y a), \quad (2.16)$$

$$B(k, \alpha) = 2J_1S \left(\cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cos(k_x a) + \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cos(k_y a) \right) + 4J_2S. \quad (2.17)$$

[‡] Para cada vetor $k \in 1^\text{a}$ Z.B. existe também $-k \in 1^\text{a}$ Z.B.

Ainda, podemos escrever a Eq. (2.15) de uma maneira mais simétrica, deixando explícito a matriz que teremos que diagonalizar. Utilizando a simetria da 1ª Z.B., $B(-k, \alpha) = B(k, \alpha)$ e a Eq. (2.14), temos

$$\sum_k B(k, \alpha) a_k^\dagger a_k = -\frac{1}{2} \sum_k B(k, \alpha) + \frac{1}{2} \sum_k B(k, \alpha) (a_k a_k^\dagger + a_{-k}^\dagger a_{-k}),$$

na qual o primeiro termo do lado direito fica

$$-\frac{1}{2} \sum_k B(k, \alpha) = -2N J_2 S.$$

Dessa forma, podemos escrever

$$H = -2N J_2 S(S+1) + \frac{1}{2} \sum_k \mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{M}_k \mathbf{a}_k, \quad (2.18)$$

onde

$$\mathbf{a}_k = \begin{pmatrix} a_k^\dagger \\ a_{-k} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}_k = \begin{pmatrix} B(k, \alpha) & A(k, \alpha) \\ A(k, \alpha) & B(k, \alpha) \end{pmatrix}. \quad (2.19)$$

Diagonalizando a matriz $\mathbf{M}_k$, diagonalizamos H . Para fazer isto, iremos lançar mão da transformação de Bogoliubov²³ definida por

$$\mathbf{a}_k = \mathbf{V}_k \mathbf{b}_k = \begin{pmatrix} u_k & v_k \\ u_{-k}^* & v_{-k}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_k^\dagger \\ b_{-k} \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Os coeficientes u_k e v_k devem ser tais que os operadores b_k sejam bósons, logo

$$[b_k, b_k^\dagger] = (|u_k|^2 - |v_k|^2) [a_k, a_k^\dagger] = 1 \implies u_k = e^{i\phi_k} \cosh r_k, \quad v_k = e^{i\varphi_k} \sinh r_k,$$

escolhendo convenientemente as fases como sendo $\phi_k = 0$ e $\varphi_k = \pi$, e assumindo que $r_{-k} = r_k$ ficamos com

$$\mathbf{V}_k = \begin{pmatrix} \cosh r_k & -\sinh r_k \\ -\sinh r_k & \cosh r_k \end{pmatrix}.$$

Determinamos r_k de maneira a diagonalizar $\mathbf{M}_k$, portanto

$$\mathbf{V}_k^\dagger \mathbf{M}_k \mathbf{V}_k = \mathbf{M}_k^D = \begin{pmatrix} \epsilon & 0 \\ 0 & \epsilon \end{pmatrix},$$

o que implica em solucionar

$$\cosh(2r_k)B - \sinh(2r_k)A = \epsilon, \quad \cosh(2r_k)A - \sinh(2r_k)B = 0. \quad (2.21)$$

Finalmente, encontrando r_k e ϵ nas Eqs. (2.21) podemos escrever o Hamiltoniano da Eq. (2.18) em termos dos bósons de Bogoliubov,

$$H = E_{0,Q} + \sum_k \epsilon(k, \alpha) \left(b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2} \right), \quad (2.22)$$

na qual

$$E_{0,Q} = -2NJ_2S(S+1), \quad (2.23)$$

$$\epsilon(k, \alpha) = \sqrt{B^2(k, \alpha) - A^2(k, \alpha)}, \quad (2.24)$$

com $A(k, \alpha)$ e $B(k, \alpha)$ dados pelas Eqs. (2.16) e (2.17), respectivamente. Note que escrevemos $E_{0,Q}$ para o termo constante na Eq. (2.22). Isto porque o termo proporcional a S^2 é a energia do estado fundamental clássico e o termo proporcional a $S+1$ é a correção quântica de ordem linear à energia clássica.

Nos resta ainda analisar a energia do estado fundamental em função do ângulo entre as sub-redes. Como $\epsilon > 0$, o estado fundamental do sistema é o vácuo dos bósons b , que nada mais são do que mágnons. Com isso, a média do Hamiltoniano no estado fundamental é, no limite de $N \rightarrow \infty$,

$$\langle GS | \frac{H}{N} | GS \rangle = \frac{E_{GS}(\alpha)}{N} = -2J_2S(S+1) + \frac{1}{2} \left(\frac{a}{2\pi} \right)^2 \int_{1^{aZ.B}} \epsilon(k, \alpha) d^2k. \quad (2.25)$$

Na Fig. 5a temos o gráfico da energia do estado fundamental, Eq. (2.25), em função do ângulo entre as sub-redes α .

Figura 5 – (a) Dependência em α da energia do estado fundamental quântico da Eq. (2.25) para alguns valores de J_2 . Os estados selecionados pela flutuação quântica são aqueles que minimizam a energia, logo $\alpha = 0$ e $\alpha = \pi$. Utilizamos $J_1 = 1$, $a = 1$ e $S = 1$. (b) Ilustrações de uma plaqueta nos estados fundamentais escolhidos pelas flutuações quânticas. Os respectivos vetores ordenamento são $\mathbf{Q} = (0, \pi)$ e $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$ para $\alpha = 0, \pi$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Como esperado, as configurações selecionados possuem as sub-redes colineares. Por conta disso, a degenerescência contínua da simetria $O(3)$ de uma das sub-redes é quebrada em uma degenerescência discreta com simetria Z_2 . Dessa forma, a simetria do sistema passa de $O(3) \times O(3)$ para $O(3) \times Z_2$. Para capturar esse ordenamento, podemos definir

um parâmetro de ordem do tipo Ising que deve levar em conta o produto escalar entre as sub-redes. Como as duas sub-redes estão separadamente em estado Néel, este produto escalar pode ser relacionado com a magnetização cambaleante de cada sub-rede. Dessa forma, em uma plaqueta i que definimos como sendo o conjunto de 4 spins nas posições $(i, i + a_1, i + a_2, i + a_1 + a_2)$ (veja Fig. 5b), definimos⁸

$$M_\sigma^{(i)} = \frac{(\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_{i+a_1+a_2}) \cdot (\mathbf{S}_{i+a_1} - \mathbf{S}_{i+a_2})}{|(\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_{i+a_1+a_2}) \cdot (\mathbf{S}_{i+a_1} - \mathbf{S}_{i+a_2})|}, \quad (2.26)$$

e, para capturar uma possível ordem de longo alcance, fazemos

$$m_\sigma = \frac{1}{N} \sum_i M_\sigma^{(i)}. \quad (2.27)$$

Como escrito na Fig. 5b o parâmetro de ordem da Eq. (2.26), que chamaremos de colinear, assume os valores ± 1 para $\alpha = 0, \pi$, respectivamente. Assim, a Eq. (2.27) é totalmente análoga a magnetização por partícula do modelo de Ising. Por consequência e conveniência, chamaremos o regime $J_2/|J_1| > 1/2$ de “ordem por desordem”.

2.1.2 Flutuações Térmicas

Como no caso das flutuações quânticas, as flutuações de origem térmica podem selecionar estados da variedade degenerada. O mesmo argumento simples dado no início da Subseção 2.1.1 é válido aqui. Por consequência, devemos esperar que os estados colineares sejam selecionados no regime de ordem por desordem. Para verificar isto de maneira mais quantitativa, podemos incluir flutuações gaussianas^{4,22} no estado fundamental ilustrado na Fig. 2c. Escolhendo exatamente os mesmos eixos coordenados escolhidos no caso quântico, seguiremos com a mesma abordagem de rotacionar os spins do ângulo correto para se alinharem com a direção z e, a partir daí, expandir os spins em torno da posição de equilíbrio. Note que no eixo rotacionado a posição de equilíbrio de qualquer spin é $\mathbf{S}_{i,0} = S\hat{\mathbf{z}}$. Por outro lado, quando as flutuações térmicas estão presentes temos $\mathbf{S}_i = \varepsilon_i^x \hat{\mathbf{x}} + \varepsilon_i^y \hat{\mathbf{y}} + \sqrt{S^2 - (\varepsilon_i^x)^2 - (\varepsilon_i^y)^2} \hat{\mathbf{z}}$. Supondo temperaturas baixas, $k_B T \ll J_1$, podemos assumir que $\varepsilon_i^\nu \ll S$. Nesta aproximação, expandimos a raiz até 2ª ordem e desprezamos termos de ordem superior na Eq. (2.8), ficando com

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{S}}_i \cdot \tilde{\mathbf{S}}_j = \varepsilon_i^x \varepsilon_j^x + \cos(\theta_i - \theta_j) & \left(\varepsilon_i^y \varepsilon_j^y + S^2 - \frac{(\varepsilon_j^x)^2}{2} - \frac{(\varepsilon_j^y)^2}{2} - \frac{(\varepsilon_i^x)^2}{2} - \frac{(\varepsilon_i^y)^2}{2} \right) + \\ & + S \sin(\theta_i - \theta_j) (\varepsilon_j^y - \varepsilon_i^y). \end{aligned} \quad (2.28)$$

Usando essa expressão na Eq. (2.1), abrindo a soma e usando a Eq. (2.11) chegamos em

$$H = A + B + C + D + E,$$

na qual

$$\begin{aligned}
A &= \frac{J_1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \varepsilon_i^x \varepsilon_j^x + \frac{J_2}{2} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \varepsilon_i^x \varepsilon_j^x, \\
B &= \frac{J_1}{2} \cos(\alpha) \sum_i \left(\sum_{j=i\pm a_1} \varepsilon_i^y \varepsilon_j^y - \sum_{j=i\pm a_2} \varepsilon_i^y \varepsilon_j^y \right) - \frac{J_2}{2} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \varepsilon_i^y \varepsilon_j^y, \\
C &= -2N J_2 S^2 = E_0, \\
D &= -2J_2 \sum_i (\varepsilon_i^x)^2, \\
E &= -2J_2 \sum_i (\varepsilon_i^y)^2,
\end{aligned}$$

Novamente por conta da condição periódica de contorno, podemos definir a transformada de Fourier

$$\varepsilon_i^\nu = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \varepsilon_k^\nu e^{ik \cdot i}, \quad (2.29)$$

que a relação de ortogonalidade da Eq. (2.13) é válida. Ainda, como os spins são vetores reais, devemos ter $(\varepsilon_i^\nu)^* = \varepsilon_i^\nu$, o que implica em $(\varepsilon_k^\nu)^* = \varepsilon_{-k}^\nu$. Logo, utilizando essa transformada, a relação de ortogonalidade e o fato dos spins serem reais, chegamos em

$$H = E_0 + \frac{1}{2} \sum_k \left[\epsilon_x(k) |\varepsilon_k^x|^2 + \epsilon_y(k, \alpha) |\varepsilon_k^y|^2 \right], \quad (2.30)$$

na qual

$$\epsilon_x(k) = 2J_1 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] + 4J_2 [1 + \cos(k_x a) \cos(k_y a)], \quad (2.31)$$

$$\epsilon_y(k, \alpha) = 2J_1 \cos \alpha [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)] + 4J_2 [1 - \cos(k_x a) \cos(k_y a)]. \quad (2.32)$$

Com isso, a função de partição fica

$$\begin{aligned}
Z &= \int \prod_{k,\nu} d(\text{Re } \varepsilon_k^\nu) d(\text{Im } \varepsilon_k^\nu) e^{-\beta H} = e^{-\beta E_0} \int d((\boldsymbol{\varepsilon}^x)^\dagger, \boldsymbol{\varepsilon}^x) e^{-\frac{\beta}{2} \sum_k \epsilon_x(k) |\varepsilon_k^x|^2} \times \\
&\quad \times \int d((\boldsymbol{\varepsilon}^y)^\dagger, \boldsymbol{\varepsilon}^y) e^{-\frac{\beta}{2} \sum_k \epsilon_y(k, \alpha) |\varepsilon_k^y|^2}, \quad (2.33)
\end{aligned}$$

onde $\boldsymbol{\varepsilon}^\nu$ é uma matriz coluna com todos os ε_k^ν e $d((\boldsymbol{\varepsilon}^\nu)^\dagger, \boldsymbol{\varepsilon}^\nu) = \prod_k d(\text{Re } \varepsilon_k^\nu) d(\text{Im } \varepsilon_k^\nu)$. Reescrevendo a soma da Eq. (2.30) como

$$\sum_k \frac{\beta}{2} \epsilon_\nu |\varepsilon_k^\nu|^2 = (\boldsymbol{\varepsilon}^\nu)^\dagger \mathbf{H}_\nu \boldsymbol{\varepsilon}^\nu, \quad \mathbf{H}_\nu = \frac{\beta}{2} \begin{pmatrix} \epsilon_\nu(k_1) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \epsilon_\nu(k_2) & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \epsilon_\nu(k_2) \end{pmatrix},$$

a função de partição fica

$$Z = e^{-\beta E_0} \prod_\nu \int d((\boldsymbol{\varepsilon}^\nu)^\dagger, \boldsymbol{\varepsilon}^\nu) e^{-(\boldsymbol{\varepsilon}^\nu)^\dagger \mathbf{H}_\nu \boldsymbol{\varepsilon}^\nu}. \quad (2.34)$$

Agora, utilizando o resultado²³

$$\int d(\mathbf{z}^\dagger, \mathbf{z}) e^{-\mathbf{z}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{z} + \mathbf{z}^\dagger \mathbf{J} + \mathbf{J}^\dagger \mathbf{z}} = \pi^N [\det(\mathbf{H})]^{-1} e^{\mathbf{J}^\dagger \mathbf{H}^{-1} \mathbf{J}}, \quad (2.35)$$

onde $\mathbf{H}$ é uma matriz hermitiana positiva definida e $\mathbf{J} \in \mathbb{C}^N$, temos

$$Z = \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{2N} e^{\beta E_0} \left[\prod_k \epsilon_x(k) \right]^{-1} \left[\prod_k \epsilon_y(k, \alpha) \right]^{-1}. \quad (2.36)$$

Dessa forma, a energia livre por partícula é

$$f = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z = -2J_2 S^2 - \frac{1}{\beta} \left\{ \ln\left(\frac{2\pi}{\beta}\right) + \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \int [\ln(\epsilon_x(k)) + \ln(\epsilon_y(k, \alpha))] d^2 k \right\}. \quad (2.37)$$

Ou, ainda, como $u = -1/N \partial \ln Z / \partial \beta = 2/\beta - 2J_2 S^2$, a energia livre resulta em

$$f = u(T) - T s(T, \alpha), \quad (2.38)$$

onde

$$s(T, \alpha) = k_B \left\{ 2 + 2 \ln(2\pi k_B T) - \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \int [\ln(\epsilon_x(k)) + \ln(\epsilon_y(k, \alpha))] d^2 k \right\}. \quad (2.39)$$

Na Fig. 6 temos o gráfico da função entropia da Eq. (2.39) como função do ângulo α entre as sub-redes. Os estados selecionados pelas flutuações térmicas são aqueles que

Figura 6 – Entropia resultante das flutuações gaussianas, Eq. (2.39), como função do ângulo α entre as sub-redes, para alguns valores de J_2 . Veja que os estados selecionados independem de T e que são os mesmos que as flutuações quânticas selecionam, $\alpha = 0, \pi$, pois estes maximizam a entropia. Utilizamos $a = 1$, $J_1 = 1$ e $k_B = 1$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

maximizam a entropia ou minimizam a energia livre. Analisando o gráfico da Fig. 6 notamos que tais estados são $\alpha = 0, \pi$ assim como no caso das flutuações quânticas (veja

Fig. 5a). Note ainda que essa seleção independe da temperatura do sistema, mas que a suposição de temperatura baixa foi essencial para derivar o resultado. Isto porque todo o efeito de temperatura pequena já está incorporado na expansão do começo dos cálculos.

Apesar das flutuações térmicas e quânticas selecionarem os mesmos estados entre os inúmeros disponíveis no regime de ordem por desordem, não é isso o que necessariamente deve acontecer. De fato, como argumentaremos na Subseção 2.1.3, a desordem de impurezas não-magnéticas seleciona estados totalmente diferentes dos colineares. Algo interessante, já que isso pode promover competições entre estas ordens e ter reflexos nas propriedades críticas do modelo.

2.1.2.1 Transição de Fase do Tipo Ising

Vimos que tanto as flutuações térmicas quanto as quânticas selecionam os mesmos estados da variedade degenerada de estados fundamentais do sistema. Mais do que isso: estes estados possuem configurações onde as sub-redes são colineares e que podem ser distinguidas por um parâmetro de ordem do tipo Ising dado pela Eq. (2.27). Ainda, esperamos que haja quebra espontânea da simetria Z_2 para temperatura baixa, isto é, $k_B T \ll J_1$; já que as flutuações térmicas devem escolher $M_\sigma^{(i)} = 1$ ou $M_\sigma^{(i)} = -1$ em todas (ou quase todas) as plaquetas do sistema. Isso resulta em $\langle m_\sigma \rangle = 1$ ou -1 . Por outro lado, quando $k_B T \gg J_1$ espera-se que as flutuações térmicas se tornem tão fortes que a ordem de longo alcance seja destruída e que, por isso, $\langle m_\sigma \rangle = 0$ nesse limite. Consequentemente, a energia livre deve possuir uma singularidade[§] no ponto que marca a passagem do regime $\langle m_\sigma \rangle = \pm 1$ para o regime $\langle m_\sigma \rangle = 0$. Concluimos, então, que deve existir uma transição de fase entre as fases colineares, simetria Z_2 , para a fase paramagnética relativa ao alinhamento das sub-redes. Essa transição foi proposta por Chandra, Coleman e Larkin⁵ (CCL) através de argumentos análogos aos dados aqui e confirmada por Weber *et al.*⁸ através de extensivas simulações de Monte Carlo. Perceba que esta transição quebra a simetria discreta oriunda do mecanismo de ordem-por-desordem de uma das sub-redes, mas que não afeta a simetria contínua da outra sub-rede. Evidentemente isso preserva a simetria contínua dos spins como deveria ser, já que o Teorema de Mermin-Wagner²⁴ proíbe a quebra “total” de simetria contínua da Hamiltoniana em duas dimensões. Weber e colaboradores também mostraram na referência⁸ que a transição está de acordo com a classe de universalidade da transição do modelo de Ising 2D ferromagnético. O diagrama de fases T_c/J_1 em função de J_2/J_1 obtido por Weber *et al.* é mostrado na Fig. 7. Podemos notar que para $J_2/J_1 \gg 1/2$ o comportamento é linear dado pela reta $T_c \approx 0.55J_2$, que difere em pouco da relação prevista para esse limite derivada por CCL, que é $T_c \approx 0.77J_2$. Ainda, para $J_2/J_1 \approx 1/2$, $T_c \rightarrow 0$ com derivada infinita. Esse comportamento é totalmente diferente do previsto por CCL, que derivaram uma relação onde $T_c \rightarrow 0$ logicamente quando $J_2/J_1 \rightarrow 0$. Isto porque a aproximação usada por CCL assume a hipótese de que

[§] Lembre-se da Teoria de Landau para transições de fase.²⁴

Figura 7 – Diagrama de fases para o modelo de Heisenberg J_1 - J_2 clássico. No regime $J_2/J_1 \gg 1/2$ temos $T_c \approx 0.55J_2$. Já para $J_2/J_1 \approx 1/2$, $T_c \rightarrow 0$ com derivada infinita relacionada ao favorecimento do estado Néel pelas flutuações térmicas de alta temperatura.

Fonte: WEBER *et al.*⁸

$J_2 \gg J_1$. Entretanto, segundo Weber *et al.*, o comportamento de T_c ir a zero com derivada infinita no regime perto do ponto de transição $J_2/J_1 = 1/2$, está relacionado com o fato de que flutuações térmicas de temperatura maior que T_c favorecem a ordem Néel (isso também acontece com as flutuações quânticas⁶ perto desse ponto). Isso provoca a existência de um crossover entre o estado Néel e o estado colinear, que é estimado para acontecer em uma temperatura $T_0 \propto (J_2/J_1 - 1/2)^{1/2}$ que é da ordem de T_c porém maior, já que depois de T_0 a transição já ocorreu e são previstas flutuações colineares de curto alcance. Dessa forma, eles indicam que a temperatura crítica deve acompanhar a temperatura de crossover, o que justifica a derivada infinita no diagrama da Fig. 7 quando $J_2/J_1 \rightarrow 1/2$.

2.1.3 Desordem Estrutural (Sítios não-magnéticos)

Além das flutuações térmicas e quânticas, podemos incluir no sistema a desordem de sítios não-magnéticos ou acoplamentos. É de se esperar que este tipo de desordem também possa levantar a degenerescência do estado fundamental clássico de alguma maneira. De fato, considerando o sistema clássico com impurezas não-magnéticas e em $T = 0$, podemos reproduzir argumentos análogos⁴ aos dados no início da Subseção 2.1.1 e verificar quais estados são selecionados. Para tanto, considere a Fig. 8a. Nela está ilustrado um possível estado fundamental no regime de ordem por desordem com as duas sub-redes $\sqrt{2}a \times \sqrt{2}a$ denotadas por a (azul) e b (vermelha), porém com um sítio da sub-rede b removido. Novamente vamos analisar o efeito do campo molecular em um spin i da sub-rede a . Na situação com a impureza, o campo molecular no spin $\mathbf{S}_i$ devido aos spins da sub-rede b , $\mathbf{h}_i^b$, é não nulo dado por $\mathbf{h}_i^b = \mp J_1 \mathbf{S}_j$ com $j \in b$ sendo o sítio removido; $\mathbf{S}_j$ o spin que existiria ali se o sítio não tivesse sido removido e; o sinal de “−” (“+”) deve ser usado quando $J_1 > 0$ ($J_1 < 0$). Agora, note que esse campo molecular está presente em todos os primeiros vizinhos de $\mathbf{S}_j$. Portanto, nesta região a situação é análoga à de um antiferromagneto de Heisenberg clássico em um campo magnético externo uniforme. Dessa forma, sabemos que haverá o efeito de canting nos spins da sub-rede a , que por conta disso irão preferir ficar

Figura 8 – (a) Um possível estado fundamental do sistema no regime de ordem por desordem com um sítio magnético removido (ou com uma impureza não-magnética), e o campo molecular da sub-rede b em um spin i , primeiro vizinho da impureza, na sub-rede a . (b) Estado resultante da minimização da energia quando há uma impureza não-magnética na rede.

Fonte: (a) Elaborada pelo autor; (b) Adaptada de WEBER; MILA.²⁰

perpendiculares ao campo $\mathbf{h}_i^{b25,26}$ – apesar de ser um cálculo simples, não o reproduziremos aqui por não ser o foco da subseção, mas basta escrever os spins e o campo uniforme em coordenadas esféricas e minimizar a energia com respeito aos ângulos azimutal e polar. Portanto, podemos concluir que $\mathbf{S}_i \perp \mathbf{h}_i^b$, mas como $\mathbf{h}_i^b \parallel \mathbf{S}_j$ ou $\mathbf{h}_i^b \parallel -\mathbf{S}_j$, temos que $\mathbf{S}_i \perp \mathbf{S}_j$, ou seja, as duas sub-redes são perpendiculares ou anticolineares. Esse argumento, a princípio, vale para a vizinhança da impureza onde argumentamos que a analogia com o antiferromagneto de Heisenberg clássico em um campo magnético externo uniforme vale. Porém, se isso acontece naquela vizinhança e J_2 força os segundos vizinhos a preservarem o estado Néel nas sub-redes $\sqrt{2}a \times \sqrt{2}a$, temos que essa configuração se propaga por toda a rede como mostrado na Fig.8b.

Esta ordem possui simetria contínua que pode ser facilmente entendida se analisarmos a Fig. 9. Como o essencial da ordem anticolinear é o fato das sub-redes serem perpendiculares, podemos rotacionar os spins de uma sub-rede, como feito no segundo desenho da Fig. 9, mantendo o ângulo de 90° entre as sub-redes, até inverter totalmente os spins da sub-rede que escolhemos rotacionar. Dessa forma, para caracterizar esta ordem,

Figura 9 – Ilustração da simetria contínua da ordem anticolinear. Note que as sub-redes sempre estão perpendiculares e que por isso a ordem anticolinear é mantida e possui simetria contínua, já que a rotação de uma das sub-redes (vermelha no caso) pode ser feita por um ângulo qualquer entre 0 e 2π .

Fonte: Elaborada pelo autor.

necessitamos definir um parâmetro de ordem que carrega essa simetria. Entretanto, deve-se ter em mente que só podemos estudar um possível ordenamento de curto alcance ou a suscetibilidade do sistema em possuir esta ordem, já que o Teorema de Mermin-Wagner²⁴ proíbe quebra espontânea de simetria contínua em duas dimensões espaciais.

Weber e Mila,²⁰ que estudaram os efeitos de impurezas não-magnéticas no mesmo modelo que o estudado neste trabalho, definiram o seguinte parâmetro de ordem para caracterizar o ordenamento anticolinear local em uma plaqueta

$$\widetilde{M}_{90}^{(i)} = \frac{|(\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_{i+a_1+a_2}) \times (\mathbf{S}_{i+a_1} - \mathbf{S}_{i+a_2})|}{4S}. \quad (2.40)$$

Como o objetivo deles foi analisar quão suscetível é o sistema para essa ordem quando há também flutuações térmicas, a simetria contínua foi deixada de lado e adotou-se um parâmetro de ordem escalar. Com o parâmetro de ordem escrito na Eq. (2.40), Weber e Mila observaram que o sistema é altamente suscetível à ordem anticolinear em temperatura baixa ($\widetilde{M}_{90}^{(i)} \approx 1 \forall i$), porém sem ordenamento de longo alcance (como deveria ser). Outro comportamento observado por eles é a blindagem das impurezas em temperaturas altas, graças a seleção entrópica dos estados colineares pelo mecanismo de ordem-por-desordem. Como consequência disto, o parâmetro de ordem colinear ganha magnitude conforme a temperatura aumenta, mas vai a zero quando atinge T_c . Assim, a transição do sistema limpo ainda está presente, mas a ordem colinear de longo alcance para temperaturas baixas, $T \ll T_c$, é suprimida.

Inspirados pela Eq. (2.40), podemos definir um parâmetro de ordem vetorial com simetria contínua. Se olharmos para um conjunto de 4 plaquetas e calcularmos o vetor $\widetilde{\mathbf{M}}_{90}^{(i)}$ em cada uma destas plaquetas, reconheceremos um padrão do tipo Néel para esta quantidade, como ilustrado na Fig. 10.

Figura 10 – Vetor $\widetilde{\mathbf{M}}_{90}^{(i)}$ calculado em 4 plaquetas com a ordem anticolinear. Note a característica cambaleante que este possui, assim como um estado de Néel.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Logo, podemos propor um parâmetro de ordem local em uma plaqueta

$$\mathbf{M}_{90}^{(i)} = (-1)^{(n+m)} \widetilde{\mathbf{M}}_{90}^{(i)}, \quad (2.41)$$

na qual n e m são as componentes do vetor da rede de Bravais, $i = na_1 + ma_2$; e um parâmetro de ordem global, que é a soma em todas as plaquetas da expressão acima, para obtermos o comportamento global do sistema,

$$\mathbf{m}_{90} = \frac{1}{N} \sum_i \mathbf{M}_{90}^{(i)}. \quad (2.42)$$

Estes parâmetros possuem simetria contínua além de compensarem as inversões da ordem anticolinear. Nos resultados obtidos neste trabalho, além de calcularmos todos estes parâmetros, também definimos uma versão global da Eq. (2.40) dada por

$$\widetilde{m}_{90} = \frac{1}{N} \sum_i \widetilde{M}_{90}^{(i)}; \quad (2.43)$$

para comparação e verificação do Teorema de Mermin-Wagner.

O efeito de desordem nos acoplamentos de primeiros e segundos vizinhos será abordado na Seção 3.2 do Capítulo 3. Esse tipo de desordem introduz uma nova física no problema, e a explicação do porquê isso acontece é o nosso principal resultado.

3 O MECANISMO DE CAMPO-ALEATÓRIO

Neste capítulo explicaremos o que é o mecanismo de campo-aleatório e como ele destrói a ordem de longo alcance. O argumento que será desenvolvido aqui foi primeiramente utilizado em 1975 por Imry e Ma,²¹ sendo provado rigorosamente um pouco mais tarde, em 1989, por Aizenman e Wehr.²⁷ Na primeira seção reproduzimos os resultados do artigo de 1975, chegando ao famoso critério de estabilidade termodinâmica de Imry-Ma. Na segunda seção é mostrado como esse mecanismo emerge no modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$ clássico no regime de ordem por desordem, através da desordem binária nos acoplamentos de primeiros vizinhos.

3.1 O Critério de Imry-Ma

Considere um sistema d -dimensional que possui uma transição de fase caracterizada por um parâmetro de ordem $\vec{\phi}$, complexo ou não, de dimensão $n \in \mathbb{N}$. Suponha que este sistema é descrito por uma ação H escrita em função do parâmetro de ordem e, ainda, que exista um termo de acoplamento entre um campo aleatório $\mathbf{h}$ (também complexo ou não e n -dimensional) e $\vec{\phi}$ dado por

$$\Delta H_{\text{RF}} = -\epsilon \int d^d r \mathbf{h}(\mathbf{r}) \cdot \vec{\phi}(\mathbf{r}), \quad \epsilon > 0. \quad (3.1)$$

Também iremos supor que as médias espacial (denotada por $\overline{\cdots}$) e termodinâmica (denotada por $\langle \cdots \rangle$) de $\mathbf{h}(\mathbf{r})$ são nulas. Ainda, consideraremos que $\mathbf{h}$ possui uma correlação espacial de curto alcance, $\overline{\mathbf{h}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{h}(\mathbf{r}')}) = f(r - r')$.

Primeiramente, vamos analisar a estabilidade da fase ordenada*, em $T = 0$, perante a um defeito, que vem a ser um domínio formado pelo campo aleatório. Para isso, temos que entender como o ganho de energia do sistema escala com o tamanho dos domínios†, nos casos com e sem campo. No caso sem campo a análise é rápida. Considere primeiro que $n = 1$, ou seja, $\vec{\phi}$ possui somente uma direção. Esse é o caso do modelo de Ising, por exemplo. Agora imagine que estamos na fase ordenada ($\phi \neq 0$) e que queremos criar um domínio no qual o valor de ϕ é o energeticamente simétrico ao valor dominante de ϕ na fase. Pensando no modelo de Ising ferromagnético, imagine que estamos na fase ferromagnética para cima, onde a simetria Z_2 foi quebrada espontaneamente, e que queremos criar um domínio cujos spins estarão alinhados para baixo. Para isso haverá um custo energético por conta da parede de domínio. Nesse caso, a mudança brusca do parâmetro de ordem na parede aumenta a energia do sistema proporcionalmente à área da superfície do domínio. Se ℓ é o tamanho linear típico do domínio, o custo energético de formação desse domínio

* Que é onde a simetria é quebrada espontaneamente.

† Que são regiões onde o valor do parâmetro de ordem é uniforme.

é, portanto, $E_{\text{DW}}^{\text{Is}} \sim \ell^{d-1}$. Já no caso em que o parâmetro de ordem possui mais de uma direção, ou seja, $n \geq 2$ (a magnetização como parâmetro de ordem nos modelos XY e Heisenberg clássicos é um exemplo), há uma pequena mudança nessa penalização devida à simetria contínua que o parâmetro de ordem possui. Esta simetria permite uma mudança lenta de $\vec{\phi}$, proporcional ao seu gradiente ($\sim \text{comprimento}^{-1}$). Por isso, $E_{\text{DW}}^{\text{Is}}$ é distribuída de forma a fornecer energia suficiente para rotações infinitesimais de $\vec{\phi}$ que ocorrem por toda a parede de domínio e terminam quando ele é invertido. Como o tamanho linear típico do domínio é ℓ , a variação de $\vec{\phi}$ deverá ser aproximadamente proporcional a ℓ^{-1} . Mas para isso devemos ter $E_{\text{DW}} \sim E_{\text{DW}}^{\text{Is}}/\ell \sim \ell^{d-2}$.

Agora deduziremos a contribuição do campo aleatório. Note que, por conta da Eq. (3.1), é energeticamente favorável que $\vec{\phi}$ se alinhe com $\mathbf{h}$. Aproximaremos o campo $\mathbf{h}$ para uma variável discreta cujo domínio matemático é uma malha densa. Suponha que a soma dos campos dentro do domínio privilegie algum direção. Com efeito, $\vec{\phi}$ estará apontando naquela direção e a energia na média diminuirá. Novamente, queremos saber como essa diminuição se escala com o tamanho do domínio. Apesar da média favorecer uma direção, há desvios que localmente favorecem outra, e, por conta disso, a energia não diminui tanto quanto gostaríamos. Ao invés de diminuir proporcionalmente com a média espacial dentro do domínio, a energia devido ao campo aleatório será proporcional ao desvio padrão da média da soma dos campos. Como cada $\mathbf{h}(\mathbf{r}_i)$ é uma variável aleatória, a soma

$$\sum_{i \in \text{dom}} \mathbf{h}(\mathbf{r}_i), \quad (3.2)$$

possui distribuição gaussiana, graças ao Teorema Central do Limite,²⁸ com desvio padrão $\sigma \sim \ell^{d/2}$. Logo, a diminuição de energia na formação deste domínio é $E_{\text{RF}} \sim \ell^{d/2}$.

Agora podemos responder se é favorável a criação de um domínio na fase ordenada quando há um acoplamento entre um campo aleatório e o parâmetro de ordem. Para isso, basta comparar E_{RF} com E_{DW} ou $E_{\text{DW}}^{\text{Is}}$. Para $n = 1$ temos

$$E_{\text{RF}} > E_{\text{DW}}^{\text{Is}} \implies \ell^{d/2} > \ell^{d-1} \implies d < 2, \quad (3.3)$$

e analogamente para $n \geq 2$,

$$E_{\text{RF}} > E_{\text{DW}} \implies \ell^{d/2} < \ell^{d-2} \implies d < 4, \quad (3.4)$$

nas quais usamos o fato de que $\ell \gg a$, sendo a a escala de comprimento microscópica do sistema. É importante nos perguntarmos se a igualdade nas equações acima é válida. Utilizando somente os argumentos mostrados aqui, não podemos falar nada sobre a igualdade. Entretanto, o desenvolvimento mais rigoroso feito por Aizeman e Wher,²⁷ prova que nos casos $d = 2$ e $d = 4$, também é prevista a desestabilização da ordem de longo alcance. Dessa forma, as Eqs. (3.3) e (3.4) se tornam

$$d \leq 2, \text{ para } n = 1 \text{ e}; \quad d \leq 4, \text{ para } n \geq 2. \quad (3.5)$$

Isso nos diz que para $d \leq 2$ para $n = 1$ e $d \leq 4$ para $n \geq 2$, o sistema irá naturalmente criar domínios grandes por menor que seja a magnitude de ϵ na Eq. (3.1). Na Fig. 11 está ilustrado o mecanismo de campo-aleatório para o modelo de Ising 2D clássico ($n = 1$) em $T = 0$. Veja a coexistência e competição entre os domínios azuis (ferromagnéticos para cima) e vermelhos (ferromagnéticos para baixo). As Eqs. (3.5) são chamadas de critérios de Imry-Ma.²¹

Figura 11 – Desestabilização da fase ordenada do modelo de Ising 2D clássico ($n = 1$) devido ao mecanismo de campo-aleatório. Cada seta representa a resultante da soma dos campos aleatórios em uma vizinhança centrada na seta. Haverá destruição da fase ordenada se $\bar{\mathbf{h}} = 0 = \langle \mathbf{h} \rangle$, caso contrário a fase ordenada prevalece, mas há quebra forçada de simetria.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para temperatura finita os critérios devem continuar válidos assumindo equilíbrio termodinâmico. Como a criação de qualquer tipo de defeito ou desorganização é entropicamente favorável, o aparecimento de domínios deve acontecer mais frequentemente do que em $T = 0$, uma vez que eles são energeticamente favoráveis graças ao campo aleatório. Portanto, para $T > 0$ os critérios de Imry-Ma ainda são válidos.

Note que até mesmo sem flutuações térmicas, a criação de domínios acontece, porém sem dinâmica, isto é, os domínios existem e são estáticos como ilustrado na Fig. 11. Entretanto, quando há flutuações térmicas há dinâmica e a criação de domínios mesmo no equilíbrio acontece a todo momento.

Em tempo, vale ressaltar que a suposição $\bar{\mathbf{h}} = 0 = \langle \mathbf{h} \rangle$, é essencial para a destruição da ordem de longo alcance. Caso contrário, não haveria a criação de domínios dentro de domínios, pois teríamos mais regiões com um valor fixo de $\mathbf{h}$ e o sistema, na média, iria preferir manter um domínio compatível com esse valor. Isso resulta em ordem de longo alcance, mas não necessariamente em uma transição de fase, já que a singularidade na energia livre pode desaparecer devido a quebra forçada de simetria.

3.2 Modelo de Heisenberg J_1 - J_2 Clássico

No caso do modelo de Heisenberg J_1 - J_2 clássico no regime de ordem por desordem, podemos acionar o mecanismo de campo-aleatório através da adição de desordem binária nos primeiros vizinhos. Este tipo de desordem consiste em definir dois valores distintos de

acoplamentos entre primeiros vizinhos, digamos, J_1 e J'_1 , e distribuí-los aleatoriamente no sistema. Com a escolha correta de J_1 e J'_1 , podemos induzir um campo aleatório que se acopla ao parâmetro de ordem $M_\sigma^{(i)}$. Isto porque ao adicionar desordem de maneira correta, alteramos o balanço energético localmente, favorecendo um dos valores de $M_\sigma^{(i)}$ em uma região e o outro valor em outra região e, portanto, a criação de domínios dentro de domínios (se a média do campo for nula), como explicado na seção anterior. Com isso em mente, vamos comparar as energias de uma plaqueta com ambas as ordens ($\alpha = 0$ e $\alpha = \pi$) quando temos desordem binária de primeiros vizinhos em acoplamentos verticais e horizontais.

Considere uma plaqueta com ordem $(0, \pi)$ ($\alpha = 0$) e outra com ordem $(\pi, 0)$ ($\alpha = \pi$). Suponha que em ambas todos os acoplamentos de primeiros vizinhos são J_1 , exceto por um vertical que é J'_1 , como esboçado na Fig. 12a. Vamos calcular a energia em cada plaqueta e encontrar qual deve ser a relação entre J'_1 e J_1 para que uma configuração seja mais favorável do que a outra. A energia na plaqueta $(0, \pi)$ fica

$$H_{0,v}^{(i)} = -2J_2S^2 + J_1S^2 - J'_1S^2,$$

e na plaqueta $(\pi, 0)$ é

$$H_{\pi,v}^{(i)} = -2J_2S^2 - J_1S^2 + J'_1S^2.$$

Para que a configuração $(\pi, 0)$, por exemplo, seja mais favorável que a $(0, \pi)$, devemos ter $H_{\pi,v}^{(i)} < H_{0,v}^{(i)} \Rightarrow J'_1 < J_1$. Por outro lado, se todos os acoplamentos de primeiros vizinhos são J_1 , exceto por um horizontal que é J'_1 (veja a Fig. 12b), temos

$$H_{0,h}^{(i)} = -2J_2S^2 - J_1S^2 + J'_1S^2,$$

para a energia na plaqueta com ordem $(0, \pi)$. Já na plaqueta $(\pi, 0)$ ficamos com

$$H_{\pi,h}^{(i)} = -2J_2S^2 + J_1S^2 - J'_1S^2.$$

Consequentemente, $H_{\pi,h}^{(i)} < H_{0,h}^{(i)} \Rightarrow J'_1 > J_1$ ou $H_{0,h}^{(i)} < H_{\pi,h}^{(i)} \Rightarrow J'_1 < J_1$. Com efeito, se definirmos $J'_1 < J_1$ e o distribuímos aleatoriamente, mas igualmente, nas ligações verticais e horizontais, induziremos um campo aleatório de média nula no sistema, que, de acordo com o que foi exposto na seção anterior, deve desestabilizar a fase ordenada e suprimir a transição de fase, se o critério de Imry-Ma for satisfeito. Como neste caso a dimensão do parâmetro de ordem é $n = 1$ e a dimensão do sistema é $d = 2$, a Eq. (3.5) é satisfeita e deve acontecer o previsto por Imry e Ma.

Vale ressaltar que a média nula do campo aleatório vem da distribuição igual dos acoplamentos J'_1 nas posições vertical e horizontal. Logo, pelo que foi explicado na seção anterior, é de extrema importância para extinguir a ordem de longo alcance que haja distribuição igual dos acoplamentos verticais e horizontais. Caso contrário, isto é, se

Figura 12 – Plaquetas com desordem binária nos primeiros vizinhos (a) verticais e (b) horizontais.

As configurações destacadas são energeticamente favoráveis se $J_1' < J_1$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

houver mais desordem vertical do que horizontal, por exemplo, teremos quebra forçada de simetria e em temperaturas baixas o sistema irá se estabilizar na ordem $(\pi, 0)$. Porém, para esse modelo nessa situação, apesar de haver ordem de longo alcance, não haverá transição de fase, pois o favorecimento da ordem $(\pi, 0)$ faz com que a singularidade da energia livre deixe de existir. Heuristicamente, podemos ver isto se analisarmos como deve ser o comportamento da energia livre na passagem entre configurações de baixa ($0 < k_B T \ll J_1$) para alta temperatura ($0 \ll k_B T < J_1$) no limite termodinâmico.²⁴ Como há sempre o favorecimento da ordem $(\pi, 0)$, a entropia não consegue desorganizar o sistema como antes e a criação de domínios $(0, \pi)$ fica comprometida. Por consequência, a configuração de alta temperatura difere pouco da de baixa e mesmo no limite termodinâmico a fração dos domínios $(0, \pi)$ é baixa. Dessa forma, a energia livre será analítica na passagem de um regime para outro e a transição de fase deixará de existir.

Para concluir, é interessante nos atentarmos ao fato da quebra de simetria pelo campo aleatório nesse modelo. Campo aleatórios quebram, por definição, simetria do Hamiltoniano. Já a desordem em acoplamentos não possui esse efeito. Como, então, nos parece que há uma quebra de simetria em nosso Hamiltoniano? De fato, se imaginarmos a simetria inicial do nosso modelo, estaremos enganados de pensar que ela foi quebrada mas, se pensarmos em um modelo efetivo mais “adequado” aos fenômenos, podemos responder essa pergunta. Em nosso caso, a simetria inicialmente é contínua porém, pelo mecanismo de ordem-por-desordem, um modelo efetivo com simetria discreta emerge. Isso porque o sistema se comporta como tal, inclusive apresentando transição de fase em uma classe de universalidade compatível. Como consequência, podemos propor uma nova forma para o Hamiltoniano que será escrita em função do parâmetro de ordem da transição. Por sua vez, a desordem binária nos acoplamentos de primeiros vizinhos em nosso modelo original, será reescrita no modelo efetivo como um termo de campo aleatório e, sem surpresas, despertará o mecanismo de campo-aleatório se os critérios de Imry-Ma forem satisfeitos. Esse é o nosso caso, já que os fenômenos em nosso sistema no regime de ordem por desordem sugerem que podemos enxergá-lo como o modelo de Ising 2D ferromagnético.

Dessa maneira, interpretando a física do problema através da teoria efetiva apropriada, entendemos sem problemas a aparente quebra de simetria do Hamiltoniano. Isso também fornece outra justificativa do porquê da transição de fase não existir no caso onde só temos um tipo de acoplamento desordenado. Esse comportamento é esperado no modelo de Ising 2D ferromagnético com campo magnético externo fixo, que por sua vez é traduzido em nosso modelo original na desordem de somente um tipo de acoplamento. Com efeito, inferimos que em nosso caso não será diferente e a transição não acontecerá.

4 PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO MODELO DE HEISENBERG J_1 - J_2 CLÁSSICO

Neste capítulo apresentaremos resultados das simulações de Monte Carlo para o modelo estudado no caso sem desordem nos acoplamentos (ou limpo, Seção 4.1); no caso com desordem binária somente nos acoplamentos de vizinhos verticais (Seção 4.2) e; no caso com desordem binária em ambos os acoplamentos de primeiros vizinhos (Seção 4.3).

4.1 Caso Limpo

No caso limpo devemos observar uma transição de fase de segunda ordem entre a fase colinear e paramagnética.^{5,8} Vamos estudar essa transição através de simulações de Monte Carlo (MC). O algoritmo escolhido foi o Heat Bath²⁹ explicado em detalhes no Apêndice A. Tipicamente, em todas as simulações deste trabalho, realizamos 5×10^5 passos de MC para a termalização seguidos de 2×10^6 de passos para tomar médias. Deve-se entender um passo de MC como uma varredura aleatória na rede, que por sua vez consiste em sortear N spins aleatoriamente e fornecer a chance destes mudarem seu estado. Ainda, adotamos o processo de resfriamento para garantir termalização e variamos o tamanho linear do sistema entre $L = 20$ e 80 ($N = L^2$). É pertinente analisar as quantidades termodinâmicas que manifestam o comportamento singular da transição, tais como: o módulo do parâmetro de ordem colinear por spin $|m_\sigma|$, sua suscetibilidade χ_{col} e seu cumulante de Binder U_{col} e; o calor específico c_v por spin. Denotando a média termodinâmica de Monte Carlo por $\langle \dots \rangle$ temos

$$\langle |m_\sigma| \rangle = \frac{1}{N_{\text{mcs}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mcs}}} |m_{\sigma,i}|, \quad c_v = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{N k_B^2 T^2}, \quad (4.1)$$

$$\chi_{\text{col}} = \frac{N}{k_B T} \left(\langle m_\sigma^2 \rangle - \langle |m_\sigma| \rangle^2 \right), \quad U_{\text{col}} = \frac{3}{2} \left(1 - \frac{\langle m_\sigma^4 \rangle}{3 \langle m_\sigma^2 \rangle^2} \right). \quad (4.2)$$

Devido suas propriedades, o cumulante de Binder é muito útil para provar a existência da transição, fornecendo também sua ordem e uma estimativa para T_c .³⁰ A estimativa de T_c vem da universalidade do cumulante no ponto crítico, onde seu valor independe do tamanho do sistema. Já as transições de 1ª e 2ª ordem possuem assinaturas distintas na dependência de U_{col} com T . Em uma transição de 2ª ordem, o parâmetro de ordem vai continuamente para zero e não há coexistência de fases. Por conta disto, o cumulante é monotônico com a temperatura e independe do tamanho da rede no ponto de transição; portanto todos os cumulantes para tamanhos diferentes devem se cruzar em T_c . Em contrapartida, em uma transição de 1ª ordem há coexistência de fases que resulta na descontinuidade do parâmetro de ordem no ponto de transição. Dessa forma, o cumulante continuará se cruzando, porém ele também apresentará um mínimo cada vez mais pronunciado conforme se aumenta a rede. Por conveniência, faremos $k_B = 1$.

Figura 13 – Dependência com a temperatura (a) do parâmetro de ordem colinear por partícula e; (b) do calor específico por partícula, Eq.(4.1), para $J_1 = 1$ e $J_2 = 0.55$ e alguns tamanhos de rede. Note como a derivada de $\langle |m_\sigma| \rangle$ se torna mais divergente em $T \approx 0.2J_1$ conforme aumentamos o tamanho da rede, bem como o deslocamento do pico do calor específico aumenta numa taxa lenta.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na Fig. 13 temos os gráficos das quantidades da Eq. (4.1) em função da temperatura, para vários tamanhos de rede e parâmetros $J_1 = 1$ e $J_2 = 0.55$. Conforme L cresce, o parâmetro de ordem possui derivada cada vez mais divergente perto de $T = 0.2J_1$. Isso sugere que na vizinhança desse valor de T , teremos uma queda cada vez mais abrupta do parâmetro de ordem para zero conforme a rede aumenta. Claramente essa queda é contínua e analítica por conta do tamanho finito do sistema, mas isso já pode ser tomado como um indicativo inicial de que algo está acontecendo perto deste ponto. Para corroborar nossa

Figura 14 – Dependência com a temperatura (a) da suscetibilidade do parâmetro de ordem colinear e; (b) do cumulante de Binder, Eq.(4.1), para $J_1 = 1$ e $J_2 = 0.55$ e alguns tamanhos de rede. Perceba que o pico da suscetibilidade aumenta numa taxa alta conforme aumentamos o tamanho da rede e, que há cruzamento do cumulante em $T \approx 0.2J_1$, provando a existência da transição de fase.

Fonte: Elaborada pelo autor.

suspeita, podemos extrair informações do calor específico (Fig. 13b) e da suscetibilidade do parâmetro de ordem (Fig. 14a), que claramente possuem a tendência de apresentar comportamento singular no ponto citado. Se tivermos o modelo de Ising 2D ferromagnético em mente, podemos notar analogias com suas quantidades termodinâmicas. O veredito

final vem da análise do cumulante de Binder cujos gráficos são apresentados nas Figs. 14b e 15. Ele claramente possui um ponto de cruzamento na vizinhança de $T = 0.2J_1$, indicando inequivocamente que há transição. Somado a isto, também podemos obter a ordem da transição. Como o cumulante é monotônico com a temperatura e não possui mínimos, concluimos que a transição de fase é de segunda ordem (ou contínua). De fato não há porquê ela ser de primeira (ou descontínua), já que não é previsto a existência de coexistência de fases.

Figura 15 – Cumulante de Binder do parâmetro de ordem colinear (equação da direita na Eq. (14)) em função da temperatura para vários tamanhos de rede. Nesta escala, não resta dúvidas de que há o cruzamento, localizado com a linha tracejada no gráfico no ponto $T_c \approx 0.1967$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para encontrar a classe de universalidade desta transição, que se resume em determinar seus expoentes críticos, recorreremos ao método de análise de escala de tamanho finito do sistema^{24,30-32} ou mais comumente chamado de finite size scaling (FSS) em inglês. Esse método consiste em estudar o comportamento das quantidades termodinâmicas do sistema finito, perto do ponto crítico da transição. De acordo com o FSS, para temperaturas suficientemente próximas do ponto crítico e para diferentes tamanhos de sistema, observáveis termodinâmicos medidos pelo MC e reescalados de acordo, devem ter seus dados colapsados em uma única curva – chamada de função de escala – quando analisados em função da variável de escala correta. Por exemplo, o cumulante de Binder da Eq. (4.1) deve cair sobre sua função de escala, $f_{U_{\text{col}}}(x)$ (que não sabemos qual é), para diferentes tamanhos de rede L , quando analisado em função da variável $x = (T/T_c - 1)L^{1/\nu}$. Já a suscetibilidade do parâmetro de ordem, deve ser analisada de maneira reescalada em função da mesma variável x . Em outras palavras, devemos observar o colapso sobre $f_{\chi_{\text{col}}}(x)$ da quantidade $L^{-\gamma/\nu}\chi_{\text{col}}$ em função de $x = (T/T_c - 1)L^{1/\nu}$. Entretanto, o colapso ocorre somente quando escolhermos a temperatura crítica T_c , e os expoentes críticos ν e γ , corretos. Ainda, como estamos próximos do ponto crítico e lidando com o sistema finito, esperamos que as funções de escala sejam analíticas, o que nos permite expandi-las no ponto $x_0 = 0$.

Assim, temos

$$U_{\text{col}}(T, L) = f_{U_{\text{col}}}(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \dots, \quad (4.3)$$

e

$$L^{-\gamma/\nu} \chi_{\text{col}}(T, L) = f_{\chi_{\text{col}}}(x) = b_0 + b_1x + b_2x^2 + b_3x^3 + \dots, \quad (4.4)$$

na qual a_i e b_i são constantes. Com estas aproximações para as funções de escala do cumulante de Binder e da suscetibilidade colineares, podemos obter T_c , ν e γ . Para isso, devemos escolher uma ordem para truncar as Eqs. (4.3) e (4.4); variar T_c , ν e γ em valores próximos dos estimamos (T_c pode ser estimado a partir do cruzamento do cumulante) e calcular para todos estes valores os pontos $(U_{\text{col}}(T, L), x)$ e $(L^{-\gamma/\nu} \chi_{\text{col}}(T, L), x)$ para temperaturas próximas da estimativa de T_c e para vários tamanhos de rede e ; tomar a média e o desvio padrão dos valores de T_c , ν e γ que forneceram os melhores ajustes das funções de escala.

Figura 16 – O melhor colapso obtido para (a) o cumulante de Binder e para (b) a suscetibilidade colinear. Para ambos truncamos suas expansões (Eqs. (4.3) e (4.4)) na ordem quártica e calculamos as médias de T_c , ν e γ a partir dos ajustes que forneciam $\bar{R}^2 > 0.97$. Obtemos $T_c = 0.1964(2)$ e $\nu = 1.00(6)$ para o colapso de U_{col} e, usando o valor de ν encontrado, obtemos $T_c = 0.1965(2)$ e $\gamma = 1.72(5)$ para o colapso de χ_{col} . As linhas sólidas são as funções de escala $f_{U_{\text{col}}}(x)$ e $f_{\chi_{\text{col}}}(x)$. Incertezas não mostradas.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na Fig. 16 são mostrados exemplos de colapsos dos nossos dados de U_{col} e χ_{col} . Para determinar a qualidade dos ajustes, utilizamos o coeficiente de determinação ajustado $\bar{R}^2$.^{33–35} Esse coeficiente é adequado para descobrirmos quão bom é o ajuste de dados pela função fornecida (no caso, a função de escala), levando-se em conta a quantidade de parâmetros usados no ajuste. Se $\bar{R}^2 = 0$, o ajuste é pobre e se $\bar{R}^2 = 1$, o ajuste é o melhor possível*. Para determinar T_c , ν e γ , consideramos apenas ajustes com $\bar{R}^2 > 0.97$,

* Geralmente se usa o coeficiente $\bar{\chi}^2$ ^{28,30} para analisar quão bom é um ajuste. Todavia, como nossas incertezas das medidas de MC são muito baixas (da ordem de 10^{-7}), esse coeficiente acaba sendo inadequado para analisar o ajuste.

Tabela 1 – Temperatura e expoentes críticos obtidos neste trabalho para o modelo de Heisenberg J_1 - J_2 clássico através do método de FSS. Note que nosso modelo está na classe de universalidade do modelo de Ising 2D.

$T_c = 0.1965(2)$		
Exp	Este trabalho	Ising 2D
ν	1.00(6)	1
γ	1.72(5)	1.75
α	0.0(1)	0 (Log)
β	0.14(2)	0.125

Fonte: Elaborado pelo autor.

o que nos forneceu 257 de valores destas incógnitas. Com estas médias calculadas e seus respectivos desvios padrão obtidos, usamos as relações de escala²⁴

$$\nu d = 2 - \alpha = 2\beta + \gamma, \quad (4.5)$$

na qual d é a dimensionalidade do espaço real; para encontrar os expoentes α e β . Nosso resultados estão sumarizados na Tab. 1, onde também escrevemos os expoentes críticos para o modelo de Ising 2D. Nossos resultados estão de acordo com os encontrados por Weber *et al.*⁸ A classe de universalidade encontrada é a mesma do modelo de Ising 2D, como era esperado por conta da natureza do modelo efetivo que surgiu por conta do mecanismo de ordem-por-desordem. Com o conhecimento básico sobre o modelo estabelecido, podemos acrescentar diluição de acoplamentos no sistema e obter resultados novos.

4.2 Desordem Vertical ($\bar{h} \neq 0$)

Nesta seção e na seguinte mostraremos como o controle da desordem binária resulta nos fenômenos previstos na Seção 3.2. Adicionamos a desordem no mesmo sistema estudado na seção anterior e escolhemos $J'_1 = 0$ (diluição de acoplamentos). Em contraste ao caso limpo, a diluição de somente um tipo dos acoplamentos de primeiros vizinhos deve favorecer um dos estados selecionados pelo mecanismo de ordem-por-desordem e suprimir a transição mas preservando a ordem de longo alcance, como explicado na Seção 3.2. Vamos apresentar evidências inequívocas de que esse é o caso.

A primeira análise a ser feita é a comparação da distribuição de m_σ (sem o módulo) no caso limpo com a do caso diluído. Evidentemente, no caso limpo essa distribuição deve indicar que os estados $(0, \pi)$ e $(\pi, 0)$ têm mesma probabilidade de ocorrência, independente da temperatura contanto que $T < T_c$. Isso porque se conseguirmos fabricar várias amostras reais de um composto que é descrito por esse modelo e medirmos o parâmetro de ordem colinear nestas amostras, devemos observar que uma parte delas terá ordem $(0, \pi)$ de longo alcance e a outra parte terá ordem $(\pi, 0)$ de longo alcance. Isto é reflexo da simetria do modelo. Como as simulações de MC devem reproduzir a realidade, esperamos que uma parte de nossas simulações estacione em estados com ordem $(0, \pi)$ de longo alcance e outra parte estacione em estados com ordem $(\pi, 0)$ de longo alcance. Porém, como temos um

Figura 17 – Distribuição do parâmetro de ordem, $P(m_\sigma)$, no caso limpo, (a) e (b), e no caso com $x_v = 0.005$, (c) e (d), para $T = 0.010J_1$ (esquerda) e $T = 0.184J_1$ (direita) e para vários tamanhos de rede. Utilizamos $J_1 = 1$ e $J_2 = 0.55$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

sistema finito, transições de fase não devem ocorrer e por isso o parâmetro de ordem deve pular de $m_\sigma = +1$ para $m_\sigma = -1$ em uma mesma simulação (ou seja, não reproduzimos o que acontece na vida real). Entretanto, a escala de tempo (passos de MC) – que aumenta com o tamanho da rede – na qual isso acontece é muito grande quando comparada com a utilizada em nossas simulações (pois o algoritmo é de atualização local) e raramente observamos isto[†]. Dessa forma, os picos observados são de fato reflexos da simetria do modelo (do comportamento real do sistema) e não um efeito de tamanho finito. Para verificar este fato, realizamos, para cada L , 100 simulações com estados iniciais distintos (réplicas do sistema) e em cada uma coletamos uma amostra de aproximadamente 3.5×10^4 medidas de m_σ . Observando as Figs. 17a e 17b, notamos que há dois picos na distribuição $P(m_\sigma)$ localizados em ± 1 nas duas temperaturas consideradas. Ainda que os picos não sejam totalmente simétricos, há o erro associado (não mostrado nos gráficos) a finitude da amostra de dados. Se aumentarmos a quantidade de sistemas e passos de MC devemos obter a distribuição exata que deve ser totalmente simétrica. Já no caso com desordem, utilizamos $x_v = 0.005$ de concentração de diluição dos acoplamentos verticais[‡] (isto é 0.25% de todos os acoplamentos de primeiros vizinhos) e repetimos os passos da coleta de

[†] Somente em alguns casos para $L = 20$ foi possível observar a inversão

[‡] Por simetria, os argumentos desenvolvidos aqui aplicam-se para o caso de diluição dos acoplamentos horizontais, porém o favorecimento é da ordem $(0, \pi)$

dados do caso limpo, mas agora os diferentes estados iniciais são na verdade configurações de desordem diferentes. De acordo com a Seção 3.2, devemos favorecer o estado $(\pi, 0)$ onde $m_\sigma = -1$. Este é justamente o resultado corroborado pelas nossas simulações, como pode ser visto nas Figs. 17c e 17d. Mesmo com uma diluição fraca, isto é, bem abaixo do limiar de percolação, que é 50% para os acoplamentos de primeiros vizinhos da rede quadrada,³⁶ notamos que o estado $(0, \pi)$ foi totalmente esquecido pelo sistema. Como consequência concluímos que há quebra forçada de simetria e ordem de longo alcance impulsionada pela diluição.

Para visualizar melhor a quebra forçada de simetria e possivelmente outros efeitos, vamos definir o parâmetro de ordem colinear modificado:

$$M_{\sigma 4}^{(i)} = \frac{(\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_{i+a_1+a_2}) \cdot (\mathbf{S}_{i+a_1} - \mathbf{S}_{i+a_2})}{4S}. \quad (4.6)$$

Este parâmetro de ordem ainda carrega a simetria contínua inicial do modelo e pode fornecer maiores informações sobre a física do problema. No caso do sistema com diluição vertical, ele fortalece nossas afirmações de que o campo aleatório induzido pela diluição esquece os estados $(0, \pi)$ para qualquer temperatura, veja a Fig. 18. Ainda, pelo mapeamento apresentado na Fig. 18, podemos afirmar que dificilmente haverá alguma transição de fase, já que observamos uma destruição lenta da ordem de longo alcance conforme aumentamos a temperatura.

Figura 18 – Mapa no espaço real da média de MC do parâmetro de ordem colinear modificado, Eq. (4.6), para uma configuração de desordem do sistema de tamanho $L = 60$ com $J_1 = 1$, $J_2 = 0.55$ e $x_v = 0.02$. As colunas 1, 2 e 3, da esquerda para a direita, indicam as temperaturas nas quais as médias foram calculadas. Os retângulos verticais localizam as diluições de acoplamentos verticais. Note que temos quebra forçada de simetria e morte lenta da ordem de longo alcance.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para proporcionar evidências finais e concluir as afirmações feitas, analisamos as propriedades termodinâmicas de um sistema com os mesmos valores dos acoplamentos mas com $x_v = 0.02$ e apresentamos os resultados na Fig. 19. Nas simulações que possuem desordem (diluição), calculamos a média das realizações de desordem (denotada por $[\dots]$)

após de tomar a média termodinâmica:

$$[\langle |m_\sigma| \rangle] = \frac{1}{N_{\text{dr}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{dr}}} \langle |m_\sigma| \rangle_i, \quad c_v = \left[\frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{N k_B^2 T^2} \right], \quad (4.7)$$

$$\chi_{\text{col}} = \left[\frac{N}{k_B T} (\langle m_\sigma^2 \rangle - \langle |m_\sigma| \rangle^2) \right], \quad U_{\text{col}} = \left[\frac{3}{2} \left(1 - \frac{\langle m_\sigma^4 \rangle}{3 \langle m_\sigma^2 \rangle^2} \right) \right], \quad (4.8)$$

nas quais N_{dr} é o número de realizações de desordem, que escolhemos ser igual a 200 para estes cálculos. É claro que os dados mostram ordem de longo alcance, mesmo para temperaturas acima de T_c , mas não há nenhuma característica de transição, já que o cumulante não cruza e as outras quantidades não tendem a divergir conforme a rede cresce. Em particular, note que o calor específico por spin (Fig. 19b) já possui seu máximo

Figura 19 – Dependência com a temperatura (a) do parâmetro de ordem colinear; (b) do calor específico por spin; (c) da suscetibilidade do parâmetro de ordem e; (d) do cumulante de Binder, para vários tamanhos de rede e para $x_v = 0.02$, $J_1 = 1$ e $J_2 = 0.55$. Note que tais quantidades não apresentam as características de transição de fase.

Fonte: Elaborada pelo autor.

praticamente saturado para $L = 40$, já que a diferença entre este e $L = 60$ é ínfima. O mesmo acontece com a suscetibilidade do parâmetro de ordem (Fig. 19c), que também parece saturar em $L = 40$. Já no gráfico do parâmetro de ordem (Fig. 19a), observamos que $m_\sigma \rightarrow 0$ para $T > T_c$, além do saturamento dos valores assumidos por ele e de uma queda lenta para zero se comparada com o caso limpo. Isto ocorre porque a média espacial do campo aleatório $\mathbf{h}$ é não nula[§]: quanto maior for a diluição, maior será essa média e

[§] A média termodinâmica de $\mathbf{h}$ deve ser bem comportada, uma vez que nossa desordem não possui dependência com a temperatura.

mais lentamente m_σ irá desaparecer. Concluimos, portanto, que não há transição e que a diluição dos acoplamentos verticais funciona como um campo que acopla com o parâmetro de ordem e mantém a ordem de longo alcance no sistema.

4.3 Desordem Vertical e Horizontal ($\bar{h} = 0$)

Agora vamos analisar o que acontece quando temos a mesma concentração de diluição nos acoplamentos verticais e horizontais. Devemos observar a competição entre domínios $(\pi, 0)$ e $(0, \pi)$ que liga o mecanismo de Imry-Ma e suprime a transição. Utilizando $J_1 = 1$, $J_2 = 0.55$, $J'_1 = 0$, $N_{\text{dr}} = 100$ e $x_v = x_h = 0.01$, obtemos a distribuição $P(m_\sigma)$ para $T = 0.010J_1$ e $T = 0.184J_1$ e para alguns tamanhos de rede, mostrada na Fig. 20. Observe

Figura 20 – Painéis (a) e (b): distribuição do parâmetro de ordem, $P(m_\sigma)$, para vários tamanhos de rede, para $x_v = x_h = 0.01$ e para as temperaturas $T = 0.010J_1$ (a) e $T = 0.184J_1$ (b). Painéis (c) - (e): mapa no espaço real (para uma configuração de desordem) do parâmetro de ordem na plaqueta, Eq. (2.26), na metade (c) e no final da simulação (d) e a média (e), para $L = 20$, $T = 0.203J_1$ e $x_v = x_h = 0.02$. Utilizamos $J_1 = 1$, $J_2 = 0.55$. Os retângulos verticais (horizontais) localizam as diluições de acoplamentos verticais (horizontais). Note o tamanho dos domínios e o mecanismo de Imry-Ma.

Fonte: Elaborada pelo autor.

primeiro o resultado para $L = 20$ e $T = 0.010J_1$ (Fig. 20a). Podemos notar que, apesar da larga dispersão da distribuição, a média é aproximadamente zero. Em contrapartida, para $T = 0.184J_1$ (Fig. 20b) encontramos dois picos nos estados $m_\sigma = \pm 1$. Apesar da semelhança com o caso limpo, a física do problema é essencialmente diferente. Aqui, mesmo para essa temperatura, o comprimento de correlação é maior ou comparável com o tamanho da rede

(veja as Figs. 20c, 20d e 20e), ou seja, $\xi \gtrsim L$, onde ξ denota o comprimento de correlação. Portanto, a criação/inversão de domínios resulta na mudança completa do sistema. Agora, como a rede é pequena, é mais propício que em nossa simulação aconteça a inversão do ordenamento do sistema (como já foi dito). Por sua vez, a desordem também incentiva essa inversão, por conta do mecanismo de Imry-Ma. Esses fatos, somados ao ganho entrópico de criação de domínios, tonam mais frequente a criação de domínios (com tamanho da ordem de ξ) dentro de domínios, que faz o parâmetro de ordem saltitar a todo momento entre os valores $+1$ e -1 em uma mesma simulação, resultando em dois picos em $P(m_\sigma)$. Repare que também com $T = 0.0184J_1$, mas para $L = 40$ e 60 , esses picos se movem para $m_\sigma = 0$. Isso acontece porque agora $\xi \lesssim L$ e há melhor coexistência e competição dos dois tipos de domínios, mesmo para entropia alta (temperatura perto da crítica). Para visualizar melhor o que acontece, observe a Fig. 21. Nela mostramos o mapa no espaço real do parâmetro de ordem colinear modificado, Eq. (4.6), para diferentes etapas da simulação de MC para uma certa configuração de desordem do sistema de tamanho $L = 60$. Veja que o ordenamento de longo alcance é comprometido pela formação de domínios que competem entre si conforme o tempo passa (observe os tamanhos dos domínios conforme o avanço da simulação). Note também que não há inversão dos domínios, indicando de fato a falta de ordem de longo alcance e fornecendo mais provas para as afirmações feitas. Através destes resultados, inferimos que não deve haver essa ordem de longo alcance para nenhuma temperatura no limite termodinâmico. Por consequência, a transição de fase do caso limpo deixará de existir.

Figura 21 – Mapa no espaço real do parâmetro de ordem colinear modificado, Eq. (4.6), para uma configuração de desordem do sistema de tamanho $L = 60$ com $J_1 = 1$, $J_2 = 0.55$ e $x_v = x_h = 0.02$. As colunas 1, 2 e 3, da esquerda para a direita, indicam em qual passo de MC os cálculos foram feitos. Observe a competição entre os domínios induzida pelo mecanismo de campo-aleatório.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para corroborar esses argumentos e concluir a análise, calculamos os mesmos observáveis termodinâmicos da seção anterior, que estão mostrados na Fig. 22. Mais uma vez tomamos $J_1 = 1$, $J_2 = 0.55$, $x_v = x_h = 0.02$ e $N_{dr} = 200, 200, 600, 400$ e 400 para $L = 20, 30, 40, 60$ e 80 , respectivamente. Esses observáveis não apresentam assinaturas da

Figura 22 – Dependência com a temperatura (a) do parâmetro de ordem colinear; (b) do calor específico por spin; (c) da suscetibilidade do parâmetro de ordem e ; (d) do cumulante de Binder, para vários tamanhos de rede e para $x_v = x_h = 0.02$, $J_1 = 1$ e $J_2 = 0.55$. Note que tais quantidades não apresentam as características de transição de fase. Fonte: Elaborada pelo autor.

transição, tampouco de ordenamento de longo alcance. Note que o mecanismo explicando os dois picos de $P(m_\sigma)$ na Fig. 20 é evidenciado na dependência do parâmetro de ordem com a temperatura, Fig. 22a. Vale apontar que χ_{col} apresenta uma flutuação alta em baixas temperaturas e mais poder numérico é necessário para refinar os dados. Entretanto, podemos perceber o crescimento da função conforme diminuimos T . Esse comportamento sugere um crossover entre dois regimes que surgem nos domínios. A hipótese mais educada é de que esse comportamento seja devido as bordas dos domínios que talvez possuam “spins órfãos” (mas no caso, “plaquetas órfãs” – veja na Fig. 21 como as regiões das bordas não possuem ordenamento colinear forte), que estão, de uma maneira efetiva, fracamente acoplados com os “spins” dos domínios adjacentes simplesmente porque estes estão praticamente congelados nos estados up ou down $((\pi, 0)$ ou $(0, \pi))$. Isso faz com que esses spins se comportem como um paramagneto que deve obedecer a Lei de Curie. Entretanto, não podemos afirmar com certeza o que acontece sem ao menos refinar os dados e investigar temperaturas mais baixas.

Dessa forma, nossos resultados apresentam evidências inequívocas de que há o aparecimento do mecanismo de campo-aleatório em nosso modelo efetivo que surge do mecanismo de ordem-por-desordem. Esse mecanismo, destrói a estabilidade da ordem de longo alcance e extingue a transição de fase que existiam no modelo limpo.

Apesar de não existir ordenamento $(\pi, 0)$ ou $(0, \pi)$ e nem a transição de fase, nada nos impede de perguntar se há qualquer outro tipo de ordenamento ou transição. Podemos rapidamente responder a questão de haver outra transição ou não, se olharmos o calor específico da Fig. 22b. Esse observável é independente da ordem analisada e por isso captura qualquer transição que pode acontecer no sistema. Em nosso caso, o campo aleatório faz com que qualquer tipo de transição seja suprimida, já que não há nenhuma divergência em c_v . Por outro lado, ainda podemos ter outra ordem de longo ou curto alcance. Em particular, é pertinente investigar a ordem anticolinear – que deve ser de curto alcance ou inexistente por conta do Teorema de Mermin-Wagner – favorecida pela diluição de sítios como explicado na Seção 2.1.3, porque talvez ela seja a única opção de ordenamento restante para o nosso modelo (dada sua física). Por conta disso podemos nos perguntar: é possível também o favorecimento da ordem anticolinear através da diluição de acoplamentos verticais e horizontais[¶], apesar da destruição da ordem colinear através do mecanismo de campo-aleatório? Essa pergunta é respondida na subseção seguinte.

4.3.1 Ordenamento Anticolinear

Para verificar como se comporta o ordenamento anticolinear do modelo com diluição de acoplamentos verticais e horizontais, medimos em nossas simulações de MC os parâmetros de ordem da Seção 2.1.3, realizando a média na desordem depois da média termodinâmica:

$$[\langle \widetilde{m}_{90} \rangle] = \frac{1}{N_{\text{dr}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{dr}}} \langle \widetilde{m}_{90} \rangle_i, \quad [\langle m_{90} \rangle] = \frac{1}{N_{\text{dr}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{dr}}} \langle m_{90} \rangle_i. \quad (4.9)$$

Essas medidas foram tomadas nas mesmas condições das simulações da seção anterior: $J_1 = 1$, $J_2 = 0.55$, $x_v = x_h = 0.02$ e $N_{\text{dr}} = 200$. À primeira vista, o gráfico de $\widetilde{m}_{90}$ (Fig. 23a) indica um ordenamento abundante na rede, que tende a aumentar quando $T \rightarrow 0$. Porém, é preciso ter em mente que esse parâmetro de ordem superestima a fase e só indica a suscetibilidade do sistema em adquirir a ordem anticolinear.

Já o gráfico de m_{90} (Fig. 23b) fornece informações mais precisas, nos dizendo que conforme a rede aumenta essa ordem vai diminuindo, até para temperaturas mais baixas. Poderíamos nos perguntar se o gráfico da Fig. 23b não é a calda de uma função que assume valores mais altos para $T \rightarrow 0$, como na Fig. 13a. Entretanto, se esse fosse o caso, teríamos o indicativo de singularidade em algum ponto $T < 0.1J_1$ e isso não é uma visão válida, já que sabemos que não existe nenhuma transição de fase, muito menos para a fase anticolinear que possui simetria contínua. Logo, se fizermos mais simulações para temperaturas menores e tamanhos maiores, vamos encontrar $m_{90} \rightarrow 0$.

[¶] Essa pergunta não faz sentido para diluição somente dos acoplamentos horizontais ou verticais, muito menos no caso limpo, já que a ordem de longo alcance é bem estabelecida.

Figura 23 – Dependência com a temperatura (a) do parâmetro de ordem anticolinear $\tilde{m}_{90}$ e (b) do módulo do parâmetro de ordem anticolinear vetorial m_{90} , para vários tamanhos de rede. Utilizamos $J_1 = 1$, $J_2 = 0.55$ e $x_v = x_h = 0.02$. Note que não há nenhum sinal de ordenamento de longo alcance bem como nenhuma singularidade.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para corroborar esses argumentos, veja como o parâmetro $\mathbf{M}_{90}^{(i)}$, Eq. 2.41, se comporta em cada plaqueta na Fig. 24. Note que esse vetor não quebra a simetria contínua global e que, portanto, não há estabelecimento da ordem anticolinear de longo alcance. Com efeito, provamos as afirmações feitas na Seção 2.1.3 sobre a ordem anticolinear. Entretanto, há um pequeno ordenamento de curto alcance (justifica o valor de m_{90} para $T = 0.1J_1$ na Fig. 23b) que não foi previsto. Para enxergá-lo observe com cuidado a parte azulada do gráfico da componente y de $\mathbf{M}_{90}^{(i)}$ na Fig. 24. Essa região se situa entre os domínios $(\pi, 0)$ e $(0, \pi)$ (veja a Fig. 21), ou seja, nas paredes de domínio que competem graças ao mecanismo de campo-aleatório. De acordo com os dados, entendemos que a razão para isto é a seguinte. Apesar da ordem anticolinear não existir, o sistema é consideravelmente suscetível à ela, como já mostrado na Fig. 23a e confirmado na última linha de gráficos da Fig. 24. As regiões mais suscetíveis se encontram nas paredes dos domínios colineares. Nestas regiões o campo-aleatório é praticamente inexistente, então não temos nada que exige o alinhamento colinear entre as sub-redes além do mecanismo de ordem-por-desordem. Todavia, a seleção entrópica do ordem-por-desordem compete indiretamente com o campo-aleatório através da presença dos domínios. Estes forçam o aparecimento das paredes de domínio que por sua vez permanecerem em estados diferentes dos estados $(\pi, 0)$ e $(0, \pi)$. Como na passagem entre domínios podemos ter estados onde o alinhamento das sub-redes é qualquer, o alinhamento anticolinear é favorecido por custar menos energia devido a sua simetria contínua. Com efeito, sua suscetibilidade se torna considerável, justificando a pequena ordem de curto alcance existente no sistema.

Concluimos então, que não há ordem anticolinear de longo alcance, como previsto, mas que existe um pequeno ordenamento de curto alcance deste alinhamento situado nas paredes de domínio onde a suscetibilidade para esta ordem é considerável.

Figura 24 – Mapeamento no espaço real, para a configuração de desordem da Fig. 21, das componentes do parâmetro de ordem anticolinear vetorial $\mathbf{M}_{90}^{(i)}$ (Eq. 2.41) – linhas de 1 até 3 de cima para baixo –, e do parâmetro de ordem anticolinear $\widetilde{M}_{90}^{(i)}$ (Eq. 2.40) – linha 4 –, para $L = 60$, $J_1 = 1$, $J_2 = 0.55$, $T = 0.1J_1$ e $x_v = x_h = 0.02$. As colunas 1, 2 e 3, da esquerda para a direita, indicam em qual passo de MC os cálculos foram feitos.

Fonte: Elaborada pelo autor.

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho estudamos como a desordem binária nos acoplamentos de primeiros vizinhos afeta a ordem de longo alcance, bem como a transição de fase do caso limpo do tipo Ising no modelo de Heisenberg clássico com interações de primeiros (J_1) e segundos (J_2) vizinhos na rede quadrada. Uma revisão dos principais aspectos desse modelo foi apresentada e se resume no seguinte. Há degenerescência macroscópica do estado fundamental por conta da frustração ($J_2 > 0$ e $J_1 \neq 0$) e no regime $J_2/J_1 > 1/2$, chamado de ordem por desordem, o sistema se desacopla em duas sub-redes em estados Néel com um ângulo arbitrário entre elas. Dessa forma, a degenerescência é parametrizada pelo ângulo formado pelas sub-redes e possui simetria contínua. Entretanto, flutuações térmicas e quânticas levantam a degenerescência, selecionando dois estados da variedade degenerada.^{4,22} Os estados selecionado possuem alinhamento colinear entre as sub-redes, com vetores ordenamento $(\pi, 0)$ e $(0, \pi)$; e emergem uma simetria Z_2 associado a um parâmetro de ordem do tipo Ising. Com efeito, deve haver uma transição de fase que se acomoda na classe de universalidade do modelo de Ising ferromagnético na rede quadrada.^{5,8}

Posteriormente, explicamos o mecanismo de Imry-Ma,^{21,27} também chamado de mecanismo de campo-aleatório, apresentando os mesmos argumentos do artigo de 1975 escrito por eles. Além disso, explicamos como é possível ligar esse mecanismo em nosso modelo através de desordem binária nos acoplamentos de primeiros vizinhos. Mostramos que, escolhendo-se $J'_1 < J_1$ (acoplamentos impuros menores que os do caso limpo), a localização vertical ou horizontal do acoplamento impuro em uma plaqueta, favorece localmente a ordem $(\pi, 0)$ e $(0, \pi)$, respectivamente. Por conta disto, podemos induzir o mecanismo de campo-aleatório no sistema e alterar a estabilidade da fase ordenada. Foi salientado que a magnitude do campo e sua média espacial estão relacionados com a magnitude de J'_1 e com a quantidade de acoplamentos distribuídos na rede. A média termodinâmica deve ser bem comportada, já que nossa desordem não evolui com a temperatura. Ainda, baseando-se na instabilidade termodinâmica que o campo-aleatório origina, argumentamos que a transição de fase deve ser suprimida tanto no caso $\bar{\mathbf{h}} = 0$, quanto no caso $\bar{\mathbf{h}} \neq 0$; sendo que no primeiro caso isso ocorre por conta da competição entre domínios $(\pi, 0)$ e $(0, \pi)$, e no segundo porque há quebra forçada de simetria que apaga a singularidade da energia livre (porém, ainda temos ordem de longo alcance).

Finalmente, apresentamos nossos resultados obtidos através de simulações de Monte Carlo para o modelo em questão no caso limpo e no caso com a desordem citada. No caso limpo, mostramos como as quantidades termodinâmicas importantes para caracterizar transições de fase (parâmetro de ordem, calor específico, suscetibilidade e cumulante de Binder) se comportam, e recuperamos os resultados previstos na literatura. Para o caso com

desordem, escolhemos diluir os acoplamentos ($J'_1 = 0$) e evidenciamos, através da análise da distribuição do parâmetro de ordem, que de fato a diluição se comporta como o previsto, tanto no caso com somente diluição vertical, quanto no caso com ambos os tipos de acoplamentos diluídos. Para completar, procuramos assinaturas remanescentes da mesma e de outras ordens. No caso das impurezas verticais, o parâmetro de ordem apresentou, para temperaturas baixas, valores perto do seu máximo permitido, mas não indicou sinais de comportamento crítico, assim como todos os outros observáveis termodinâmicos. Portanto, a ordem $(\pi, 0)$ sobreviveu, mas a transição não. Em contrapartida, no caso de diluição vertical e horizontal, encontramos uma ordem colinear falsa, que só está presente em sistemas onde $\xi > L$. Conforme aumentamos L , notamos que essa ordem vai desaparecendo. Também não encontramos evidências de nenhum tipo de transição de fase. Para completar, estudamos o ordenamento anticolinear, que tende a surgir nesse sistema causado por diluição de sítios.^{4,20} Para isso, utilizamos o parâmetro de ordem $\widetilde{m}_{90}$, inspirado pelo trabalho de Weber e Mila²⁰ e o parâmetro $\mathbf{m}_{90}$, proposto por nós e que leva em conta do aspecto Néel desse ordenamento. Nossos resultados indicam a inexistência da ordem anticolinear em acordo com o Teorema de Mermin-Wagner.²⁴ Porém, encontramos evidências de que o sistema possui uma suscetibilidade considerável nas paredes de domínio para a ordem anticolinear que resulta em um pequeno ordenamento de curto alcance nestas regiões. Finalizamos concluindo que o mecanismo de campo-aleatório em nosso modelo, além de extinguir qualquer transição de fase, também impede a estabilização de outras fases.

REFERÊNCIAS

- 1 PAULING, L. The structure and entropy of ice and of other crystals with some randomness of atomic arrangement. **Journal of the American Chemical Society**, v. 57, n. 12, p. 2680–2684, 1935.
- 2 ANDERSON, P. The concept of frustration in spin glasses. **Journal of the Less Common Metals**, v. 62, p. 291 – 294, 1978.
- 3 VILLAIN, J.; BIDAUX, R.; CARTON, J.-P.; CONTE, R. Order as an effect of disorder. **Journal de Physique**, v. 41, n. 11, p. 1263–1272, 1980.
- 4 HENLEY, C. L. Ordering due to disorder in a frustrated vector antiferromagnet. **Physical Review Letters**, v. 62, n. 17, p. 2056–2059, 1989.
- 5 CHANDRA, P.; COLEMAN, P.; LARKIN, A. I. Ising transition in frustrated Heisenberg models. **Physical Review Letters**, v. 64, n. 1, p. 88–91, 1990.
- 6 MILA, F.; POILBLANC, D.; BRUDER, C. Spin dynamics in a frustrated magnet with short-range order. **Physical Review B**, v. 43, n. 10, p. 7891–7898, 1991.
- 7 SINGH, R. R. P.; ZHENG, W.; OITMAA, J.; SUSHKOV, O. P.; HAMER, C. J. Symmetry breaking in the collinear phase of the $J_1 - J_2$ Heisenberg model. **Physical Review Letters**, v. 91, n. 1, p. 017201, 2003.
- 8 WEBER, C.; CAPRIOTTI, L.; MISGUICH, G.; BECCA, F.; ELHAJAL, M.; MILA, F. Ising transition driven by frustration in a 2d classical model with continuous symmetry. **Physical Review Letters**, v. 91, n. 17, p. 177202, 2003.
- 9 MILLET, P.; SATTO, C. Synthesis and structures of the layered vanadyl(iv) silico-germanates $\text{Li}_2\text{VO}(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{O}_4$ ($x = 0, 0.5, 1$). **Materials Research Bulletin**, v. 33, n. 9, p. 1339 – 1345, 1998.
- 10 MELZI, R.; CARRETTA, P.; LASCIALFARI, A.; MAMBRINI, M.; TROYER, M.; MILLET, P.; MILA, F. $\text{Li}_2\text{VO}(\text{Si}, \text{Ge})\text{O}_4$, a prototype of a two-dimensional frustrated quantum Heisenberg antiferromagnet. **Physical Review Letters**, v. 85, n. 6, p. 1318–1321, 2000.
- 11 MELZI, R.; ALDROVANDI, S.; TEDOLDI, F.; CARRETTA, P.; MILLET, P.; MILA, F. Magnetic and thermodynamic properties of $\text{Li}_2\text{VO}\text{SiO}_4$: A two-dimensional $s = 1/2$ frustrated antiferromagnet on a square lattice. **Physical Review B**, v. 64, n. 2, p. 024409, 2001.
- 12 SKOULATOS, M.; GOFF, J. P.; GEIBEL, C.; KAUL, E. E.; NATH, R.; SHANNON, N.; SCHMIDT, B.; MURANI, A. P.; DEEN, P. P.; ENDERLE, M.; WILDES, A. R. Spin correlations and exchange in square-lattice frustrated ferromagnets. **Europhysics Letters**, v. 88, n. 5, p. 57005, 2009.
- 13 PARK, T.; RONNING, F.; YUAN, H. Q.; SALAMON, M. B.; MOVSHOVICH, R.; SARRAO, J. L.; THOMPSON, J. D. Hidden magnetism and quantum criticality in the heavy fermion superconductor CeRhIn_5 . **Nature**, v. 440, n. 7080, p. 65–68, 2006.

- 14 TAKABAYASHI, Y.; GANIN, A. Y.; JEGLIČ, P.; ARČON, D.; TAKANO, T.; IWASA, Y.; OHISHI, Y.; TAKATA, M.; TAKESHITA, N.; PRASSIDES, K.; ROSSEINSKY, M. J. The disorder-free non-bcs superconductor Cs_3C_{60} emerges from an antiferromagnetic insulator parent state. **Science**, v. 323, n. 5921, p. 1585–1590, 2009.
- 15 MUKHOPADHYAY, S.; OH, S.; MOUNCE, A. M.; LEE, M.; HALPERIN, W. P.; NI, N.; BUD'KO, S. L.; CANFIELD, P. C.; REYES, A. P.; KUHN, P. L. Magnetic impurities in the pnictide superconductor $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$. **New Journal of Physics**, v. 11, n. 5, p. 055002, 2009.
- 16 BONFÀ, P.; CARRETTA, P.; SANNA, S.; LAMURA, G.; PRANDO, G.; MARTINELLI, A.; PALENZONA, A.; TROPEANO, M.; PUTTI, M.; RENZI, R. D. Magnetic properties of spin-diluted iron pnictides from μsr and nmr in $\text{LaFe}_{1-x}\text{Ru}_x\text{AsO}$. **Physical Review B**, v. 85, n. 5, p. 054518, 2012.
- 17 CHEN, C.-C.; APPELEGATE, R.; MORITZ, B.; DEVEREAUX, T. P.; SINGH, R. P. Revealing the degree of magnetic frustration by non-magnetic impurities. **New Journal of Physics**, v. 13, n. 4, p. 043025, 2011.
- 18 ANDRADE, E. C.; HOYOS, J. A.; RACHEL, S.; VOJTA, M. Cluster-glass phase in pyrochlore xy antiferromagnets with quenched disorder. **Physical Review Letters**, v. 120, n. 9, p. 097204, 2018.
- 19 KUNWAR, S. S.; SEN, A.; VOJTA, T.; NARAYANAN, R. Tuning a random-field mechanism in a frustrated magnet. **Physical Review B**, v. 98, n. 2, p. 024206, 2018.
- 20 WEBER, C.; MILA, F. Anticollinear magnetic order induced by impurities in the frustrated Heisenberg model of pnictides. **Physical Review B**, v. 86, n. 18, p. 184432, 2012.
- 21 IMRY, Y.; MA, S.-k. Random-field instability of the ordered state of continuous symmetry. **Physical Review Letters**, v. 35, n. 21, p. 1399–1401, 1975.
- 22 PAVARINI, E.; KOCH, E.; COLEMAN, P. (eds.). **Many-body physics: from Kondo to Hubbard**. Jülich, Alemanha: Forschungszentrum Jülich GmbH Institute for Advanced Simulation, 2015. v. 5. 507 p.
- 23 ALTLAND, A.; SIMONS, B. **Condensed matter field theory**. 2nd. ed. New York, EUA: Cambridge University Press, 2010. 770 p.
- 24 GONDENFELD, N. **Lectures on phase transitions and renormalization group**. Reading, EUA: Perseus Books Publishing, 1992. 394 p. (Frontiers in Physics v. 85).
- 25 LACROIX, C.; MENDELS, P.; MILA, F. (eds.). **Introduction to frustrated magnetism: materials, experiments, theory**. Heidelberg, Alemanha: Springer, 2011. 679 p.
- 26 ZHITOMIRSKY, M. E.; NIKUNI, T. Magnetization curve of a square-lattice heisenberg antiferromagnet. **Physical Review B**, v. 57, n. 9, p. 5013–5016, 1998.
- 27 AIZENMAN, M.; WEHR, J. Rounding of first-order phase transitions in systems with quenched disorder. **Physical Review Letters**, v. 62, n. 21, p. 2503–2506, 1989.

- 28 BERG, B. A. **Markov chain, Monte Carlo simulations and their statistical analysis**: with web-based fortran code. Singapura: World Scientific Publishing, 2004. 361 p.
- 29 MIYATAKE, Y.; YAMAMOTO, M.; KIM, J. J.; TOYONAGA, M.; NAGAI, O. On the implementation of the 'heat bath' algorithms for monte carlo simulations of classical Heisenberg spin systems. **Journal of Physics C: solid state physics**, v. 19, n. 14, p. 2539–2546, 1986.
- 30 SANDVIK, A. W. Computational studies of quantum spin systems. **AIP Conference Proceedings**, v. 1297, n. 1, p. 135–338, 2010.
- 31 NEWMAN, M. E. J.; BARKEMA, G. T. **Monte Carlo methods in statistical physics**. New York, EUA: Oxford University Press, 2001. 475 p.
- 32 ANAGNOSTOPOULOS, K. N. **Computational physics**: a practical introduction to computational physics and scientific computing. Atenas, Grécia: Konstantinos N. Anagnostopoulos, 2014. 662 p.
- 33 WIKIPEDIA. **Coefficient of determination**. c2020. Disponível em: https://en.wikipedia.org/wiki/Coefficient_of_determination. Acesso em: 20 abr. 2020.
- 34 MATHWORKS. **Linear regression**. c2020. Disponível em: https://www.mathworks.com/help/matlab/data_analysis/linear-regression.html. Acesso em: 20 abr. 2020.
- 35 WOLFRAM. **AdjustedRSquared**. c2020. Disponível em: <https://reference.wolfram.com/language/RegressionCommon/ref/AdjustedRSquared.html>. Acesso em: 20 abr. 2020.
- 36 STOVER, C.; WIESSTEIN, E. W. **Percolation threshold**: from MathWorld—a Wolfram Web Resource. c2020. Disponível em: <http://mathworld.wolfram.com/PercolationThreshold.html>. Acesso em: 11 jan. 2020.

Apêndices

APÊNDICE A – DETALHES SOBRE AS SIMULAÇÕES DE MONTE CARLO

Neste apêndice apresentamos detalhes sobre o algoritmo e o método para o cálculo de incertezas utilizados nas simulações de Monte Carlo.

O algoritmo escolhido para realizar as simulações apresentadas neste trabalho foi o de Banho Térmico ou Heat Bath,^{29,31} em inglês. Esse algoritmo é do tipo local update (ou single flip) ou atualizações locais como o Metropolis, mas possui a vantagem de passear mais facilmente no espaço de fase, pois nele encontramos os novos ângulos dos spins como função de números aleatórios e, assim sendo, a configuração correspondente já é automaticamente fornecida e o movimento é sempre aceito.

A dinâmica do método independe da configuração atual do spin analisado, sendo totalmente controlada pelo campo local e pelo seu banho térmico. Portanto, para derivar as expressões dos novos ângulos de cada spin precisamos analisar seu comportamento termodinâmico, ou seja, precisamos calcular sua função de partição. Depois disto, vamos encontrar os novos ângulos do spin em questão em função de números aleatórios, que serão sorteados a fim de produzirem novos estados. Feito isto, nossa cadeia de Markov será gerada com a probabilidade correta de Boltzmann e irá conter os estados mais relevantes para uma dada temperatura.

Dado um spin $\mathbf{S}_i$ escrevemos sua energia como $H_i = \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{B}_i$, onde $\mathbf{B}_i = 1/2 \sum_{j,j'} J_{i,j} \mathbf{S}_j$ é seu campo local e rotacionamos o campo e o spin de maneira a preservar o produto interno, mas que $\mathbf{B}_i \parallel \hat{\mathbf{z}}$. Escrevendo $\mathbf{B}_i$ e $\mathbf{S}_i$ em coordenadas esféricas temos que os novos vetores rotacionados são dados por $\tilde{\mathbf{B}}_i = R_y(\Theta_i)R_z(\Phi_i)\mathbf{B}_i$ e $\tilde{\mathbf{S}}_i = R_y(\Theta_i)R_z(\Phi_i)\mathbf{S}_i$, onde Θ_i e Φ_i são os ângulos esféricos do campo molecular $\mathbf{B}_i^*$ (veja a Fig. 25). Dessa forma o ângulo entre eles, além de ser preservado, é também a coordenada θ_i do spin. Com isto a função de partição fica

$$\begin{aligned} Z_i &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi e^{-\beta H_i} \sin \tilde{\theta}_i d\tilde{\theta}_i d\tilde{\phi}_i = 2\pi \int_0^\pi e^{-\beta \tilde{B}_i \cos \tilde{\theta}_i} \sin \tilde{\theta}_i d\tilde{\theta}_i, \\ &\Rightarrow Z_i = \frac{4\pi}{\beta \tilde{B}_i} \sinh(\beta \tilde{B}_i), \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

na qual $|\tilde{\mathbf{B}}_i| = \tilde{B}_i$. Com esse resultado, a probabilidade infinitesimal de encontrar $\tilde{\theta}_i \in [\tilde{\theta}_i, \tilde{\theta}_i + d\tilde{\theta}_i]$ e $\tilde{\phi}_i \in [\tilde{\phi}_i, \tilde{\phi}_i + d\tilde{\phi}_i]$ é $\rho_i(\tilde{\theta}_i, \tilde{\phi}_i) \sin \tilde{\theta}_i d\tilde{\theta}_i d\tilde{\phi}_i = \left(e^{-\beta H_i(\tilde{\theta}_i)} / Z_i \right) \sin \tilde{\theta}_i d\tilde{\theta}_i d\tilde{\phi}_i$. Agora, dada uma densidade de probabilidade constante $\rho_{\text{cte}} = 1$ no intervalo $[0, 1]$, a chance de sortearmos um número $r \in [r, r + dr]$ é $\rho_{\text{cte}} dr = dr$. Logo, para encontrar o

* Perceba que aqui utilizamos a notação oposta à da Seção 2.1.1: agora $\tilde{\mathbf{A}}$ indica que o vetor $\mathbf{A}$ foi rotacionado.

Figura 25 – Sequencia de rotações feitas para alinhar o campo molecular com o eixo z . Denotamos $\mathbf{A}'_i = R_z(\Phi_i)\mathbf{A}_i$ e $\tilde{\mathbf{A}}_i = R_y(\Theta_i)\mathbf{A}'_i$. Quando $\mathbf{B}_i$ se alinha com o eixo z , a coordenada θ_i de $\mathbf{S}_i$ é também o ângulo entre $\mathbf{S}_i$ e $\mathbf{B}_i$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

novo ângulo $\tilde{\theta}_i$, que denotaremos por $\tilde{\theta}_i^N$, em função de r devemos resolver

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\tilde{\theta}_i^N} \frac{e^{-\beta H_i(\tilde{\theta}_i)}}{Z_i} \sin \tilde{\theta}_i d\tilde{\theta}_i = \int_0^r dr',$$

o que fornece

$$\tilde{\theta}_i^N = \arccos \left\{ - \left[1 + \frac{1}{\beta B_i} \ln \left(e^{-2\beta B_i} (1-r) + r \right) \right] \right\}, \quad (\text{A.2})$$

onde usamos o fato de que $\tilde{B}_i = B_i$. Fazendo a análise análoga para $\tilde{\phi}_i$ ficamos com

$$\int_0^{\tilde{\phi}_i^N} \int_0^\pi \frac{e^{-\beta H_i(\tilde{\theta}_i)}}{Z_i} \sin \tilde{\theta}_i d\tilde{\theta}_i d\tilde{\phi}_i = \int_0^r dr,$$

e resolvendo temos

$$\tilde{\phi}_i^N = 2\pi r'. \quad (\text{A.3})$$

Dessa forma, dados dois números aleatórios entre 0 e 1 encontramos os novos ângulos do spin rotacionado. Entretanto, queremos os novos ângulos θ_i^N e ϕ_i^N do spin inicial. Logo, escrevendo $\mathbf{S}_i^N = R_z(-\Phi_i)R_y(-\Theta_i)\tilde{\mathbf{S}}_i^N$ onde

$$R_z(-\Phi_i) = \begin{pmatrix} \cos \Phi_i & -\sin \Phi_i & 0 \\ \sin \Phi_i & \cos \Phi_i & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad R_y(-\Theta_i) = \begin{pmatrix} \cos \Theta_i & 0 & \sin \Theta_i \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \Theta_i & 0 & \cos \Theta_i \end{pmatrix},$$

encontramos os ângulos desejados, que são dados por

$$\theta_i^N = \arccos \left(\cos \Theta_i \cos \tilde{\theta}_i^N - \sin \Theta_i \sin \tilde{\theta}_i^N \cos \tilde{\phi}_i^N \right), \quad (\text{A.4})$$

e[†]

$$\phi_i^N = \arctan \left(\frac{\sin \Phi_i \left(\cos \Theta_i \sin \tilde{\theta}_i^N \cos \tilde{\phi}_i^N + \sin \Theta_i \cos \tilde{\theta}_i^N \right) + \cos \Phi_i \sin \tilde{\theta}_i^N \sin \tilde{\phi}_i^N}{\cos \Phi_i \left(\cos \Theta_i \sin \tilde{\theta}_i^N \cos \tilde{\phi}_i^N + \sin \Theta_i \cos \tilde{\theta}_i^N \right) - \sin \Phi_i \sin \tilde{\theta}_i^N \sin \tilde{\phi}_i^N} \right). \quad (\text{A.5})$$

Também temos, evidentemente, que

$$\Theta_i = \arctan\left(\frac{B_i^y}{B_i^x}\right), \quad (\text{A.6})$$

$$\Phi_i = \arccos\left(\frac{B_i^z}{B_i}\right). \quad (\text{A.7})$$

A sequência de passos do algoritmo é:

1. Sorteie aleatoriamente um spin;
2. Ache seu campo molecular e os ângulos dados pelas Eqs. (A.6) e (A.7);
3. Sorteie dois números aleatórios r e r' e substitua-os nas Eq. (A.2) e (A.3) para encontrar os novos ângulos do spin rotacionado;
4. Finalmente, utilize as Eq. (A.4) e (A.5) para encontrar os novos ângulos do spin no referencial inicial.

Vale apontar que esse algoritmo cumpre ergodicidade, visto que um número finito de passos nos leva de uma configuração para qualquer outra: se temos N spins podemos sair de uma dada configuração e chegar em qualquer outra em N passos. Balanço detalhado também é cumprido já que as probabilidades de transição são exatamente as probabilidades de Boltzmann.

Para o cálculo de incertezas, escolhemos o método de Jackknife³² que consiste em dividir de uma maneira específica a amostra $\{A\} = \{A_0, A_1, A_2, \dots, A_{N_{\text{mcs}}-1}\}$ de medidas de uma certa quantidade A em bins (ou blocos) e calcular a incerteza a partir da média aritmética de A em cada bloco. O procedimento de separar as medidas de A em blocos faz com que as médias das medidas dos blocos possam ser tomadas como medidas independentes se escolhermos o número certo de blocos. Em outras palavras, podemos excluir o efeito de correlação entre as medidas (usualmente presentes em processos markovianos) dividindo a amostra em blocos e tratando cada bloco como uma medida nova.

A ideia do método é a seguinte. Suponha que em uma simulação realizamos N_{mcs} passos de Monte Carlo e os ordenamos como escrito acima. O método consiste em escolher um número N_b de blocos, cada um contendo $\ell_b = N_{\text{mcs}} - N_{\text{mcs}}/N_b$ medidas de $\{A\}$ da seguinte maneira: no bloco k deletamos as N_{mcs}/N_b k -ésimas medidas que são as

[†] Deve-se tomar cuidado quando calculamos $\arctan(y/x)$ porque dependendo dos sinais de y e x , o ângulo resultante deverá estar em um quadrante específico. Numericamente, devemos utilizar uma função intrínseca da linguagem de programação escolhida que já leva isso em conta. Em nosso caso, escolhemos a linguagem FORTRAN 95 e a função ATAN2 é a ideal para esse propósito.

subsequentes às $(k - 1)(N_{\text{mcs}}/N_b)$ primeiras medidas. Ou seja, no primeiro bloco deletamos as N_{mcs}/N_b primeiras medidas; no segundo bloco deletamos as N_{mcs}/N_b segundas medidas que são as subsequentes às N_{mcs}/N_b primeiras medidas; no terceiro bloco deletamos as N_{mcs}/N_b terceiras medidas que são as subsequentes às $2(N_{\text{mcs}}/N_b)$ primeiras medidas; e assim sucessivamente (veja a Fig. 26). Feito isso, calculamos a média das medidas de cada

Figura 26 – Ilustração do processo de construção dos blocos do método de Jackknife para cálculos de incerteza. Nesse caso temos $N_{\text{mcs}} = 20$ e escolhemos $N_b = 5$ blocos. Portanto, cada bloco contém $\ell_b = 16$ medidas.

Fonte: Adaptada de ANAGNOSTOPOULOS.³²

bloco A_k^b , $k = 1, \dots, N_b$, e calculamos a incerteza de A através da expressão^{28,32}

$$\sigma_A = \sqrt{(N_b - 1) \left(\langle (A^b)^2 \rangle - \langle A^b \rangle^2 \right)}, \quad (\text{A.8})$$

onde

$$\langle A^b \rangle = \frac{1}{N_b} \sum_{i=0}^{N_{\text{mcs}}-1} A_i^b.$$

A pergunta que surge é: qual a quantidade de blocos que fornece o erro correto? Para responder isto basta repetir o método para vários N_b e olhar σ_A em função de N_b . Haverá um intervalo de valores de N_b no qual σ_A é aproximadamente constante. Dessa forma, qualquer N_b neste intervalo fornece a incerteza correta, caso contrário a incerteza pode ser sub ou superestimada.

Também calculamos médias e incertezas com respeito as realizações de desordem (configurações de diluição). Nesse caso, como as configurações de desordem são descorrelacionadas, podemos interpretar as médias das quantidades termodinâmicas como variáveis independentes e simplesmente calcular o desvio padrão da amostra para representar a incerteza da média na desordem. Logo, para o observável termodinâmico A temos

$$\sigma_A^D = \sqrt{\frac{[\langle A \rangle^2] - [\langle A \rangle]^2}{N_{\text{dr}} - 1}}, \quad (\text{A.9})$$

na qual N_{dr} é o número de realizações de desordem e $[\langle A \rangle]$ detona a média nas realizações de desordem de $\langle A \rangle$,

$$[\langle A \rangle] = \frac{1}{N_{\text{dr}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{dr}}} \langle A \rangle_i, \quad (\text{A.10})$$

e $\langle A \rangle$ denota a média termodinâmica (nas medidas de Monte Carlo) de A ,

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N_{\text{mcs}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mcs}}} A_i. \quad (\text{A.11})$$