

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA
CENTRO DE CIÊNCIAS NATURAIS E EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Matheus Roos de Oliveira

**EFEITOS DE INTERAÇÕES DE TERCEIROS VIZINHOS SOBRE A
CRITICALIDADE DO MODELO DE ISING QUÂNTICO NA REDE
QUADRADA FRUSTRADA**

Santa Maria, RS
2023

Matheus Roos de Oliveira

**EFEITOS DE INTERAÇÕES DE TERCEIROS VIZINHOS SOBRE A CRITICALIDADE
DO MODELO DE ISING QUÂNTICO NA REDE QUADRADA FRUSTRADA**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física, Área de Concentração em Física da Matéria Condensada, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para obtenção do grau de **Mestre em Física**. Defesa realizada por videoconferência.

Orientador: Prof. Dr. Mateus Schmidt

Santa Maria, RS
2023

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

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001

Roos de Oliveira, Matheus

Efeitos de interações de terceiros vizinhos sobre a criticalidade do modelo de Ising quântico na rede quadrada frustrada / Matheus Roos de Oliveira.- 2023.
70 p.; 30 cm

Orientador: Mateus Schmidt
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa Maria, Centro de Ciências Naturais e Exatas, Programa de Pós-Graduação em Física, RS, 2023

1. Modelo de Ising quântico 2. Quantum annealed criticality 3. Frustração I. Schmidt, Mateus II. Título.

Sistema de geração automática de ficha catalográfica da UFSM. Dados fornecidos pelo autor(a). Sob supervisão da Direção da Divisão de Processos Técnicos da Biblioteca Central. Bibliotecária responsável Paula Schoenfeldt Patta CRB 10/1728.

Declaro, MATHEUS ROOS DE OLIVEIRA, para os devidos fins e sob as penas da lei, que a pesquisa constante neste trabalho de conclusão de curso (Dissertação) foi por mim elaborada e que as informações necessárias objeto de consulta em literatura e outras fontes estão devidamente referenciadas. Declaro, ainda, que este trabalho ou parte dele não foi apresentado anteriormente para obtenção de qualquer outro grau acadêmico, estando ciente de que a inveracidade da presente declaração poderá resultar na anulação da titulação pela Universidade, entre outras consequências legais.

Matheus Roos de Oliveira

**EFEITOS DE INTERAÇÕES DE TERCEIROS VIZINHOS SOBRE A CRITICALIDADE
DO MODELO DE ISING QUÂNTICO NA REDE QUADRADA FRUSTRADA**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física, Área de Concentração em Física da Matéria Condensada, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para obtenção do grau de **Mestre em Física**.

Aprovado em 14 de fevereiro de 2023:

Mateus Schmidt, Dr. (UFSM)
(Presidente/Orientador)

Paulo Cesar Piquini, Dr. (UFSM) (videoconferência)

Rubem Erichsen Junior, Dr. (UFRGS) (videoconferência)

Santa Maria, RS
2023

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer à minha família, especialmente minha mãe e meu padrasto pelo apoio durante este período. Também agradeço à Deca por ter aberto as portas de sua casa para mim durante este último ano de mestrado. Ao amigo Valmor, por me ajudar a manter a sanidade mental, desde a minha graduação. Aos colegas de laboratório pela parceria. Aos conselhos e a ajuda do Prof. Orimar, que foram essenciais durante um período bastante conturbado do meu mestrado. Ao Prof. Piquini pelos conselhos e por ter sugerido o Prof. Mateus Schmidt como orientador.

Em particular, agradeço ao meu orientador, que aceitou o desafio de assumir minha orientação. Até então, um aluno desconhecido, de outra área e faltando apenas 6 meses para conclusão do curso. Além disso, a paciência e a expertise do professor que possibilitaram concluir este trabalho em um tempo recorde, muito obrigado!

Por fim, agradeço à CAPES pelo apoio financeiro.

Nenhum cidadão tem o direito de ser um amador em matéria de treinamento físico. Que desgraça é para o homem envelhecer sem nunca ver a beleza e a força do que o seu corpo é capaz.

(Sócrates)

RESUMO

EFEITOS DE INTERAÇÕES DE TERCEIROS VIZINHOS SOBRE A CRITICALIDADE DO MODELO DE ISING QUÂNTICO NA REDE QUADRADA FRUSTRADA

AUTOR: Matheus Roos de Oliveira

ORIENTADOR: Mateus Schmidt

No presente trabalho, investigamos as transições de fase do modelo de Ising com interações entre primeiros (J_1), segundos (J_2) e terceiros (J_3) vizinhos na rede quadrada com campo magnético transverso. Neste estudo, adotamos interações antiferromagnéticas entre primeiros e segundos vizinhos e consideramos os casos com J_3 ferromagnético e antiferromagnético. A descrição das transições de fase clássicas e quânticas do modelo foi realizada adotando a teoria de campo médio com clusters em uma aproximação com 4 sítios. Como resultado, identificamos que interações entre terceiros vizinhos intensas o suficiente levam ao desaparecimento da tricriticalidade na fronteira entre as fases superantiferromagnética (SAF) e paramagnética (PM). Em particular, a tricriticalidade é mais sensível à presença de interações ferromagnéticas, desaparecendo para $|J_3| < 0.3|J_1|$ na ausência de campo transverso. Na presença de interações entre terceiros vizinhos antiferromagnéticas, encontramos transições de primeira ordem entre a fase degenerada *staggered dimer* e a fase PM. Além disso, encontramos uma mudança na natureza das transições de fase SAF-PM introduzida por flutuações quânticas. Este fenômeno, chamado de *quantum annealed criticality* (QAC), consiste em transições de fase clássicas de primeira ordem que passam a ser de segunda ordem na presença de um campo transverso forte o suficiente. Nossos resultados permitem estabelecer um espectro de parâmetros J_2 e J_3 para os quais é possível encontrar o fenômeno QAC. A análise da criticalidade do modelo permite concluir que uma interação J_3 forte o suficiente elimina o fenômeno QAC. Portanto, nossos resultados sugerem que tentativas de realizar experimentalmente o fenômeno QAC em um sistema com estrutura de rede quadrada devem evitar interações fortes entre terceiros vizinhos, especialmente se estas interações forem ferromagnéticas.

Palavras-chave: Modelo de Ising quântico. *Quantum annealed criticality*. Frustração

ABSTRACT

EFFECTS OF THIRD-NEIGHBOUR INTERACTIONS ON THE CRITICALITY OF THE QUANTUM ISING MODEL ON THE FRUSTRATED SQUARE LATTICE

AUTHOR: Matheus Roos de Oliveira

ADVISOR: Mateus Schmidt

In the present work, we investigate the phase transitions of the Ising model with interactions between first (J_1), second (J_2) and third (J_3) neighbours in the square lattice with transverse magnetic field. In this study, we adopt antiferromagnetic interactions between first and second neighbours and consider third-neighbours interactions to be both ferromagnetic and antiferromagnetic. The description of the classical and quantum phase transitions of the model is carried out by adopting the cluster mean-field approximation with four sites. As a result, we identified that strong enough third-neighbor interactions lead to the disappearance of tricriticality at the boundary between the superantiferromagnetic (SAF) and paramagnetic (PM) phases. In particular, tricriticality is more sensitive to the presence of ferromagnetic interactions, disappearing for $|J_3| < 0.3|J_1|$ in the absence of transverse field. In the presence of antiferromagnetic J_3 , we find first-order transitions between the degenerate staggered dimer phase and the PM phase. Furthermore, we find a change in the nature of the SAF-PM phase transitions introduced by quantum fluctuations. This phenomenon, called quantum annealed criticality (QAC), consists of classical first-order phase transitions that become second-order phase transitions in the presence of a strong enough transverse field. Our results allow establishing a range of parameters J_2 and J_3 for which it is possible to find QAC. The analysis of the model criticality allows concluding that a strong enough J_3 interaction eliminates the QAC phenomenon. Therefore, our results suggest that attempts to realize QAC in a square lattice system should avoid strong interactions between third neighbors, mainly if these interactions are ferromagnetic.

Keywords: Quantum Ising model. *Quantum annealed criticality*. Frustration

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Configurações de <i>spins</i> para a fase antiferromagnética (AF), com a descrição simplificada das interações entre segundos e terceiros vizinhos ..	17
Figura 2.2 – Configurações de <i>spins</i> para a fase superantiferromagnética (SAF).	19
Figura 2.3 – Configurações de <i>spins</i> para a fase <i>staggered dimer</i> (SD).	20
Figura 2.4 – Configurações de <i>spins</i> para a fase SD por uma inversão global de <i>spins</i> da Fig. 2.3.	21
Figura 2.5 – Região de criticalidade quântica.	23
Figura 2.6 – Classificação das transições de fase.	24
Figura 2.7 – Comportamento do parâmetro de ordem para transições de primeira e de segunda ordem.	25
Figura 2.8 – Ilustração do modelo e método.	28
Figura 2.9 – Possibilidades na escolha de um cluster para a fase SD.	31
Figura 3.1 – Diagrama de fases na ausência de campo transversal para o estado fundamental.	35
Figura 3.2 – Diagramas de fases clássicos.	37
Figura 3.3 – Saltos do parâmetro de ordem nas fases SD e SAF	39
Figura 3.4 – Esquematização do procedimento na obtenção dos saltos da magnetização nas transições de primeira ordem.	40
Figura 3.5 – Diagramas de fases quânticos para o estado fundamental.	41
Figura 3.6 – Diagramas de fases com flutuações térmicas e quânticas, com $J_3/J_1 = -0.05$ (painéis superiores) e $J_3/J_1 = 0.05$ (painéis inferiores).	44
Figura 3.7 – Diagramas de fases com flutuações térmicas e quânticas, com $J_3/J_1 = -0.10$ (painéis superiores) e $J_3/J_1 = 0.10$ (painéis inferiores).	45
Figura 3.8 – Diagramas de fases com flutuações térmicas e quânticas, com $J_3/J_1 = -0.20$ (painéis superiores) e $J_3/J_1 = 0.20$ (painéis inferiores).	47
Figura 3.9 – Deslocamento do ponto tricrítico para os casos quântico (círculos) e clássico (quadrados).	48
Figura 3.10 – Diagramas de fases da temperatura pelo campo transversal para a interação entre terceiros vizinhos antiferromagnética e ferromagnética	49
Figura D.1 – Fluxograma do algoritmo da auto-consistência.	61
Figura D.2 – Fixação da simetria nas suposições da magnetização no processo iterativo.	63

LISTA DE SIGLAS

<i>AF</i>	Antiferromagnética
<i>CMF</i>	Cluster mean-field
<i>MC</i>	Monte Carlo
<i>PM</i>	Paramagnética
<i>PCQ</i>	Ponto crítico quântico
<i>QAC</i>	<i>Quantum annealed criticality</i>
<i>SAF</i>	Superantiferromagnética
<i>SD</i>	<i>Staggered dimer</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

J_1	Interação entre os primeiros vizinhos
J_2	Interação entre os segundos vizinhos
J_3	Interação entre os terceiros vizinhos
h	Campo magnético transversal
\mathcal{H}_{intra}	Hamiltoniana intracluster
\mathcal{H}_{inter}	Hamiltoniana intercluster
\mathcal{H}_{CMF}	Hamiltoniana proveniente do método de campo médio com clusters
m_i	Magnetização do i -ésimo sítio
Δm_{SAF}	Diferença entre o parâmetro de ordem (magnetização) das fases SAF e PM
Δm_{SD}	Diferença entre o parâmetro de ordem das fases SD e PM
n_s	Número de sítios do cluster
n_c	Número de configurações acessíveis

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
2	TEORIA	16
2.1	MODELO E FASES MAGNÉTICAS	16
2.2	TRANSIÇÕES DE FASE	22
2.3	TEORIA DE CAMPO MÉDIO COM CLUSTERS	25
2.3.1	Particularidades da fase SD	30
2.3.2	Implementação do problema numérico	32
3	RESULTADOS	35
3.1	TRANSIÇÕES DE FASES CLÁSSICAS	36
3.2	TRANSIÇÕES DE FASE QUÂNTICAS	41
3.3	EFEITOS QUÂNTICOS SOBRE TRANSIÇÕES DE FASES CLÁSSICAS.....	43
3.3.1	Diagramas de fases	43
3.3.2	Quantum Annealed Criticality	47
4	CONCLUSÃO	50
	REFERÊNCIAS	52
	APÊNDICE A – CONVENÇÕES	55
	APÊNDICE B – ÁLGEBRA LINEAR	56
	APÊNDICE C – VERIFICAÇÕES	58
	APÊNDICE D – ALGORITMO	61
	APÊNDICE E – BIBLIOTECA LAPACK	64

1 INTRODUÇÃO

Desde tempos imemoriais, a humanidade busca compreender a natureza e qual é o seu lugar no mundo. Inúmeros estudiosos debruçaram-se sobre questionamentos subjacentes a esta busca, construindo assim gradativamente o conhecimento humano. A física é uma das áreas de conhecimento mais novas, quando comparada à filosofia, por exemplo. Mesmo assim, ela foi capaz de produzir resultados formidáveis, tendo a matemática como sua grande aliada neste sucesso.

Ao longo da evolução da física, determinados assuntos estavam em pauta em diferentes períodos. No início do século XX, ocorreu o desenvolvimento da mecânica quântica, desencadeado pelo desejo em compreender os mecanismos por trás de diversos resultados experimentais que estavam em desacordo com a física clássica. Na mesma época, grandes esforços foram direcionados ao estudo das propriedades magnéticas dos materiais, que vinham despertando grande interesse da comunidade científica. Em particular, grande atenção foi dedicada ao estudo das transições de fases magnéticas. Para melhor entender a riqueza fenomenológica encontrada em materiais magnéticos, tornou-se necessária a construção de uma teoria microscópica das transições de fase (SALINAS, 2005).

As transições de fase são um aspecto central na fenomenologia de materiais magnéticos, pois após uma transição de fase teremos uma mudança qualitativa nas propriedades magnéticas do sistema. Nas vizinhanças de uma transição de fase, diversas quantidades termodinâmicas apresentam uma divergência assintótica, caracterizadas por expoentes críticos (SALINAS, 2005). Estes expoentes permitem classificar diferentes sistemas de muitos corpos interagentes em classes de universalidade. A existência de classes de universalidade decorre do fato de que próximo de uma transição de fase, os detalhes microscópicos do sistema são em geral, irrelevantes. Outro aspecto relevante diz respeito à natureza das transições de fase. De acordo com a classificação de Ehrenfest (CALLEN, 1998), transições de primeira ordem (também chamadas de descontínuas) exibem uma descontinuidade nas primeiras derivadas da energia livre (como a entropia e o parâmetro de ordem). Além disso, transições de segunda ordem (também chamadas de contínuas), exibem as primeiras derivadas da energia livre contínuas, enquanto as derivadas de segunda ordem (como o calor específico) são descontínuas.

Para investigar as transições de fase de sistemas microscópicos, é desejável que o modelo utilizado seja simples e permita incorporar as interações de curto alcance em uma rede (SALINAS, 2005). Isso se faz necessário, pois diversos sistemas físico-químicos podem ser descritos através de uma rede de moléculas com interações entre as moléculas mais próximas (primeiros vizinhos). Em 1920, buscando descrever o ferromagnetismo, Wilhelm Lenz sugeriu um modelo que satisfaz estas condições (BRUSH, 1967), sendo re-

solvido exatamente em uma dimensão por Ernst Ising em 1925. Este modelo, amplamente conhecido na literatura como modelo de Ising, incorpora a interação entre variáveis binárias ($\sigma = \pm 1$) e não apresenta ordem ferromagnética em temperatura finita para o caso unidimensional. Em 1944, um grande resultado matemático foi obtido por Lars Onsager ao resolver o modelo de Ising em duas dimensões no que é considerado um dos resultados mais importantes para a teoria moderna das transições de fase. Onsager obteve a expressão analítica exata para a função de partição de uma rede quadrada com *spins* de Ising nos vértices e interações apenas entre primeiros vizinhos. No caso bidimensional, o modelo apresenta uma transição entre as fases ferromagnética e paramagnética em uma temperatura finita, permitindo a descrição do ferromagnetismo.

Nas últimas seis décadas, extensos estudos foram desenvolvidos para investigar as propriedades termodinâmicas de sistemas clássicos de muitos corpos com interações competitivas (SUZUKI; INOUE; CHAKRABARTI, 2013). Diversas novas propriedades provenientes das várias fases termodinâmicas de sistemas competitivos e frustrados foram investigados, especialmente nas últimas três décadas. O modelo de Ising é o mais expressivamente utilizado nestes estudos. A justificativa experimental desta construção se baseia no fato de que muitos materiais apresentam, em um regime de temperatura muito baixa, uma redução nos graus de liberdade magnético de seus átomos, de tal forma que o *spin* de um átomo escolherá um eixo preferencial (VOJTA, 2003). Desde então, o modelo de Ising vem exercendo um papel fundamental no estudo não só de sistemas da matéria condensada (KAIRYS et al., 2020; EJIMA et al., 2016; BABUJIAN; KAROWSKI; TSVELIK, 2016), mas também de outras áreas da ciência, como na biologia (SAHIMI; STAUFFER, 1993). As variáveis de *spin* do modelo de Ising podem ser interpretadas de diversas maneiras. Isso é possível pela capacidade do modelo em captar aspectos essenciais do comportamento crítico a partir da simplicidade do comportamento de variáveis binárias.

No entanto, a solução exata para sistemas que considerem interações entre vizinhos mais distantes constitui um problema desafiador. Por exemplo, a rede quadrada com interações entre primeiros (J_1) e segundos (J_2) vizinhos, que é uma extensão natural do modelo resolvido por Onsager, não possui solução analítica conhecida. Diante disso, diversas abordagens aproximativas foram empregadas no estudo do modelo, tais como as simulações de Monte Carlo (MC), a técnica de campo médio com clusters, matriz de transferência (JIN et al., 2013), teoria de campo efetivo (BOBÁK et al., 2015; ANJOS; VIANA; SOUSA, 2008), método variacional com clusters (MORÁN-LÓPEZ; AGUILERA-GRANJA; SANCHEZ, 1993), dentre outras.

Contudo, apesar de inúmeros estudos da rede quadrada do modelo de Ising J_1 - J_2 , a tricriticalidade deste modelo foi motivo de debate por décadas. O principal objeto de debate consiste na estimativa da coordenada de acoplamento ($g \equiv J_2/J_1$) do ponto tricrítico (g^*). Um dos principais motivos deste debate está associado a uma transição de primeira ordem falsa, que não havia sido identificada nas primeiras simulações de MC

realizadas para o modelo (JIN; SEN; SANDVIK, 2012). Devido a capacidade computacional limitada em décadas passadas, simulações com um número mais elevado de sítios não podiam ser realizadas, o que impedia a análise de escala necessária para identificar a real natureza das transições de fase do modelo. Esta controvérsia foi resolvida no início da década passada por Jin, Sen e Sandvik (2012), ao realizar simulações de MC em sistemas grandes. Estes resultados de MC combinados com argumentos de universalidade permitiram obter a estimativa do ponto tricrítico como sendo¹ $g^* = 0.67 \pm 0.01$.

As flutuações quânticas (observadas em baixas temperaturas) possuem uma natureza distinta da sua contraparte térmica. No entanto, transições ordem-desordem podem ser introduzidas pelos dois tipos de flutuações. Recentemente, um grande interesse tem sido dirigido para os efeitos quânticos sobre fases magnéticas (VOJTA, 2003). Tais efeitos podem ser introduzidos no modelo de Ising através da incorporação de um campo magnético transversal. Este campo magnético consiste em um parâmetro de controle externo que permite ajustar o nível de flutuações quânticas no sistema. De fato, o estudo do modelo de Ising com campo transversal vêm sendo realizado desde 1960 (SUZUKI; INOUE; CHAKRABARTI, 2013), revelando um grande número de fenômenos interessantes.

As transições de fase de primeira ordem em sistemas com flutuações quânticas e temperatura próxima de zero vem despertando grande interesse recentemente (BELITZ; KIRKPATRICK; VOJTA, 1999; KIRKPATRICK; BELITZ, 2012). Alguns destes sistemas apresentam transições de primeira ordem em temperatura finita, mas à medida que a temperatura é reduzida, as flutuações quânticas reduzem as suas contrapartes clássicas e conduzem para uma transição de segunda ordem. Este fenômeno é denominado de *quantum annealed criticality* (QAC) e sua descrição fundamental foi realizada no contexto de ferroelétricos por Chandra et al. (2020). A motivação desta descrição tem origem na observação deste fenômeno em materiais compressíveis, magnéticos e ferroelétricos. Desta forma, investigações que permitam compreender os mecanismos subjacentes ao fenômeno QAC são particularmente importantes (CHANDRA et al., 2020).

Em estudos recentes, o modelo de Ising J_1 - J_2 com campo transversal em uma rede quadrada foi investigado através da teoria de campo médio com clusters (KELLERMANN; SCHMIDT; ZIMMER, 2019). Neste trabalho, Kellermann, Schmidt e Zimmer (2019) encontraram alguns resultados interessantes, tais como o fenômeno *quantum annealed criticality* (QAC) e um acúmulo de entropia próximo do ponto crítico quântico. Em particular, os autores encontraram que o aumento do campo transversal pode transformar transições de primeira ordem (induzida por flutuações térmicas) em transições de segunda ordem em baixa temperatura (induzidas por flutuações quânticas). Este resultado foi confirmado por cálculos recentes de uma abordagem variacional com clusters (DOMÍNGUEZ; LOPETEGUI; MULET, 2021). Dessa forma, o estudo do efeito de flutuações quânticas no modelo

¹Adotamos neste trabalho o uso do ponto como separador decimal, em detrimento ao uso convencional da vírgula. Os motivos desta mudança estão no apêndice A.

de Ising na rede quadrada frustrada tem papel importante na compreensão das transições de fase quânticas, especialmente no que diz respeito ao fenômeno QAC. Uma questão relevante é como outras interações no modelo J_1 - J_2 podem afetar este fenômeno.

Apesar do modelo de Ising na rede quadrada ser um modelo bastante conhecido, há poucos trabalhos na literatura que incluam a interação entre terceiros vizinhos (J_3) (LANDAU; BINDER, 1985; LIU et al., 2016; HU; CHARBONNEAU, 2021; SUBERT; MULDER, 2022). Estudos recentes de Monte Carlo sugerem que a presença de interações entre terceiros vizinhos antiferromagnéticas leva ao deslocamento do ponto tricrítico para valores maiores de J_2/J_1 . Além disso, uma fase ordenada adicional, chamada de *staggered dimer* pode ser encontrada em baixas temperaturas na presença de interações J_3 antiferromagnéticas moderadas (LIU et al., 2016). Sendo assim, uma questão pertinente, diz respeito ao efeito da interação J_3 sobre o fenômeno QAC nesta rede. Contudo, desconhecemos trabalhos com a aplicação de um campo transversal, ou seja, que investigue os efeitos quânticos sobre o modelo de Ising J_1 - J_2 - J_3 . Portanto, investigaremos no presente trabalho o efeito de um campo transversal sobre as transições de fase no modelo de Ising com interações até terceiros vizinhos. Nosso objetivo geral é investigar o efeito de flutuações quânticas sobre a natureza das transições de fase quando a interação J_3 está presente.

Para realizar este estudo, adotaremos o método de campo médio com clusters. Esta técnica tem sido aplicada no estudo de diversos modelos de *spins* interagentes na presença de frustração e flutuações quânticas (YAMAMOTO; MARMORINI; DANSHITA, 2015; YAMAMOTO et al., 2020; YAMAMOTO et al., 2019; LIU et al., 2019), permitindo a obtenção de diagramas de fases e quantidades termodinâmicas com boa precisão, tanto em comparação com dados experimentais quanto com outras técnicas. Além disso, a técnica possibilita a descrição da natureza das transições de fase com base no comportamento da energia livre, ou seja, de maneira direta. Outro aspecto determinante na escolha desta metodologia para o presente estudo é a sua capacidade de localizar com boa precisão o ponto tricrítico no modelo de Ising J_1 - J_2 na rede quadrada. Em particular, (JIN et al., 2013) obtiveram $g^* \approx 0.66$ utilizando um cluster de quatro sítios nesta aproximação. Portanto, a técnica fornece um ponto de partida para a inclusão de interações J_3 . Além disso, este formalismo permite a inclusão de flutuações quânticas através da diagonalização exata, tornando viável a sua aplicação para o modelo de Ising com campo transversal (KELLERMANN; SCHMIDT; ZIMMER, 2019). Desta forma, a teoria de campo médio com clusters consiste em uma metodologia que permite incorporar efeitos de frustração, flutuações quânticas e térmicas com baixo custo computacional associado.

Dividimos o trabalho da seguinte forma: no capítulo 2, apresentamos a metodologia utilizada em nosso trabalho. Na seção 2.1, definimos o modelo e estabelecemos as fases que serão estudadas. Na seção seguinte, discutimos as transições de fases clássicas e quânticas. Encerramos o capítulo apresentando o método aproximativo de campo médio com clusters, o qual foi utilizado nesta investigação. No capítulo 3, apresentamos

os resultados obtidos. Nesse capítulo, iniciamos explorando o caso clássico (sem campo transversal) na presença de interações entre terceiros vizinhos e discutindo diagramas do estado fundamental e na presença de flutuações térmicas. Passamos então para o caso quântico (com campo transversal) na ausência de flutuações térmicas na seção 3.2. Na seção 3.3, apresentamos diagramas clássicos na presença de flutuações quânticas e o fenômeno QAC. No capítulo 4, encerramos apresentando a conclusão do trabalho.

2 TEORIA

O objetivo deste trabalho é investigar as transições de fase no modelo de Ising com interações até terceiros vizinhos em uma rede quadrada bidimensional e os fenômenos induzidos por flutuações quânticas, introduzidas através de um campo magnético transversal.

Neste capítulo, discutiremos a abordagem utilizada no estudo das transições de fase para o modelo em questão. Começamos apresentando em detalhes as três fases ordenadas que foram encontradas em nossa investigação, finalizamos a seção fazendo uma breve revisão dos cálculos em mecânica estatística. Na sequência, falamos sobre as transições de fases clássica e quântica. Na seção 2.3 estabelecemos a abordagem utilizada no presente investigação: a teoria de campo médio com cluster¹. Finalizamos a seção discutindo alguns detalhes exclusivos da fase staggered dimer (SD) e a implementação numérica do método.

2.1 MODELO E FASES MAGNÉTICAS

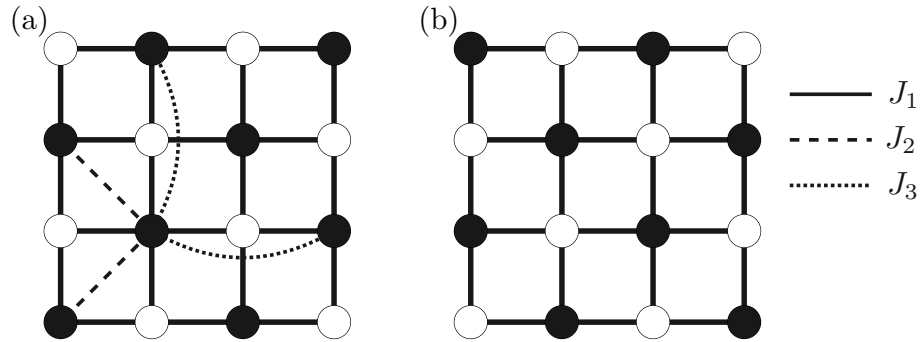
Em um sistema termodinâmico, um conjunto de parâmetros definem a fase em que o sistema se encontra. Um exemplo de parâmetro relevante em sistemas magnéticos são as interações entre os *momenta* magnéticos intrínsecos do sistema. Neste contexto, há um número grande de tipos de interações, mas as que permitem descrever de forma mais simples os comportamentos ferromagnético e antiferromagnético são as interações de troca entre pares de *spins*. Estas interações podem, portanto, ser ferromagnética (favorecendo *spins* alinhados) e antiferromagnética (favorecendo *spins* anti-alinhados). Estas interações podem acoplar pares de primeiros vizinhos, mas também podem ocorrer entre pares de vizinhos mais distantes, como segundos e terceiros vizinhos (LIU et al., 2016).

Se considerarmos que, em uma rede quadrada, todas as interações antiferromagnéticas entre primeiros vizinhos são satisfeitas, então os segundos vizinhos estão alinhados ferromagneticamente, como pode ser observado na Fig. 2.1. Ou seja, a presença de interações antiferromagnéticas entre segundos vizinhos introduz uma situação conflitante, em que não é possível satisfazer todas as interações simultaneamente. Sistemas em que esse tipo de situação conflitante ocorre são chamados de sistemas frustrados. Portanto, podemos definir frustração como a incapacidade do sistema em satisfazer todas as interações simultaneamente. A frustração pode ser desencadeada por características geométricas, mas também pode ser introduzida pela competição entre interações. No presente estudo, trabalharemos com o segundo caso. A frustração tem como consequência a introdução de determinados fenômenos, como a redução da temperatura de ordenamento,

¹Campo médio com cluster é a tradução do termo original em inglês "*cluster mean field*".

a presença de entropia finita no estado fundamental, dentre outros (KANÔ; NAYA, 1953).

Figura 2.1 – Configurações de *spins* para a fase antiferromagnética (AF), com a descrição simplificada das interações entre segundos e terceiros vizinhos



Fonte: Elaborado pelo autor.

O modelo que utilizaremos para investigar as transições de fases clássicas e quânticas de um sistema de *spins* interagentes é o modelo de Ising com campo transversal. A hamiltoniana para o modelo de Ising pode ser expressa através da seguinte equação:

$$\mathcal{H}_{Ising} = \sum_{i,j}^N J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z \quad . \quad (2.1)$$

Nesta notação, J_{ij} é o termo de acoplamento entre os *spins*, com J_1 , J_2 e J_3 representando a interação entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos, respectivamente. Adotamos $J_{ij} > 0$ como correspondente à interação antiferromagnética, enquanto $J_{ij} < 0$ à ferromagnética. O somatório se estende até o N-ésimo sítio da rede, σ_i^z é a componente z do *spin* correspondente ao i -ésimo sítio, representada através do formalismo das matrizes de Pauli, conforme Eq. (B.1) do apêndice B, que contém os detalhes referentes a álgebra linear. O campo magnético transversal entra no modelo através do termo

$$\mathcal{H}' = -h \sum_{i=1}^N \sigma_i^x \quad , \quad (2.2)$$

onde h é o termo de acoplamento do campo magnético externo, a soma se estende até o N-ésimo sítio da rede e σ_i^x corresponde a componente x do *spin*. A soma das Eq. (2.1) e Eq. (2.2) define o modelo de Ising com campo transversal

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - h \sum_i \sigma_i^x \quad . \quad (2.3)$$

A seguir, vamos discutir os resultados na ausência de campo magnético, ou seja,

para $h = 0$. A Fig. 2.1 mostra as duas possíveis configurações de *spins* em uma rede quadrada para a fase denominada como antiferromagnética (AF). As linhas sólidas, tracejadas e pontilhadas representam de forma simplificada, as interações entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos, respectivamente. Os círculos indicam os sítios da rede. Em cada sítio há um *spin* de Ising, cujos valores podem ser ± 1 , representados pelos círculos sólidos ($\sigma_i > 0$ e vazados ($\sigma_i < 0$). Esta convenção será utilizada nas demais figuras desta seção, que mostram as possíveis configurações de *spin* para as diferentes fases ordenadas. Além disso, delimitamos J_1 e J_2 como antiferromagnética em todos os cenários. Também restringimos a interação de terceiros vizinhos à $|J_3| < 0.5$, podendo ser antiferromagnética ou ferromagnética.

Nesta figura, todas as interações J_1 antiferromagnéticas são satisfeitas, mas é possível observar que nenhuma interação J_2 e J_3 antiferromagnética é satisfeita. No painel (a), exibimos uma das duas configurações para a fase AF. Esta fase é duplamente degenerada, isso quer dizer que existem duas configurações (painel (a) e (b) da Fig. 2.1) possíveis com a mesma energia. O painel (b) é obtido através de uma **inversão global de spins** do painel (a). Uma outra forma de enxergar esta inversão global neste caso, é notar que se trasladarmos a rede do painel (a) por um espaçamento de rede (tanto na direção horizontal como na vertical), teremos a configuração apresentada no painel (b). Esta rede é "invariante" por qualquer rotação de $1/4$ de período, ou seja, se rodarmos a figura (a) 90° , uma ou mais vezes, teremos a mesma configuração. A energia por sítio, no estado fundamental (na ausência de flutuações térmica) e na ausência de campo transversal (flutuações quânticas), para a fase AF pode ser obtida mediante a Eq. (2.1). Ao computar todas as interações de um único sítio com seus vizinhos, cada interação entre *spins* anti-alinhados contribuirá com um fator $-J_{ij}/2$ para a energia interna por sítio. Enquanto que a interação entre *spins* alinhados contribuirá com um fator $+J_{ij}/2$. Somando todas as contribuições, obtemos a energia interna por sítio para a fase AF:

$$U_{AF} = -2J_1 + 2J_2 + 2J_3 \quad . \quad (2.4)$$

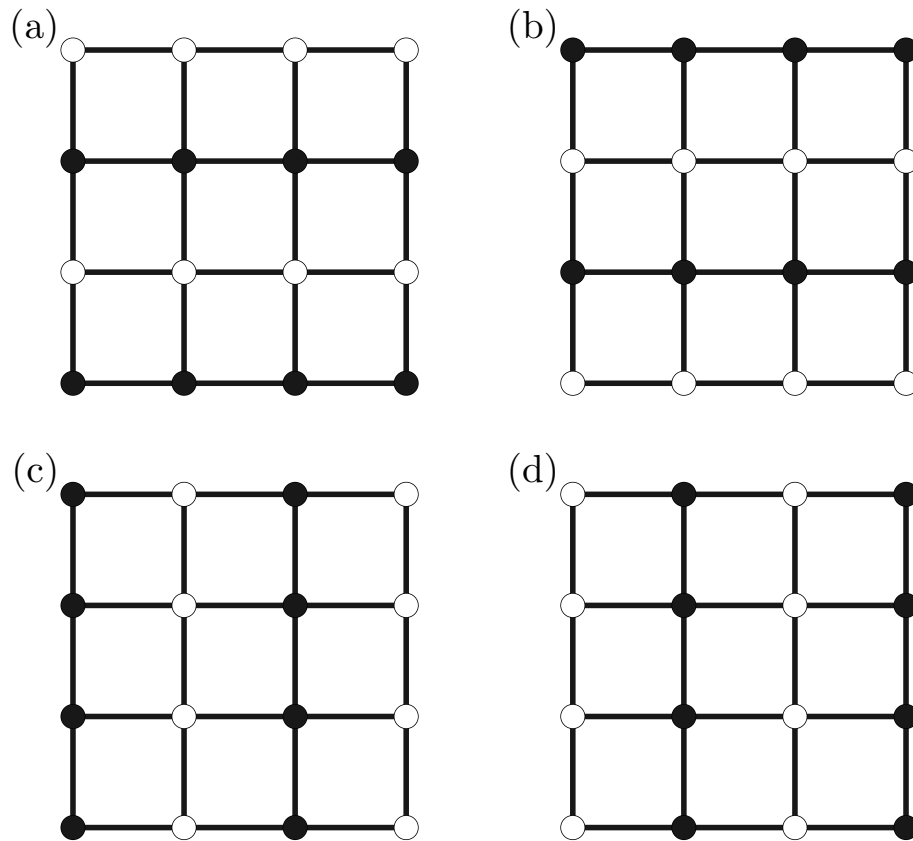
Uma outra fase que pode ser encontrada neste modelo é a superantiferromagnética (SAF). Nesta fase, todas as interações antiferromagnéticas entre segundos vizinhos J_2 são satisfeitas, como podemos ver na Fig. 2.2. A energia por *spin* no estado fundamental para esta fase é

$$U_{SAF} = -2J_2 + 2J_3 \quad . \quad (2.5)$$

Nesta fase, as interações entre primeiros vizinhos são parcialmente satisfeita e apresenta degenerescência quatro. Podemos visualizar estas possibilidades na Fig. 2.2. O painel (a) exhibe uma configuração de listras horizontais. Se rodarmos a figura do painel (a) por 90 graus, teremos o painel (c). Se, no painel (a) realizarmos uma translação na direção horizontal, por qualquer um ou mais espaçamentos de rede, teremos a mesma

configuração, ou seja, esta fase é invariante por translações horizontais. No entanto, se transladarmos na direção vertical por um espaçamento de rede, teremos um outro estado, mostrado no painel (b). O raciocínio é análogo aos painéis (c) e (d), com a diferença de estarem relacionados por uma translação horizontal.

Figura 2.2 – Configurações de *spins* para a fase superantiferromagnética (SAF).

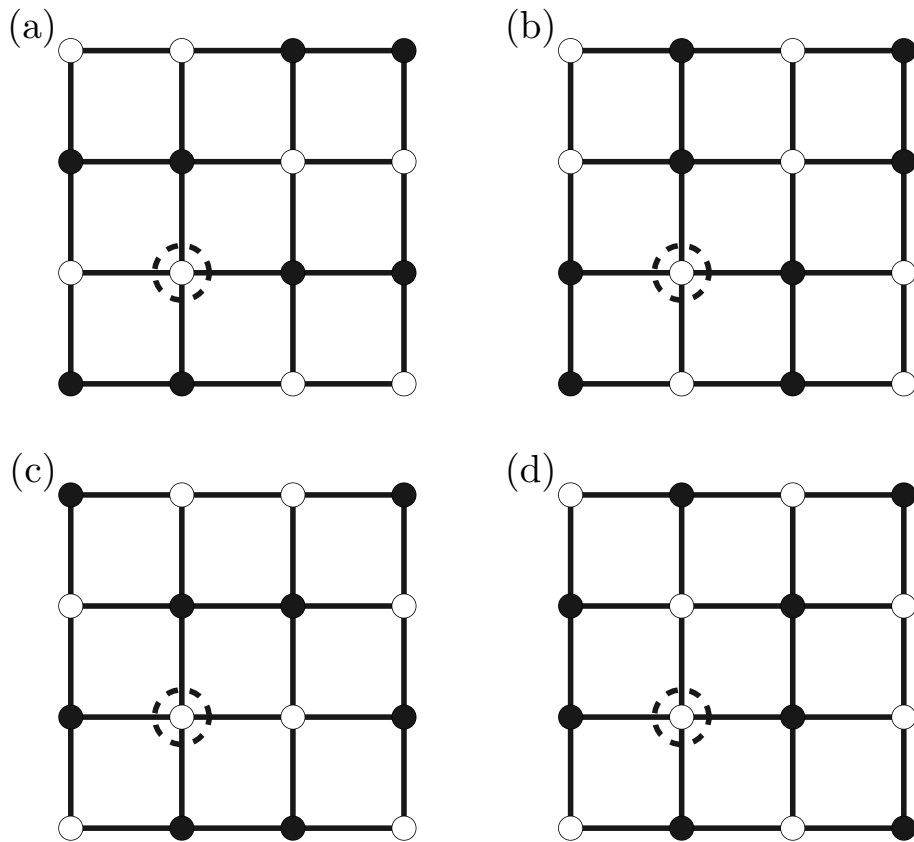


Fonte: Elaborado pelo autor.

A última fase ordenada que será abordada neste estudo é a SD. Esta fase é oito vezes degenerada, quatro destas possibilidades podem ser observadas na Fig. 2.3. O painel (a) exibe uma destas configurações. Se rodarmos por 90 graus a rede do painel (a) em torno do sítio marcado por um círculo tracejado, obtemos uma outra configuração. Como fizemos apenas uma rotação, a energia total será a mesma (esta configuração é mostrada no painel (b)). Por mais uma rotação de 90 graus, obtemos a configuração do painel (c), e de forma análoga, a do painel (d).

É possível notar nestes quatro painéis, que dos quatro primeiros vizinhos de um sítio, três deles sempre estarão anti-alinhados, enquanto que o outro estará alinhado. Isto

Figura 2.3 – Configurações de *spins* para a fase *staggered dimer* (SD).



também é manifestado na energia do estado fundamental por *spin* :

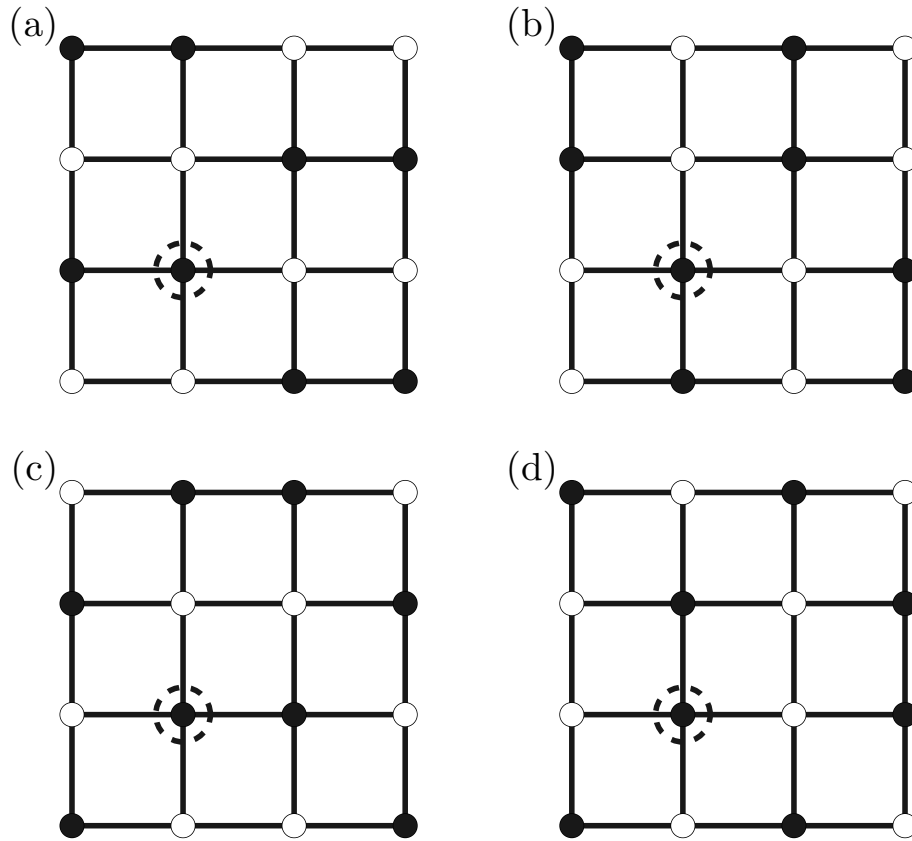
$$\begin{aligned}
 U_{SD} &= -3J_1 \frac{1}{2} + J_1 \frac{1}{2} \\
 &= -J_1 \quad .
 \end{aligned}
 \tag{2.6}$$

Por simplicidade, mostramos explicitamente apenas o cálculo dos primeiros vizinhos, pois a soma de todas as interações J_2 e J_3 resulta em uma contribuição nula para a energia. Ou seja, a energia do estado fundamental desta fase independe dos valores de J_2 e de J_3 , dependendo apenas da intensidade da interação entre os primeiros vizinhos.

Mas estas não são as únicas possibilidades disponíveis para a fase SD; se fizermos uma inversão global nas configurações da Fig. 2.3 obteremos as configurações exibidas na Fig. 2.4.

O painel (a) da Fig. 2.4 é obtido por uma translação vertical do painel (a) da Fig. 2.3. Porém, se transladarmos a Fig. 2.4 (a) na direção horizontal, a configuração encontrada será a da Fig. 2.4 (c). Este processo será análogo para todas as translações da Fig. 2.3, ou seja, para um painel, a translação em uma direção corresponderá a um outro painel da Fig. 2.4, enquanto que a translação noutra direção corresponderá a uma configuração que pode ser encontrada em um dos painéis da mesma Fig. 2.3.

Figura 2.4 – Configurações de *spins* para a fase SD por uma inversão global de *spins* da Fig. 2.3.



Fonte: Elaborado pelo autor.

É importante frisar que estas não são as únicas fases que podem ser encontradas no modelo de Ising J_1 - J_2 - J_3 . Quando a interação J_3 é dominante e antiferromagnética, surge uma outra fase antiferromagnética (LIU et al., 2016). Porém, esta fase não será abordada neste estudo, pois vamos dirigir nossa atenção para os efeitos de J_3 fraco sobre as transições de fase do modelo.

O primeiro passo para obter as propriedades termodinâmicas de um sistema é calcular a função de partição

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}} \quad , \quad (2.7)$$

com \mathcal{H} sendo a matriz hamiltoniana de dimensão $2^N \times 2^N$, onde N é o número de sítios, com autovalores λ_i e autovetores associados $|v_i\rangle$ correspondentes às i -ésimas configurações acessíveis ao sistema. A partir da função de partição, podemos fazer a conexão com a termodinâmica através da energia livre

$$f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{k_B T}{N} \ln Z \quad , \quad (2.8)$$

com k_B sendo a constante de Boltzmann² e T a temperatura. Então, desde que o limite da Eq. (2.8) exista, podemos obter as quantidades termodinâmicas desejadas. Então munidos da função de partição, podemos obter o valor médio de um observável físico qualquer O , calculando

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} O e^{-\beta \mathcal{H}} \quad . \quad (2.9)$$

No entanto, o campo transversal introduz termos fora da diagonal principal da hamiltoniana, portanto devemos diagonalizar a hamiltoniana antes de obter qualquer valor médio.

2.2 TRANSIÇÕES DE FASE

As transições de fase desempenham um papel essencial na natureza, como exemplos cotidianos temos o caso da fervura ou o congelamento da água à $T = 273.15K$ à pressão de $1atm$. Mas também há casos mais complicados, como a transição de um metal para um estado supercondutor ao baixar a temperatura próxima do zero absoluto. Acredita-se inclusive, que o próprio universo passou por diversas transições de fase (VOJTA, 2003).

As transições de fase ocorrem mediante a variação de um parâmetro de controle. Estas transições possuem como característica comum a mudança qualitativa das propriedades de um sistema. Podemos ter transições induzidas pelo aumento da temperatura, levando ao desaparecimento de um estado ordenado. Mas uma atenção especial têm sido dirigida para transições que ocorrem próximas do zero absoluto, sendo acessadas através de parâmetros não térmicos, como a pressão, o campo magnético externo ou a composição química. Neste caso, a ordem é destruída apenas por flutuações quânticas (VOJTA, 2003).

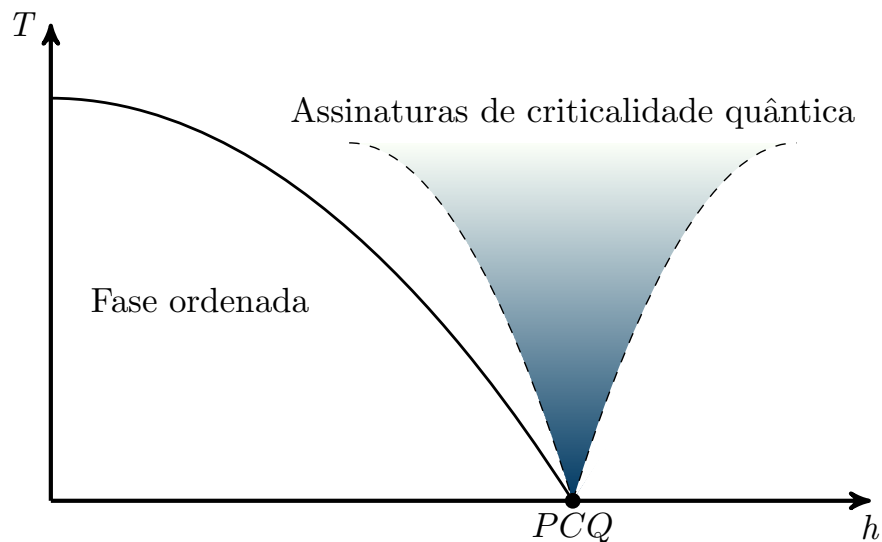
À primeira vista, podem parecer que tais transições de fase sejam relevantes apenas do ponto de vista teórico, em virtude da realização experimental. Contudo, diversos experimentos recentes vêm apontando o contrário, pois a presença destes pontos críticos quânticos (PCQ) estão sendo cruciais para resolver diversos problemas que até recentemente estavam em aberto. Como, por exemplo, os isolantes magnéticos de terras raras (BITKO; ROSENBAUM; AEPPLI, 1996) e os supercondutores de alta temperatura (SACHDEV, 2000). Apesar destes pontos críticos ocorrerem em temperatura zero, esta criticalidade têm associada a si uma região com assinaturas de criticalidade quântica em temperatura finita, portanto, acessível experimentalmente.

Na Fig. 2.5 apresentamos uma visualização esquemática de uma região com criticalidade quântica, associada a um ponto crítico quântico. Com T sendo a temperatura do sistema e h representando a intensidade do campo transversal aplicado, portanto, a

²Por simplicidade, vamos assumir a constante de Boltzmann como igual a um.

intensidade das flutuações de natureza quântica. A linha sólida denota uma transição de fase clássica (movida por flutuações térmicas). As linhas tracejadas delimitam a região onde podem ser encontradas assinaturas de criticalidade quântica, o gradiente de cor indica uma presença mais forte dessas assinaturas quanto mais próximas do ponto crítico quântico (PCQ).

Figura 2.5 – Região de criticalidade quântica.



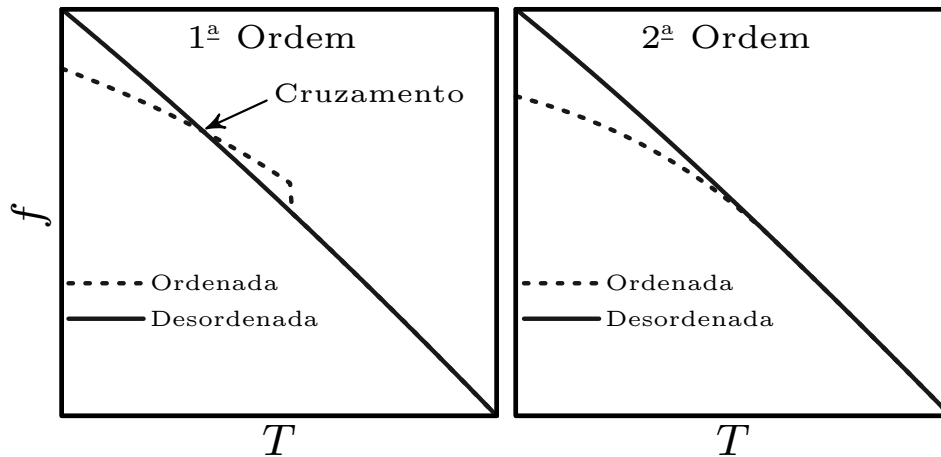
Fonte: Elaborado pelo autor inspirada em (VOJTA, 2003).

As transições de fase são tradicionalmente classificadas em duas classes: primeira e segunda ordem. Nas transições de primeira ordem (transições descontínuas), os dois estados coexistem na temperatura de transição, como a água em sua forma líquida e sólida (gelo). Já nas transições de segunda ordem (transição contínua) não temos a coexistência das fases na transição. Este tipo de transição ocorre, por exemplo, com o ferro (Fe) à $1043K$ (ARAJ; COLVIN, 1964), no qual o *momentum* magnético do material anula-se. Esta transição ocorre em um ponto onde as flutuações térmicas destroem o ordenamento regular dos *momenta* magnéticos (VOJTA, 2003). Esta classificação foi proposta por Ehrenfest (JAEGER, 1998), ela leva em conta a descontinuidade da derivada da energia livre em relação a alguma variável termodinâmica, como a temperatura. Mais precisamente, o termo primeira ordem refere-se a transições em que a primeira derivada da energia livre é descontínua, já na transição de segunda ordem, esta derivada é contínua em todos os pontos, mas a sua próxima derivada é descontínua.

Podemos entender graficamente esta classificação a partir da visualização esquemática da Fig. 2.6. No eixo vertical temos a energia livre de Helmholtz f , e no eixo horizontal a temperatura T . No painel da esquerda mostramos uma típica transição de primeira ordem entre uma fase ordenada (linha tracejada) e uma fase desordenada (linha sólida).

Nós podemos identificar visualmente o cruzamento das energias livres, conforme indicado, no painel da esquerda. Já no lado direito temos uma transição de segunda ordem, que se caracteriza visualmente por não ter um cruzamento entre as energias livres.

Figura 2.6 – Classificação das transições de fase.



Fonte: Elaborado pelo autor.

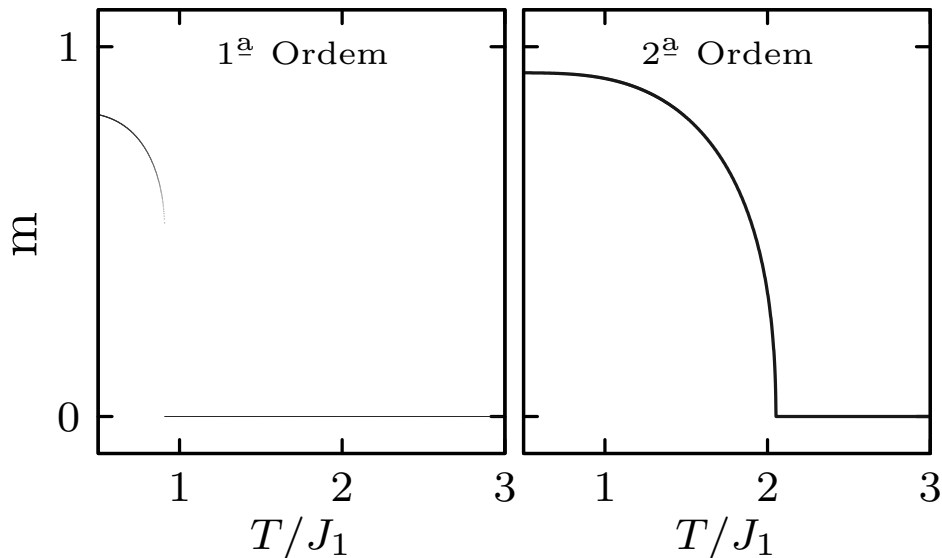
A derivada da energia livre em relação à temperatura, do gráfico da esquerda, não é contínua em todos os pontos, pois há um comportamento abrupto exatamente no ponto onde há o cruzamento das energias livres. Este comportamento ocorre, devido ao sistema sempre escolher a fase onde a energia livre é a menor. Desta forma, à esquerda do ponto de cruzamento a fase ordenada é dominante. Porém, com o incremento da temperatura, a fase desordenada passa a ser a dominante imediatamente após o ponto de cruzamento. Já na figura do lado direito, em que é ilustrado o comportamento da energia livre em uma transição de segunda ordem, a derivada da energia livre em relação à temperatura é contínua em todos os pontos. Neste caso não há nenhum comportamento abrupto, pelo contrário, as duas curvas para as energias livres são contínuas e suaves em todos os pontos.

As transições de segunda ordem podem ser caracterizadas através dos chamados **parâmetros de ordem**. Um parâmetro de ordem é uma variável termodinâmica (como a magnetização), que é zero numa fase (a paramagnética), enquanto na outra (ferromagnética) ela é não-nula. A escolha de tais parâmetros é frequentemente óbvia para uma transição ferromagnética, onde o parâmetro de ordem é a magnetização total (VOJTA, 2003), mas existem casos não triviais que ainda geram debates (MOTT, 1990).

Na Fig. 2.7 apresentamos uma visualização de como se comporta o parâmetro de ordem (magnetização) em uma transição ordem-desordem (SAF-PM), na ausência de campo transversal, para o caso em que a transição é de primeira ordem (figura da esquerda, com $J_2/J_1 = 0.6$) e de segunda ordem (figura da direita, com $J_2/J_1 = 0.8$). Os termos J_1 , J_2 e J_3 fazem referência ao termo de acoplamento no modelo de Ising para a

rede quadrada entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos, respectivamente. No eixo vertical temos o valor da magnetização m , que neste caso é zero para uma fase ordenada e não-nula para uma fase desordenada. Em ambos os casos foi utilizado $J_3/J_1 = 0.1$. Quando um sistema magnético encontra-se num regime de temperatura muito baixa, ele poderá estar numa fase ordenada, no qual o parâmetro de ordem é um valor $m \neq 0$. Mas com o incremento da temperatura, ou seja, com a inclusão de flutuações térmicas, o sistema passa por uma transição de fase levando-o para uma fase desordenada. O parâmetro de ordem em uma transição de fase de primeira ordem terá uma descontinuidade. Já na transição de segunda ordem não haverá descontinuidade, como podemos identificar visualmente nos dois painéis da figura.

Figura 2.7 – Comportamento do parâmetro de ordem para transições de primeira e de segunda ordem.



Fonte: Elaborado pelo autor.

2.3 TEORIA DE CAMPO MÉDIO COM CLUSTERS

O modelo de Ising para a rede quadrada apresenta solução analítica apenas para o caso em que $J_1 \neq 0$, $J_2 = J_3 = 0$ e na ausência de um campo externo (BRUSH, 1967). Portanto, para investigar os casos onde são consideradas interações mais distantes do que as de primeiros vizinhos e/ou, com a ação de um campo externo, devemos recorrer a uma abordagem aproximativa. Existem boas estratégias disponíveis, tais como as simulações de Monte Carlo e o método de campo médio (JIN et al., 2013).

As simulações de Monte Carlo (MC) são utilizadas há décadas em diversos ramos da ciência, fornecendo resultados satisfatórios para estimar a temperatura de transição. No entanto, é muito laborioso identificar com precisão a natureza das transições de fase utilizando esta técnica, principalmente quando próximas do ponto tricrítico (JIN et al., 2013). Também é importante ressaltar o alto custo computacional envolvido para localizar as transições com a precisão desejada. Além disso, a inclusão de flutuações quânticas em simulações requer o uso de métodos de Monte Carlo quântico, que podem apresentar o problema do sinal negativo quando o modelo apresenta frustração (HENELIUS; SANDVIK, 2000).

Por outro lado, a abordagem de campo médio possui um custo computacional muito menor que a técnica de MC. Aliado a isso, a determinação da natureza da transição de fase nesta abordagem é bem menos trabalhosa. Isso ocorre em virtude da possibilidade de trabalharmos diretamente com a energia livre (PLASCAK, 2018), uma vez que, diferentemente das simulações de MC, esta técnica pode ser derivada a partir de princípios variacionais (JIN et al., 2013). Porém, há a desvantagem dela superestimar a temperatura de ordenamento, o que ocorre devido ao método subestimar efeitos de flutuações térmicas. Uma maneira de contornar isso é considerar uma aproximação de campo médio com clusters, como representado na Fig. 2.8. Um cluster consiste em uma sub-rede, composta por alguns sítios, organizados de tal forma que imite a rede principal, ou em outras palavras, que consiga reproduzir um padrão de repetição adequado ao problema. Este rearranjo possibilitará captar melhor as flutuações térmicas do sistema, tornando assim os valores da temperatura de ordenamento mais precisos. Apesar dos resultados para a temperatura de ordenamento permanecerem sendo superestimados, o mesmo não ocorre para os valores das interações de troca J_{ij} na estimativa das transições do estado fundamental em sistemas Ising. Além disso, a técnica fornece uma ótima estimativa para a coordenada do acoplamento J_{ij} do ponto tricrítico no modelo de Ising frustrado na rede quadrada (JIN et al., 2013).

A escolha do formato e do número de sítios n_s que compõem um cluster é *a priori* livre. Porém, é adequado escolher clusters que permitam obter o ordenamento magnético das fases que serão estudadas. Portanto, para o nosso caso de uma rede quadrada, utilizaremos um cluster quadrado, de dimensão 2×2 .

É importante notar, que este problema também poderia ser tratado com um cluster de 16 sítios. Neste caso, os resultados obtidos seriam mais precisos, em termos da temperatura de ordenamento (JIN et al., 2013). No entanto, o custo computacional do problema cresce exponencialmente com o tamanho do cluster adotado. Portanto, adotamos um cluster de quatro sítios, que apresenta um custo computacional mais baixo e ainda assim, preserva características qualitativas importantes do diagrama de fases do modelo J_1 - J_2 (KELLERMANN; SCHMIDT; ZIMMER, 2019). A seguir, discutimos a implementação da teoria de campo médio com cluster no modelo de Ising J_1 - J_2 - J_3 com campo transversal.

Na teoria de campo médio com clusters, o sistema é dividido em clusters idênticos. As interações dentro dos clusters são tratadas exatamente e as interações entre clusters são tratadas através da aproximação de campo médio convencional. Portanto, aplicaremos esta abordagem na hamiltoniana da Eq. (2.1). Esta aproximação não afeta diretamente o formato da hamiltoniana \mathcal{H}' (que depende do campo externo), alterando apenas a quantidade de termos envolvidos no somatório da Eq. (2.2), que antes se estendia até o N -ésimo sítio da rede e passa agora a se estender até o número de sítios n_s do cluster. Nesta técnica, dividimos o termo de interação em duas partes,

$$\mathcal{H}_{Sing} \approx \mathcal{H}_{intra} + \mathcal{H}_{inter} \quad . \quad (2.10)$$

Na primeira parte, \mathcal{H}_{intra} , computamos apenas as interações dentro de um único cluster principal (*intracluster*) via diagonalização exata. Já na segunda parte, \mathcal{H}_{inter} , consideramos as interações entre o cluster principal e os clusters vizinhos a ele (*intercluster*) através da aproximação de campo médio

$$\sigma_i^z \sigma_j^z \approx \sigma_i^z m_j + m_i \sigma_j^z - m_i m_j \quad , \quad (2.11)$$

onde m_j é o valor médio da magnetização do j -ésimo sítio. Calculada através da equação

$$m_j = \langle \sigma_j^z \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \sigma_j^z e^{-\beta \mathcal{H}} \quad . \quad (2.12)$$

Conforme discutido acima, adotaremos o cluster de quatro sítios, apresentado na Fig. 2.8. Neste caso, podemos relacionar as magnetizações locais de um dado cluster com as magnetizações locais de clusters na vizinhança. Dessa forma, podemos reduzir o problema de muitos corpos a um problema de um único cluster. A hamiltoniana *intracluster* de um único cluster pode ser escrita na forma:

$$\mathcal{H}_{intra}^{CMF}(\sigma_i^z) = J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z + J_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z \quad . \quad (2.13)$$

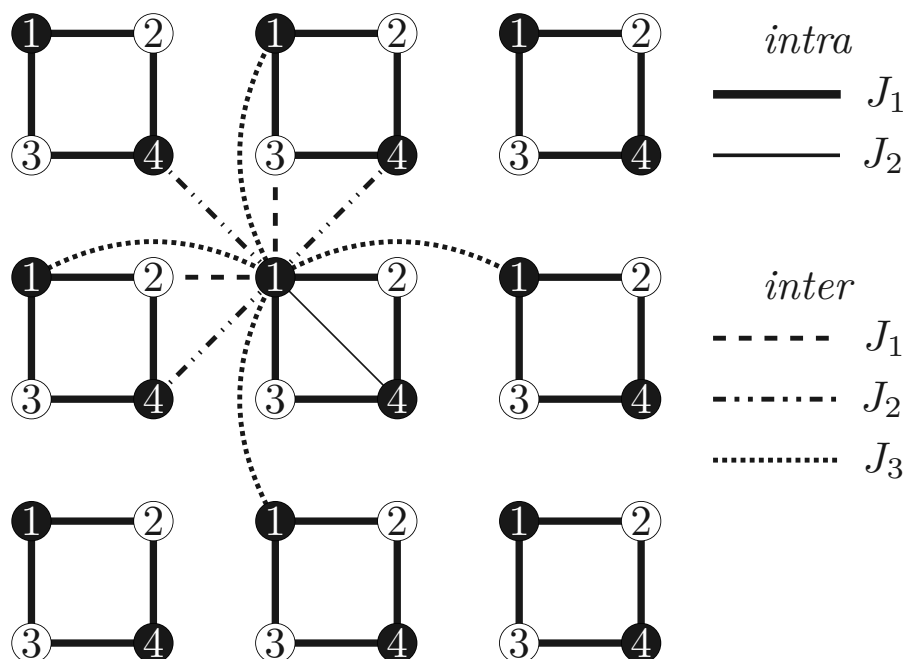
Nesta notação, $\langle ij \rangle$ denota a soma sobre pares de primeiros vizinhos e $\langle\langle ij \rangle\rangle$ denota uma soma sobre pares de segundos vizinhos, ambas realizadas sobre os quatro sítios do cluster. Podemos explicitar a equação Eq. (2.13), tal que:

$$\mathcal{H}_{intra}^{CMF}(\sigma_i^z) = J_1 (\sigma_1^z \sigma_2^z + \sigma_2^z \sigma_4^z + \sigma_4^z \sigma_3^z + \sigma_3^z \sigma_1^z) + J_2 (\sigma_1^z \sigma_4^z + \sigma_2^z \sigma_3^z) \quad . \quad (2.14)$$

Antes de discutirmos o termo *intercluster*, vamos descrever a Fig. 2.8, que mostra uma rede dividida em clusters. A configuração de *spins* é a mesma da fase AF, presente na Fig. 2.1 (a). Os círculos pretos indicam *spins* no estado $\sigma_i^z = +1$, enquanto os círculos vazados indicam *spins* $\sigma_i^z = -1$. Os números dentro dos círculos representam a numera-

ção do sítio relativo ao seu cluster. Por uma questão de simplicidade, não exibimos todas as interações na figura. As interações J_2 e J_3 são exibidas somente para o sítio 1, uma vez que o número de interações para os demais sítios é idêntico. Podemos notar que para um único cluster, há apenas quatro interações J_1 *intracluster* (linha sólida mais densa) e duas interações J_2 *intracluster* (linha sólida mais delgada). No entanto, nenhuma interação entre terceiros vizinhos J_3 *intracluster* é incorporada. Estas estão presentes apenas no termo *intercluster*.

Figura 2.8 – Ilustração do modelo e método.



Fonte: Elaborado pelo autor.

A hamiltoniana \mathcal{H}_{inter} por sua vez, terá para cada sítio do cluster central: duas interações J_1 (linha tracejada), três interações J_2 (linha tracejada-pontilhada) e quatro interações J_3 (linha pontilhada). Neste termo, o efeito dos *spins* dos sítios dos cluster vizinhos será incorporado através das magnetizações locais. Na prática, calculamos apenas a magnetização de um único sítio do cluster vizinho, e os demais sítios estarão determinados pela simetria. Isso só é possível pela escolha adequada do cluster.

Ao dividir o sistema em clusters de quatro sítios, podemos escrever o termo com

interações entre clusters como:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{inter}^{CMF}(\sigma_i^z, m_i) = & J_1 [\sigma_1^z (\sigma_2^z + \sigma_3^z) + \sigma_2^z (\sigma_1^z + \sigma_4^z) + \sigma_3^z (\sigma_4^z + \sigma_1^z) + \sigma_4^z (\sigma_3^z + \sigma_2^z)] / 2 \\ & + 3J_2 [\sigma_1^z (\sigma_4^z) + \sigma_2^z (\sigma_3^z) + \sigma_3^z (\sigma_2^z) + \sigma_4^z (\sigma_1^z)] / 2 , \\ & + 4J_3 [\sigma_1^z (\sigma_1^z) + \sigma_2^z (\sigma_2^z) + \sigma_3^z (\sigma_3^z) + \sigma_4^z (\sigma_4^z)] / 2 \end{aligned} \quad (2.15)$$

com os termos entre parêntesis representando os *spins* dos clusters vizinhos. O fator 1/2 é adicionado devido ao fato de que estas interações são compartilhadas com os clusters vizinhos. Aplicando a aproximação de campo médio da Eq. (2.11), obtemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{inter}^{CMF}(\sigma_i^z, m_i) = & J_1 \left[\sigma_1^z (m'_2 + m'_3) - \frac{m_1 m'_2 + m_1 m'_3}{2} + \sigma_2^z (m'_1 + m'_4) - \frac{m'_1 m_2 + m_2 m'_4}{2} \right. \\ & \left. + \sigma_3^z (m'_4 + m'_1) - \frac{m_3 m'_4 + m'_1 m_3}{2} + \sigma_4^z (m'_3 + m'_2) - \frac{m'_3 m_4 + m'_2 m_4}{2} \right] \\ & + 3J_2 \left[\sigma_1^z m'_4 - \frac{m_1 m'_4}{2} + \sigma_2^z m'_3 - \frac{m_2 m'_3}{2} + \sigma_3^z m'_2 - \frac{m'_2 m_3}{2} + \sigma_4^z m'_1 - \frac{m'_1 m_4}{2} \right] \\ & + 4J_3 \left[\sigma_1^z m'_1 - \frac{m_1 m'_1}{2} + \sigma_2^z m'_2 - \frac{m_2 m'_2}{2} + \sigma_3^z m'_3 - \frac{m_3 m'_3}{2} + \sigma_4^z m_4 - \frac{m_4 m'_4}{2} \right] \end{aligned} \quad (2.16)$$

onde m'_i denota a magnetização do cluster vizinho. Agrupando os termos em comum, encontramos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{inter}^{CMF}(\sigma_i^z, m_i) = & J_1 \left[(\sigma_1^z + \sigma_4^z) (m'_2 + m'_3) + (\sigma_2^z + \sigma_3^z) (m'_1 + m'_4) \right. \\ & \left. - \frac{(m_1 + m_4) (m'_2 + m'_3) + (m_2 + m_3) (m'_1 + m'_4)}{2} \right] \\ & + 3J_2 \left[\sigma_1^z m'_4 + \sigma_2^z m'_3 + \sigma_3^z m'_2 + \sigma_4^z m'_1 - \frac{m_1 m'_4 + m_2 m'_3 + m'_2 m_3 + m'_1 m_4}{2} \right] \\ & + 4J_3 \left[\sigma_1^z m'_1 + \sigma_2^z m'_2 + \sigma_3^z m'_3 + \sigma_4^z m_4 - \frac{m_1 m'_1 + m_2 m'_2 + m_3 m'_3 + m_4 m'_4}{2} \right] \end{aligned} \quad (2.17)$$

Para os casos das fases AF e SAF, podemos relacionar diretamente as magnetizações locais dos clusters vizinhos, de forma que $m'_i = m_i$. Portanto,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{inter}^{CMF}(\sigma_i^z, m_i) = & J_1 [(\sigma_1^z + \sigma_4^z) (m_2 + m_3) + (\sigma_2^z + \sigma_3^z) (m_1 + m_4) - (m_1 + m_4) (m_2 + m_3)] \\ & + 3J_2 [\sigma_1^z m_4 + \sigma_2^z m_3 + \sigma_3^z m_2 + \sigma_4^z m_1 - (m_1 m_4 + m_2 m_3)] \\ & + 4J_3 \left[\sigma_1^z m_1 + \sigma_2^z m_2 + \sigma_3^z m_3 + \sigma_4^z m_4 - \frac{m_1^2 + m_2^2 + m_3^2 + m_4^2}{2} \right] \end{aligned} \quad (2.18)$$

Como todos os sítios do cluster são topologicamente equivalentes, podemos relacionar as magnetizações locais de sítios distintos. Para a fase AF, podemos escrever

$$m_1 = -m_2 = -m_3 = m_4 \quad , \quad (2.19)$$

que ao aplicarmos na hamiltoniana acima, obtemos a hamiltoniana *intercluster* para a fase AF em termos da magnetização do sítio 1:

$$\mathcal{H}_{inter;AF}^{CMF}(\sigma_i^z, m_1) = (-2J_1 + 3J_2 + 4J_3) (\sigma_1^z - \sigma_2^z - \sigma_3^z + \sigma_4^z - 2m_1) m_1 \quad . \quad (2.20)$$

Este resultado pode ser comparados visualmente com a Fig. 2.8, que apresenta duas interações antiferromagnéticas J_1 para cada sítio σ_i^z , três interações ferromagnéticas J_2 e quatro interações ferromagnéticas J_3 .

Já para o caso da fase SAF (listras verticais), as magnetizações locais se comportam de tal forma que podemos estabelecer a seguinte relação:

$$m_1 = -m_2 = m_3 = -m_4. \quad (2.21)$$

Aplicando esta relação na hamiltoniana da Eq. (2.18), chegamos na equação

$$\mathcal{H}_{inter;SAF}^{CMF}(\sigma_i^z, m_1) = (-3J_2 + 4J_3) (\sigma_1^z - \sigma_2^z + \sigma_3^z - \sigma_4^z - 2m_1) m_1 \quad . \quad (2.22)$$

Estas hamiltonianas possuem uma dependência explícita com a média das magnetizações, que por sua vez dependerá da temperatura. Sendo assim, estas hamiltonianas possuem uma dependência implícita com a temperatura.

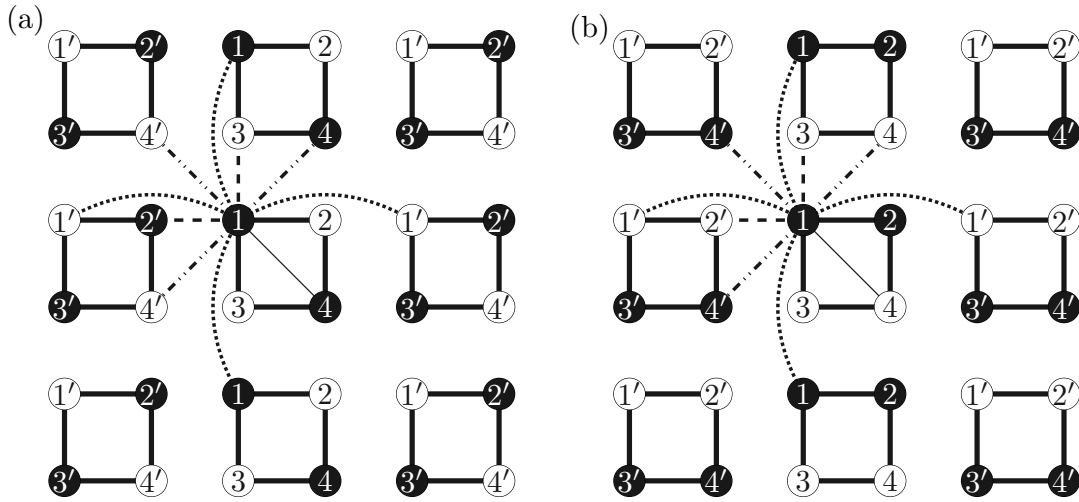
2.3.1 Particularidades da fase SD

A fase SD possui algumas peculiaridades que afetam a relação das magnetizações entre clusters distintos. Nesta subseção, vamos elucidar estes detalhes. Um dos aspectos relevantes com relação à fase SD é que a escolha do padrão de magnetização que será adotado para a auto-consistência, nem sempre é tão imediata como nos casos das fases AF e SAF. Na fase SD temos duas escolhas distintas para as magnetizações do cluster, que irão captar de forma diferente os efeitos desempenhados pela frustração. Podemos observar isso na Fig. 2.9, que mostra dois padrões de ordenamento *intracluster* para a fase SD, mas que captam efeitos de frustração de forma distinta.

A Fig. 2.9 segue a mesma convenção da Fig. 2.8, com a diferença de que aqui o sobrescrito *prime* denota o sítio de um cluster vizinho, que possui posição análoga ao sítio do cluster central, porém com o sinal da magnetização trocado, ou seja, $m'_{ij} = -m_i$. Em ambos os casos, os clusters serão idênticos no sentido vertical da figura, enquanto que os clusters vizinhos no sentido horizontal diferem apenas pela inversão global.

Com relação à escolha das soluções para a fase SD, é importante notar que no painel (a), as interações antiferromagnéticas entre primeiros vizinhos dentro do cluster são completamente satisfeitas. No painel (b), por outro lado, interações frustradas entre pri-

Figura 2.9 – Possibilidades na escolha de um cluster para a fase SD.



Fonte: Elaborado pelo autor.

meios vizinhos dentro do cluster são incorporadas. Neste ponto, é relevante lembrar que a energia do estado fundamental da fase SD depende unicamente da interação J_1 e esta é uma fase que incorpora efeitos de frustração. Portanto, é razoável considerar relevante o papel de interações J_1 frustradas nesta fase. Sendo assim, consideramos que optar por um padrão de magnetizações análogo ao retratado no painel (b) é o mais adequado, uma vez que as interações *intracluster* são incorporadas através da diagonalização exata, enquanto as interações entre clusters são aproximadas nesta abordagem.

Dessa forma, trabalharemos com a fase SD adotando o padrão de magnetizações locais exibido no painel (b), pois assim os efeitos da frustração não virão apenas via campo médio, que é uma aproximação, mas também da diagonalização exata. Com isso, poderemos captar melhor os efeitos da frustração sobre o modelo.

Um outro ponto ao qual destacamos é que, na fase SD a intensidade da interação J_3 não altera a temperatura de ordenamento na presente aproximação. Veremos isso de duas formas. A primeira é calculando a hamiltoniana *intercluster* (que analisamos a seguir), a segunda será através dos diagramas de fases do próximo capítulo. Considerando a Fig. 2.9 (b) e a hamiltoniana \mathcal{H}_{inter} da Eq.(2.17), obtemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{inter;SD}^{CMF} = & J_1 [\sigma_1^z (\sigma_{2'}^z + \sigma_3^z) + \sigma_2^z (\sigma_{1'}^z + \sigma_4^z) + \sigma_3^z (\sigma_{4'}^z + \sigma_1^z) + \sigma_4^z (\sigma_{3'}^z + \sigma_2^z)] / 2 \\ & + J_2 [\sigma_1^z (\sigma_4^z + 2\sigma_{4'}^z) + \sigma_2^z (\sigma_3^z + 2\sigma_{3'}^z) + \sigma_3^z (\sigma_2^z + 2\sigma_{2'}^z) + \sigma_4^z (\sigma_1^z + 2\sigma_{1'}^z)] / 2 \quad , \\ & + 2J_3 [\sigma_1^z (\sigma_1^z + \sigma_{1'}^z) + \sigma_2^z (\sigma_2^z + \sigma_{2'}^z) + \sigma_3^z (\sigma_3^z + \sigma_{3'}^z) + \sigma_4^z (\sigma_4^z + \sigma_{4'}^z)] / 2 \end{aligned} \quad (2.23)$$

onde os termos entre parêntesis contêm *spins* de clusters vizinhos. É importante notar que há dois tipos de clusters vizinhos: os que terão *spins* com um comportamento de magnetizações locais idêntico ao do cluster central e os que terão magnetizações locais em

sentido oposto ao de sítios equivalentes ao do cluster central (denotado por σ_i^z). Aplicando a aproximação de campo médio e considerando que $m'_i = -m_i$, temos que

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{inter;SD}^{CMF}(\sigma_i^z, m_i) = & J_1 [\sigma_1^z (m'_3 - m'_2) + \sigma_2^z (m'_4 - m'_1) + \sigma_3^z (m'_1 - m'_4) + \sigma_4^z (m'_2 - m'_3)] \\ & + J_1 \frac{m_1(m'_2 - m'_3) + m_2(m'_1 - m'_4) + m_3(m'_4 - m'_1) + m_4(m'_3 - m'_2)}{2} \\ & - J_2 (\sigma_1^z m'_4 + \sigma_2^z m'_3 + \sigma_3^z m'_2 + \sigma_4^z m'_1) \\ & + J_2 \frac{m_1 m'_4 + m_2 m'_3 + m_3 m'_2 + m_4 m'_1}{2} \end{aligned} \quad (2.24)$$

As magnetizações locais na equação acima podem ser relacionadas diretamente às magnetizações locais dos sítios do cluster central, ou seja, $m_i = m'_i$. Isso nos permite escrever

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{inter;SD}^{CMF}(\sigma_i^z, m_i) = & J_1 [(\sigma_1^z - \sigma_4^z) (m_3 - m_2) + (\sigma_2^z - \sigma_3^z) (m_4 - m_1)] \\ & + J_1 (m_1 - m_4) (m_2 - m_3) \\ & - J_2 (\sigma_1^z m_4 + \sigma_2^z m_3 + \sigma_3^z m_2 + \sigma_4^z m_1) + J_2 (m_1 m_4 + m_2 m_3) \end{aligned} \quad (2.25)$$

Neste ponto, podemos considerar a relação entre as magnetizações do cluster central. Para a fase SD, podemos notar que $m_1 = m_2 = -m_3 = -m_4$, conforme a Fig. 2.9 (b). Aplicando esta relação às equações acima, obtemos

$$\mathcal{H}_{inter;SD}^{CMF}(\sigma_i^z, m_1) = (-2J_1 + J_2)(\sigma_1^z + \sigma_2^z - \sigma_3^z - \sigma_4^z - 2m_1)m_1 \quad (2.26)$$

Como podemos ver, nem a hamiltoniana para a fase SD *intracluster*, nem a *intercluster* possuem dependência explícita com a magnitude da interação J_3 . Também podemos observar isto na Fig. 2.9 (b), onde temos duas interações ferromagnéticas J_3 na vertical e outras duas interações antiferromagnéticas na horizontal, resultando numa contribuição identicamente nula para a hamiltoniana.

2.3.2 Implementação do problema numérico

Após a inclusão da aproximação de campo médio com clusters, o problema de muitos corpos passa a ser um problema efetivo de um único cluster, que pode ser expresso em termos da hamiltoniana

$$\mathcal{H}^{CMF} = \mathcal{H}_{intra}^{CMF}(\sigma_i^z) + \mathcal{H}_{inter}^{CMF}(\sigma_i^z, m_1) - h \sum_{i=1}^4 \sigma_i^x \quad , \quad (2.27)$$

O termo *intracluster* é representado por $\mathcal{H}_{intra}^{CMF}$, dado pela equação (2.14), que por sua vez, independe das flutuações térmicas e da fase em questão. Já o termo referente ao campo transversal, passa de uma somatória que antes se estendia até o N -ésimo sítio da rede, passando a estender-se até o sítio 4 do cluster central apenas. E o termo que incorpora interações *interclusters* é representado por $\mathcal{H}_{inter}^{CMF}(\sigma_i^z, m_1)$, dado pela Eq. (2.17), discutida acima para cada uma das fases ordenadas. Além disso, este termo possui uma dependência com a magnetização local m_1 , calculada através da seguinte equação:

$$m_1 = \frac{\text{Tr} \sigma_1^z e^{-\beta \mathcal{H}^{CMF}}}{\text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}^{CMF}}} \quad . \quad (2.28)$$

Como podemos notar, a magnetização local depende da hamiltoniana de campo médio. Portanto, para resolver o problema em questão, precisamos adotar um procedimento auto-consistente.

O método de campo médio com clusters demanda a aplicação de um algoritmo que permita implementar uma auto-consistência. Neste caso, implementamos o método iterativo, de tal forma que supomos uma solução m_1' para a magnetização local, que é utilizada para obter a hamiltoniana de campo médio com clusters. Com os autovalores de energia obtidos a partir desta suposição acerca da magnetização local, calculamos um novo valor para m_1 utilizando a equação acima. O erro é, então, calculado pelo valor absoluto da diferença entre a magnetização local proposta e a obtida, ou seja,

$$\text{Erro} = |m_1 - m_1'| \quad . \quad (2.29)$$

Caso o erro exceda a tolerância estipulada, repetimos o procedimento, atualizando a solução tentativa através da magnetização local calculada, ou seja, fazemos $m_1' = m_1$. Os detalhes do algoritmo da auto-consistência encontram-se no apêndice D.

Uma questão importante a ser levada em conta, é que, através do método CMF é possível obter a energia livre de maneira direta. Em particular, a energia livre por cluster é dada por

$$f = -k_B T \ln \left(\text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}^{CMF}} \right) \quad . \quad (2.30)$$

Portanto, esta metodologia permite comparar a energia livre das diferentes fases, o que possibilita a obtenção dos diagramas de fases de maneira direta. Além disso, qualquer quantidade termodinâmica de interesse pode ser obtida a partir da energia livre, como foi discutido anteriormente.

Para o nosso caso de um cluster de quatro sítios, o parâmetro de ordem para a fase AF pode ser obtido por

$$m_{AF} = \frac{m_1 - m_2 - m_3 + m_4}{4} \quad . \quad (2.31)$$

Já para a fase SAF o parâmetro de ordem é

$$m_{SAF} = \frac{m_1 - m_2 + m_3 - m_4}{4} . \quad (2.32)$$

Para a fase SD, o parâmetro de ordem é dado por

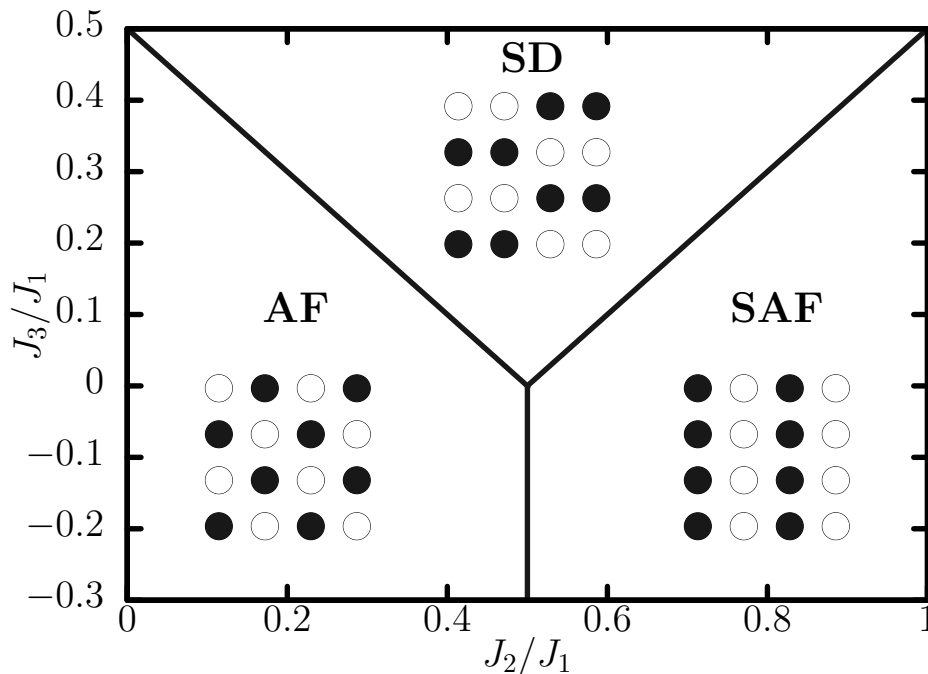
$$m_{SD} = \frac{m_1 + m_2 - m_3 - m_4}{4} . \quad (2.33)$$

As hamiltonianas \mathcal{H}_{intra} da Eq. (2.14) e \mathcal{H}_{inter} da Eq. (2.17), compõem uma matriz hamiltoniana que é diagonal. Porém, o termo referente ao campo transversal, torna a matriz hamiltoniana não-diagonal. Portanto, faz-se necessário diagonalizar essa matriz antes de calcular qualquer quantidade termodinâmica. Os detalhes algébricos acerca da diagonalização da matriz hamiltoniana encontram-se no apêndice B, enquanto que a parte computacional pode ser consultada no apêndice E.

3 RESULTADOS

A seguir, apresentamos os resultados obtidos através da aplicação da teoria de campo médio com clusters ao modelo de Ising com interações até terceiros vizinhos, descrito pela Eq. (2.27). Nossos resultados foram obtidos adotando interações antiferromagnéticas entre primeiros e segundos vizinhos ($J_1 > 0$ e $J_2 \geq 0$). Nós exploramos dois cenários com relação às interações de terceiros vizinhos, permitindo que estas sejam antiferromagnéticas ($J_3 > 0$) e ferromagnéticas ($J_3 < 0$). Nossa análise foi limitada à intensidades fracas da interação entre terceiros vizinhos, uma vez que, em geral, estas interações são mais fracas que as interações entre vizinhos mais próximos. Portanto, nos limitamos a analisar¹ $-0.5 \leq J_3/J_1 \leq 0.5$. Na apresentação dos resultados, a interação entre primeiros vizinhos é utilizada como escala de energia. Adotando este conjunto de interações, podemos encontrar no estado fundamental três fases magnéticas ordenadas distintas: antiferromagnética (AF), superantiferromagnética (SAF) e *staggered dimer* (SD), conforme discutimos no capítulo anterior. Ilustramos essas fases na figura abaixo.

Figura 3.1 – Diagrama de fases na ausência de campo transversal para o estado fundamental.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Na Fig. 3.1 apresentamos o diagrama do acoplamento entre terceiros vizinhos pelo acoplamento entre segundos vizinhos no estado fundamental ($T = 0$) e na ausência de

¹Adotamos neste trabalho o uso do ponto como separador decimal.

campo transversal ($h = 0$). É importante notar que no eixo vertical é explorado tanto o caso de J_3 antiferromagnético (região superior), como o caso ferromagnético (região inferior). A obtenção deste diagrama é feita comparando a energia do estado fundamental das fases ordenadas, fornecidas pelas equações (2.4), Eq. (2.5) e Eq. (2.6). Portanto, o diagrama mostra as fases com menor energia para diferentes valores de J_2/J_1 e J_3/J_1 . Este diagrama será fundamental para fazermos a conexão com os diagramas de fases com flutuações térmicas, uma vez que este diagrama sugere que a fase SD surja apenas para o caso da interação J_3 antiferromagnética e com uma faixa específica de valores J_2/J_1 . Além disso, quanto mais intensa for a interação J_3 antiferromagnética, maior será a região do diagrama ocupada pela fase SD, ou seja, mais favorecida será a fase em detrimento das demais. Em contrapartida, para a interação entre terceiros vizinhos ferromagnética, só serão encontradas as fases ordenadas AF e SAF, e a fronteira entre estas fases não é alterada pela interação entre terceiros vizinhos, ocorrendo sempre para $J_2/J_1 = 0.5$. Também é ilustrada neste diagrama de forma simplificada, a configuração de *spins* para cada fase.

Vamos iniciar a discussão, apresentando os resultados para o caso clássico, ou seja, na ausência de campo transversal, na seção 3.1. Na seção 3.2, discutiremos o efeito do campo transversal sobre as transições no estado fundamental, ou seja, em $T = 0$. Finalmente, na seção 3.3, apresentamos nossos resultados na presença de flutuações quânticas e clássicas.

3.1 TRANSIÇÕES DE FASES CLÁSSICAS

Quando um sistema apresenta transições de fases induzidas apenas por flutuações térmicas, sem a presença de qualquer outro parâmetro de controle externo, como um campo magnético, pressão ou composição química, dizemos que se trata de uma transição de fase clássica. No caso do modelo de Ising, consideramos transições de fase clássicas aquelas em que não há campo transversal atuando sobre o sistema. A seguir, apresentamos os resultados obtidos para as transições de fases clássicas do modelo J_1 - J_2 - J_3 de Ising na rede quadrada. Os diagramas de fases obtidos para este caso estão reunidos nos painéis da Fig. 3.2. No eixo vertical temos os valores da temperatura, no eixo horizontal o termo de acoplamento entre segundos vizinhos J_2/J_1 , ambos normalizados pelo termo escolhido como escala de energia, J_1 . Nos painéis superiores temos o caso $J_3/J_1 \geq 0$ (nulo ou antiferromagnético) e nos inferiores $J_3/J_1 < 0$ (ferromagnético).

As linhas sólidas denotam transições de fase de segunda ordem, enquanto as linhas tracejadas representam transições de primeira ordem. Essa convenção será adotada ao longo de todo o trabalho. O círculo preto indica o ponto tricrítico, cuja coordenada do acoplamento é denotada por $g^* = J_2/J_1$, que marca a mudança da natureza da transição

utilizamos este diagrama de fases para comparar com os demais casos, visando investigar o papel que as interações de terceiros vizinhos têm sobre as transições de fase.

Nos painéis (b) e (c) apresentamos os resultados para o caso em que a interação de terceiros vizinhos é antiferromagnética, ou seja, $J_3 > 0$. A natureza desta interação leva ao surgimento da fase *staggered dimer* (SD). Neste caso, a interação entre terceiros vizinhos intensifica a frustração no modelo. Um dos efeitos de frustração introduzidos por J_3 é a redução da temperatura de ordenamento magnética para as fases AF e SAF, mas o mesmo não ocorre para a fase SD. A intensidade da interação J_3 não afeta a temperatura de ordenamento para a fase SD, como havia sido predito pelo resultado encontrado na Eq. (2.26), mas o intervalo de valores de J_2/J_1 onde a fase SD ocorre aumenta com J_3 .

Também é importante frisar que os valores críticos de J_2/J_1 que delimitam as fronteiras AF-SD e SD-SAF, coincidem com os valores sugeridos no diagrama do estado fundamental da Fig. 3.1. No diagrama do estado fundamental, podemos notar que para $J_3/J_1 = 0.1$, a fase SD poderá ser encontrada no intervalo $0.4 \leq J_2/J_1 \leq 0.6$, sendo a mesma faixa de valores encontradas no painel (b) da Fig. 3.2. O resultado é análogo para o painel (c). Devemos enfatizar que este é um resultado importante, pois a teoria de campo médio com clusters permite reproduzir corretamente o estado fundamental do modelo, o que não ocorre com todas as técnicas. Por exemplo, a teoria de campo efetivo falha na descrição do diagrama de fases do estado fundamental quando aplicada ao modelo de Ising J_1 - J_2 com campo transversal (BOBÁK et al., 2018). Portanto, a teoria de campo médio com clusters fornece um bom ponto de partida para introduzir flutuações térmicas no modelo J_1 - J_2 - J_3 .

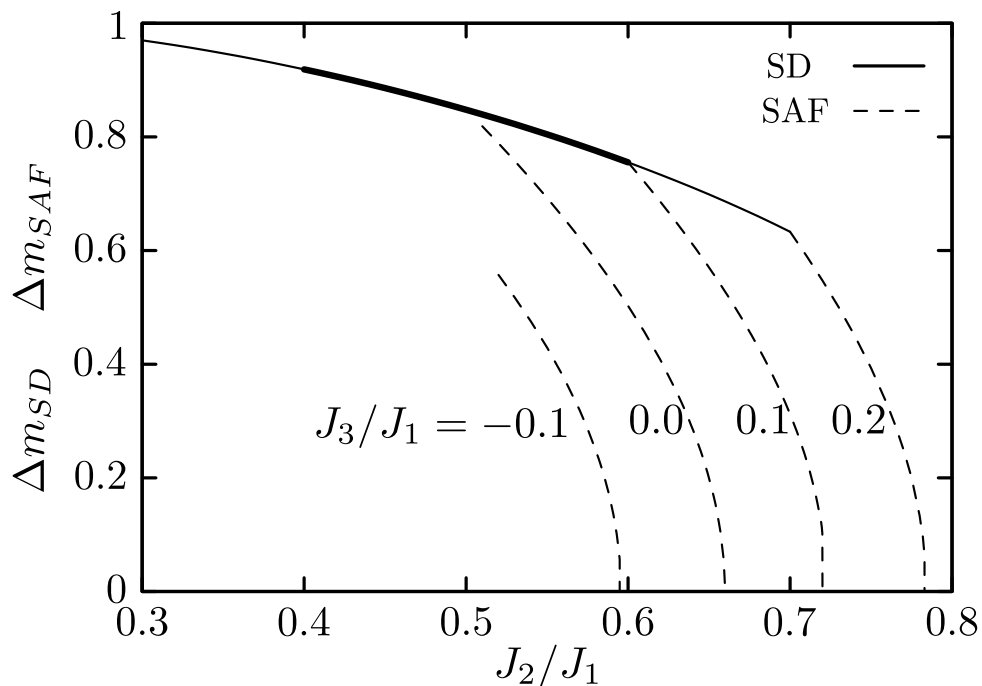
Nossos resultados permitem concluir que a interação antiferromagnética entre terceiros vizinhos favorece o aparecimento da fase SD e dificulta os ordenamentos AF e SAF. Além disso, a região em que as transições de primeira ordem são encontradas no diagrama $T/J_1 \times J_2/J_1$ aumenta com J_3/J_1 . Também notamos que a coordenada de acoplamento ($g^* = J_2/J_1$) do ponto tricrítico é deslocado para valores maiores conforme J_3 aumenta. Este deslocamento do ponto tricrítico concorda com resultados recentes obtidos através do método de Monte Carlo (LIU et al., 2016). Outro aspecto interessante no diagrama é o aparecimento de um ponto triplo, ou seja, um ponto em que as fases SD, SAF e PM coexistem. Este ponto triplo é encontrado somente para $J_3 > 0$. É importante ressaltar que este ponto triplo ocorre em temperatura finita em nossos resultados, enquanto resultados de Monte Carlo para o modelo, sugerem que este ponto triplo poderia ocorrer em $T = 0$ (LANDAU; BINDER, 1985). É importante notar que este ponto triplo somente ocorre devido às transições SD-PM serem descontínuas, o que também está em concordância com resultados de Monte Carlo para o modelo (LIU et al., 2016).

Nos painéis (d) à (f) apresentamos os resultados para interação entre terceiros vizinhos ferromagnética. É possível notar que esta interação favorece os ordenamentos AF e SAF ao aumentar a temperatura de transição. Além disso, o ponto tricrítico é deslo-

cado para a esquerda do diagrama. Em outras palavras, a região com transições PM-SAF descontínuas é reduzida conforme a interação ferromagnética entre terceiros vizinhos aumenta de intensidade. Para uma intensidade suficientemente grande desta interação, a transição PM-SAF passam a ser exclusivamente contínuas e, portanto, não há ponto tricrítico no diagrama de fases. Isso pode ser observado para $J_3/J_1 = -0.2$, conforme ilustrado na Fig. 3.2 (f). Conforme sugerido pelo diagrama do estado fundamental, a fase SD não é encontrada nos diagramas de fases com J_3 ferromagnético. Em resumo, a análise dos diferentes diagramas mostra que um deslocamento de g^* para valores maiores é obtido quando J_3 antiferromagnético aumenta, enquanto o processo inverso ocorre para um J_3 ferromagnético.

Encerrando a discussão dos resultados clássicos, apresentamos o gráfico da Fig. 3.3, que mostra o salto dos parâmetros de ordem nas transições ordem-desordem como função do acoplamento entre segundos vizinhos. Por exemplo, Δm_{SD} representa o valor do parâmetro de ordem da fase SD no cruzamento das energias livres SD e PM.

Figura 3.3 – Saltos do parâmetro de ordem nas fases SD e SAF .



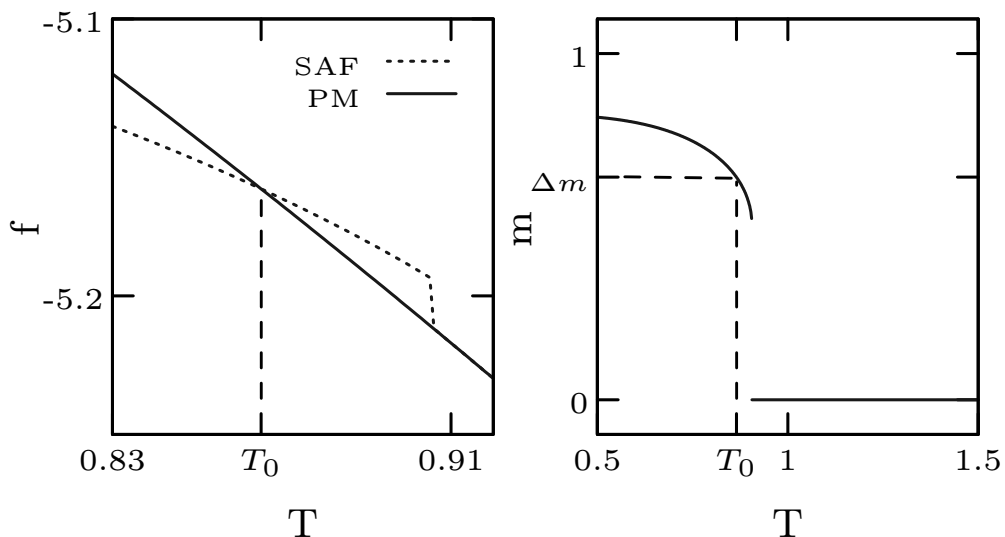
Fonte: Elaborado pelo autor.

Apresentamos nossos resultados para quatro valores da interação entre terceiros vizinhos: $J_3/J_1 = -0.1, 0.0, 0.1$ e 0.2 . Como a hamiltoniana da fase SD, na aproximação de campo médio com clusters de 4 sítios, independe da intensidade da interação entre terceiros vizinhos, o salto do parâmetro de ordem desta fase também não depende desta interação, como podemos visualizar com a sobreposição das linhas (sólidas) correspondentes aos valores $J_3/J_1 = 0.1$, que começa no valor $J_2/J_1 \approx 0.4$ e termina no valor

$J_2/J_1 \approx 0.6$ (linha sólida mais densa sobreposta à linha mais delgada). Na outra linha sólida, temos $J_3/J_1 = 0.2$, iniciando em $J_2/J_1 \approx 0.3$ e terminando em $J_2/J_1 \approx 0.7$. Podemos notar que a descontinuidade no parâmetro de ordem da fase SD permanece sempre acima de 0.6 para os valores de J_3/J_1 considerados. Contudo, a descontinuidade no parâmetro de ordem da fase SAF é significativamente reduzida pelo aumento de J_2/J_1 , indo para zero no ponto tricrítico. Essa descontinuidade mais intensa associada à fronteira SD-PM pode ser relacionada ao caráter forte da transição de primeira ordem nesta fronteira, conforme reportado nos estudos de Monte Carlo do modelo (LIU et al., 2016; LANDAU; BINDER, 1985).

Para melhor esclarecer como foram obtidas as curvas da Fig. 3.3, nós mostramos na Fig. 3.4 o procedimento para obtê-las no caso de uma fase ordenada (SAF) com $J_2/J_1 = 0.6$ e $J_3/J_1 = 0.1$. O primeiro passo é obter a temperatura T_0 na qual há o cruzamento entre as energias da fase ordenada (SAF) e da fase PM, como representado na figura da esquerda. Logo após, nós plotamos a magnetização em função da temperatura, e então localizamos o valor da magnetização $\Delta m_{SAF} = \Delta m = m_0 - 0$, no qual m_0 é a magnetização correspondente ao valor temperatura T_0 (encontrada no processo anterior). Dessa forma, Δm_{SAF} fornecerá o salto da magnetização através da diferença da magnetização m_0 na fase SAF pela magnetização na fase PM, ou seja, quando o parâmetro de ordem é nulo.

Figura 3.4 – Esquemática do procedimento na obtenção dos saltos da magnetização nas transições de primeira ordem.



Fonte: Elaborado pelo autor.

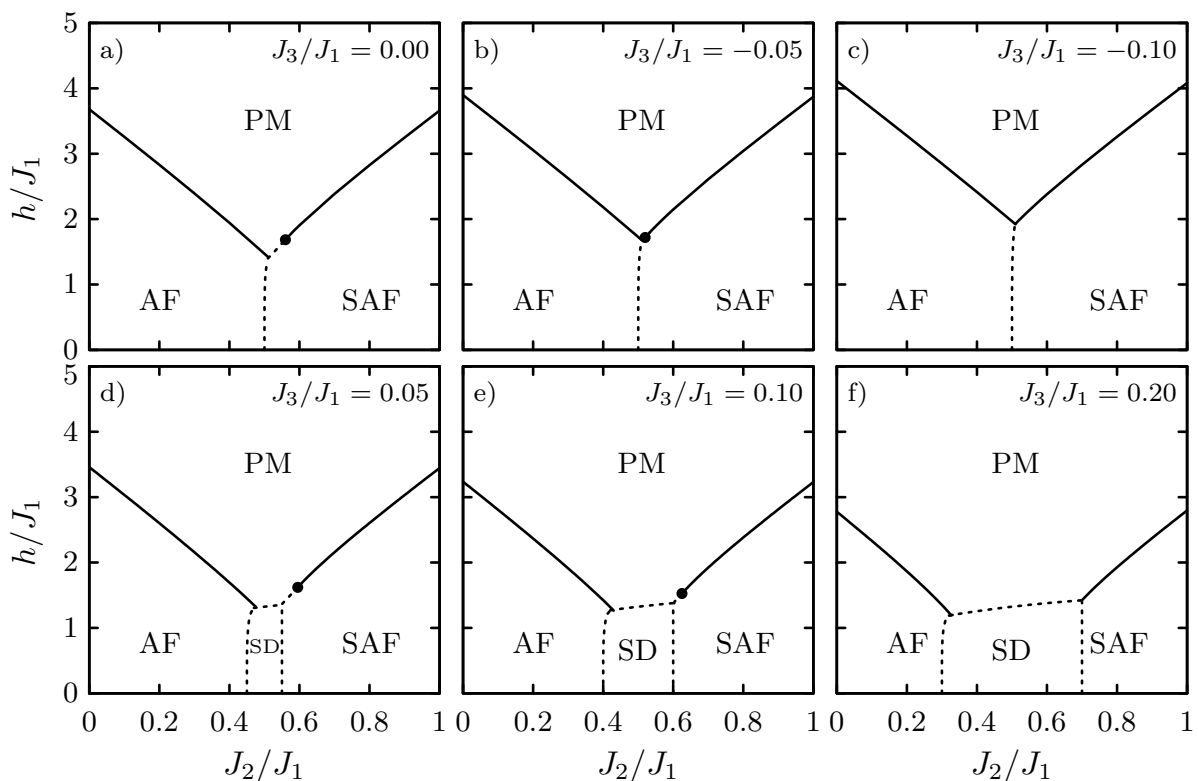
É importante notar que nossos resultados obtidos através da teoria de campo médio com clusters para os diagramas de fases clássicos reproduzem, em grande medida, as

características encontradas nos diagramas de fases clássicos obtidos através do método de Monte Carlo (LIU et al., 2016; LANDAU; BINDER, 1985). Isso sugere que a presente metodologia fornece um bom ponto de partida para explorar efeitos quânticos sobre o modelo, o que será implementado na próxima seção.

3.2 TRANSIÇÕES DE FASE QUÂNTICAS

Nesta seção, apresentamos na Fig. 3.5 os diagramas de fases para o estado fundamental do modelo Ising com um campo magnético transversal aplicado. O eixo vertical apresenta valores distintos do campo magnético transversal h/J_1 e o eixo horizontal apresenta diferentes valores do termo de acoplamento entre segundos vizinhos. Nos painéis superiores temos o caso da interação ferromagnética entre terceiros vizinhos (além do caso $J_3 = 0$), enquanto que nos painéis inferiores temos o caso em que esta interação é antiferromagnética.

Figura 3.5 – Diagramas de fases quânticos para o estado fundamental.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Na Fig. 3.5 (a), apresentamos os resultados para o caso em que há apenas inte-

rações entre primeiros e segundos vizinhos, ou seja, $J_3 = 0$. Este diagrama servirá de comparação para investigarmos o papel das interações entre terceiros vizinhos no modelo de Ising com campo transversal. O ponto tricrítico foi encontrado para $g_Q^* = 0.56$, que corrobora o valor encontrado por Kellermann, Schmidt e Zimmer (2019). É interessante notar que a coordenada do acoplamento do ponto tricrítico quântico apresenta valor menor que o obtido para o ponto tricrítico clássico. Isso significa que o espectro de J_2/J_1 em que ocorrem transições de segunda ordem entre as fases SAF e PM é maior no caso quântico em comparação ao caso clássico. Resultados análogos foram obtidos através de métodos de expansão em série (OITMAA, 2020) e um método variacional quântico (DOMÍNGUEZ; LOPETEGUI; MULET, 2021). Portanto, os resultados obtidos através da teoria de campo médio com clusters para o modelo de Ising J_1 - J_2 apresenta boa concordância com os obtidos na literatura.

Nos painéis (b) e (c) temos o caso da interação entre terceiros vizinhos ferromagnético. A estrutura do diagrama de fases é análoga à do caso clássico. Contudo, é importante notar que a fase paramagnética tem um caráter distinto daquela induzida por flutuações térmicas. No estado fundamental, a fase paramagnética induzida pelo campo magnético transversal apresenta uma magnetização na direção do campo magnético externo. Portanto, esta fase paramagnética não apresenta um caráter puramente desordenado, como na fase induzida por flutuações térmicas. Outro aspecto a ser observado é o deslocamento da coordenada do ponto tricrítico quântico para valores menores tanto do acoplamento J_2/J_1 como do campo h/J_1 , conforme a intensidade da interação ferromagnética entre terceiros vizinhos aumenta. Em especial, para $J_3/J_1 = -0.10$ verificamos o desaparecimento do ponto tricrítico, obtendo uma fronteira entre as fases SAF e PM caracterizada por transições de segunda ordem. Com isso, todas as transições ordem-desordem para valores menores (mais intensos ferromagneticamente) ou iguais a $J_3/J_1 = -0.10$, passam a ser de segunda ordem. É possível notar novamente o favorecimento das fases AF e SAF pela interação entre terceiros vizinhos. No caso quântico, esse favorecimento é manifestado pelo aumento do campo necessário para introduzir a fase paramagnética conforme J_3/J_1 aumenta.

Nos painéis (d), (e) e (f) da Fig. 3.5, apresentamos nossos resultados para o caso em que a interação entre terceiros vizinhos é antiferromagnética. Assim como no diagrama de fases clássico para o estado fundamental da Fig. 3.1, temos o surgimento da fase SD para J_3 antiferromagnética, com a fase ocorrendo para o mesmo intervalo encontrado no diagrama do estado fundamental da Fig. 3.1. Neste caso, a coordenada do ponto tricrítico é deslocado para valores maiores de J_2/J_1 .

Contudo, também notamos que a fase SD pode ser encontrada para valores maiores de J_2/J_1 conforme J_3/J_1 aumenta, de forma análoga ao obtido para o caso clássico. Desta forma, apesar de g_Q^* aumentar, a região com transições de primeira ordem na fronteira PM-SAF é reduzida quando J_3/J_1 aumenta. Com isso, para o valor em particular de

$J_3/J_1 = 0.2$, não há ponto tricrítico, pois a região da fase SD cresce concomitantemente mais rápido do que o deslocamento do ponto tricrítico, fazendo com que as transições SAF-PM sejam apenas de segunda ordem. A interação antiferromagnética entre terceiros vizinhos não favorece as fases ordenadas, reduzindo a intensidade do campo magnético necessária para a obtenção da fase paramagnética. Nossos resultados também indicam que flutuações quânticas não alteram a natureza das transições entre as fases SD e PM, que permanecem sendo de primeira ordem para todos os valores de J_2/J_1 e J_3/J_1 investigados.

Os resultados obtidos para o estado fundamental na presença de flutuações quânticas indicam que a natureza das transições de fase na fronteira SAF-PM são sensíveis ao tipo de flutuação (térmica ou quântica) que as induz. Na próxima seção, investigamos detalhadamente as transições de fase quando ambos os tipos de flutuações estão presentes.

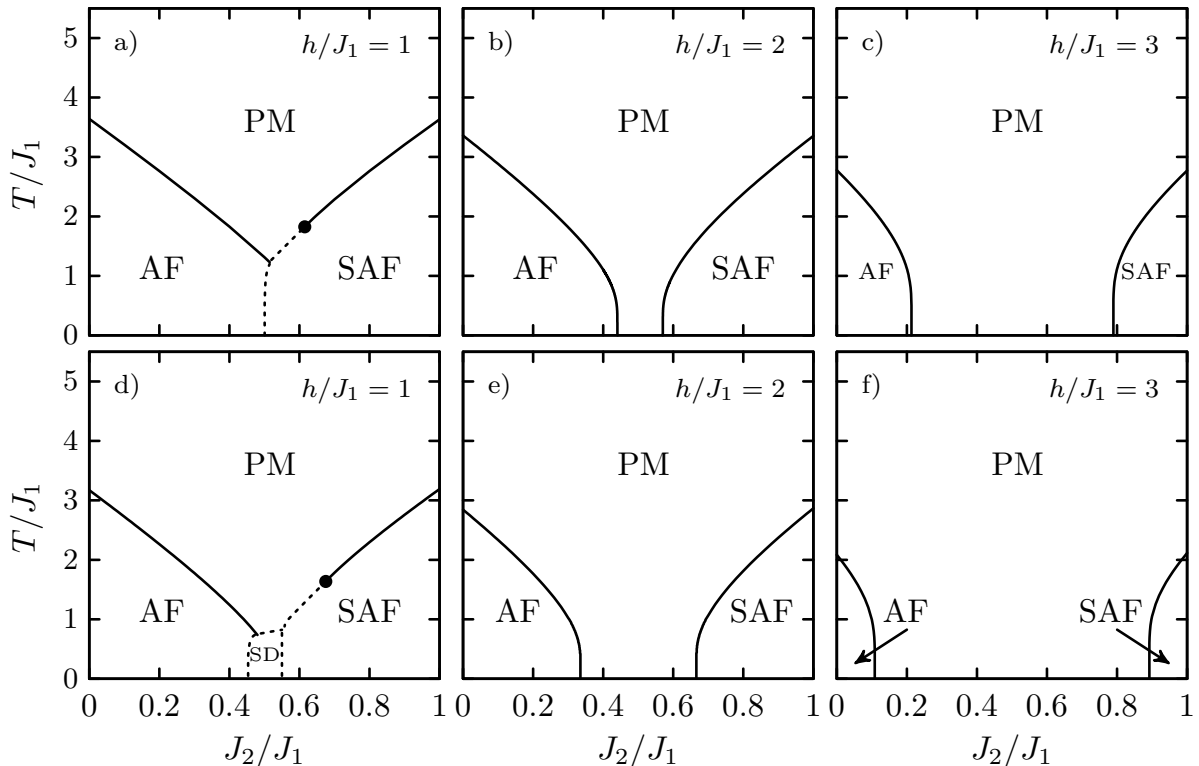
3.3 EFEITOS QUÂNTICOS SOBRE TRANSIÇÕES DE FASES CLÁSSICAS

Nesta seção, discutimos o papel de flutuações quânticas introduzidas por campo transversal nas transições de fase em temperatura finita. Esta seção é dividida em duas subseções. Na primeira, apresentamos os diagramas de fases com flutuações térmicas e quânticas para diferentes valores de campo e de interação J_3 . Na seção seguinte, analisamos a dependência do ponto tricrítico com a interação entre terceiros vizinhos J_3 para os casos clássico e quântico, finalizando a seção com a discussão do fenômeno *Quantum Annealed Criticality* (QAC).

3.3.1 Diagramas de fases

Para analisarmos o papel das flutuações térmicas e quânticas no modelo de Ising com interações até terceiros vizinhos, organizamos os diagramas de fases da seguinte maneira: selecionamos um valor de J_3 e exploramos o caso com interações ferromagnéticas entre terceiros vizinhos ($J_3 < 0$, exibido nos painéis superiores) e antiferromagnéticas ($J_3 > 0$, exibido nos painéis inferiores). Em todos os cenários, $J_2 \geq 0$ e $J_1 > 0$. A intensidade do campo magnético externo é fixa para cada painel. Em cada uma das figuras, os painéis à esquerda apresentam o diagrama de fases para o valor do acoplamento do campo externo $h = 1$, os painéis centrais foram obtidos com $h = 2$ e por fim, os painéis à direita apresentam os resultados adotando $h = 3$. Ou seja, o valor do campo e das flutuações quânticas é intensificado ao longo dos painéis da esquerda para a direita. No eixo vertical temos a temperatura normalizada T/J_1 e no eixo horizontal o termo de acoplamento entre segundos vizinhos (J_2/J_1).

Figura 3.6 – Diagramas de fases com flutuações térmicas e quânticas, com $J_3/J_1 = -0.05$ (painéis superiores) e $J_3/J_1 = 0.05$ (painéis inferiores). O padrão de linhas adotado para identificar as transições de fase segue o que foi adotado nas seções anteriores.



Fonte: Elaborado pelo autor.

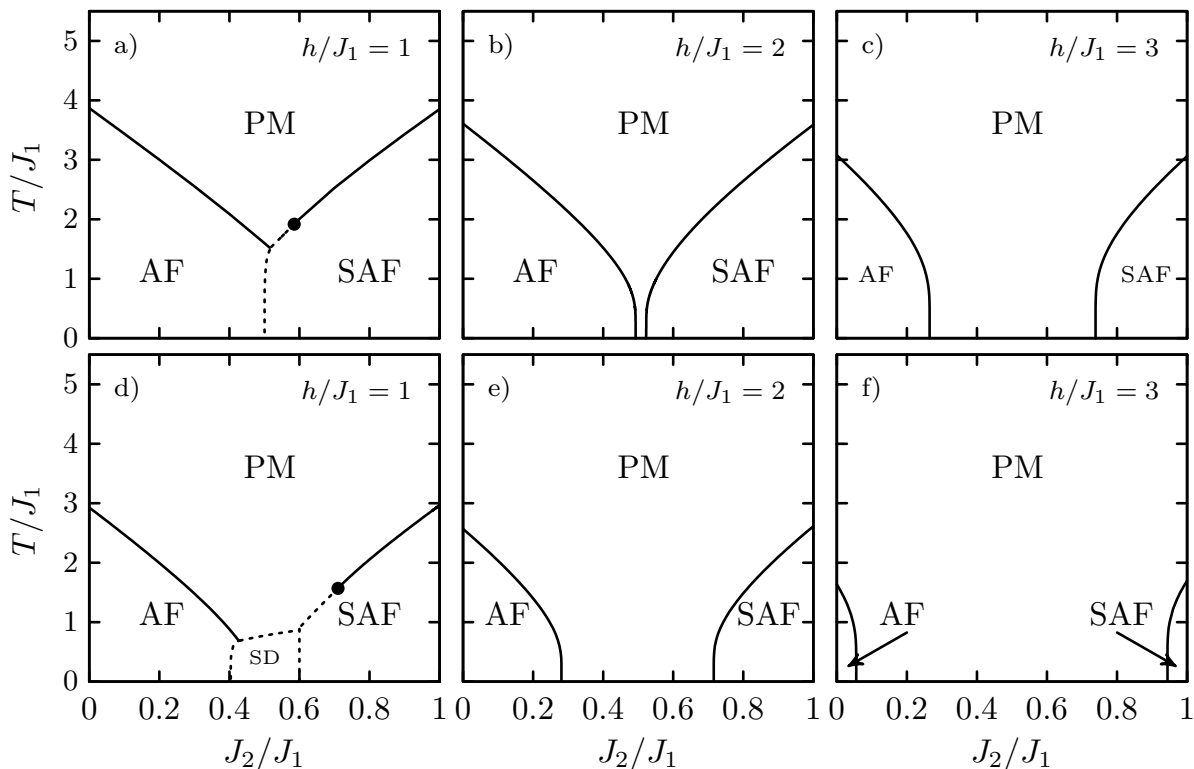
Na Fig. 3.6, apresentamos os resultados para a interação entre terceiros vizinhos $J_3/J_1 = \pm 0.05$. Podemos observar que, tanto nos painéis inferiores como nos superiores, há uma redução da temperatura de ordenamento conforme o campo magnético aumenta. Ou seja, a aplicação de um campo magnético transversal não favorece fases ordenadas. Outra questão importante é que, ao aumentar a intensidade do campo, observamos o favorecimento de transições de segunda ordem. Isto pode ser notado através da comparação dos painéis (a) e (b), onde no primeiro painel tínhamos transições de primeira e de segunda ordem, e ao aumentar a intensidade do campo, passamos a ter apenas transições de segunda ordem. Este comportamento ocorre tanto para interações ferromagnéticas entre terceiros vizinhos ((a) e (b)) como antiferromagnéticas ((d) e (e)).

O ponto mais importante a se destacar é o aparecimento de dois pontos críticos quânticos em $T = 0$ para $h/J_1 = 2$ e 3 . Isso decorre do surgimento de uma fase paramagnética na ausência de flutuações térmicas. Em outras palavras, não encontramos transições diretas entre as fases AF e SAF, que passam a ser separadas por uma fase paramagnética, inclusive no estado fundamental. Também é possível observar o desaparecimento da fase SD com um campo transversal mais intenso, conforme ilustrado nos

painéis (d) e (e).

O segundo grupo de diagramas de fases que apresentamos foi obtido adotando $J_3/J_1 = -0.10$ (painéis superiores) e $J_3/J_1 = 0.10$ (painéis inferiores), conforme ilustrado na Fig. 3.7. No painel (a), notamos um aumento da temperatura de ordenamento em relação ao painel (a) da Fig. 3.6. Ou seja, mantendo os demais parâmetros idênticos, o aumento da intensidade da interação ferromagnética entre terceiros vizinhos favorece o ordenamento magnético. O oposto é observado quando analisamos o caso em que a interação de terceiros vizinhos é antiferromagnética. Uma tendência análoga foi observada nos resultados obtidos na ausência de campo transversal, conforme discutido na seção 3.1. Também podemos comparar a localização do ponto tricrítico com o caso clássico. Observamos que a coordenada do acoplamento do ponto tricrítico desloca-se para valores menores de J_2/J_1 . Isso ocorre para ambos os casos, ou seja, tanto para J_3 ferromagnético quanto J_3 antiferromagnético. Estas observações indicam que a inclusão de um campo transversal fraco não altera as propriedades qualitativas do sistema na ausência de flutuações quânticas.

Figura 3.7 – Diagramas de fases com flutuações térmicas e quânticas, com $J_3/J_1 = -0.10$ (painéis superiores) e $J_3/J_1 = 0.10$ (painéis inferiores).



Fonte: Elaborado pelo autor.

Prosseguindo na nossa análise, é possível notar na Fig. 3.7 (b) uma diminuição do *gap* entre as fases AF e SAF, quando comparado ao obtido para $J_3/J_1 = -0.05$. Em

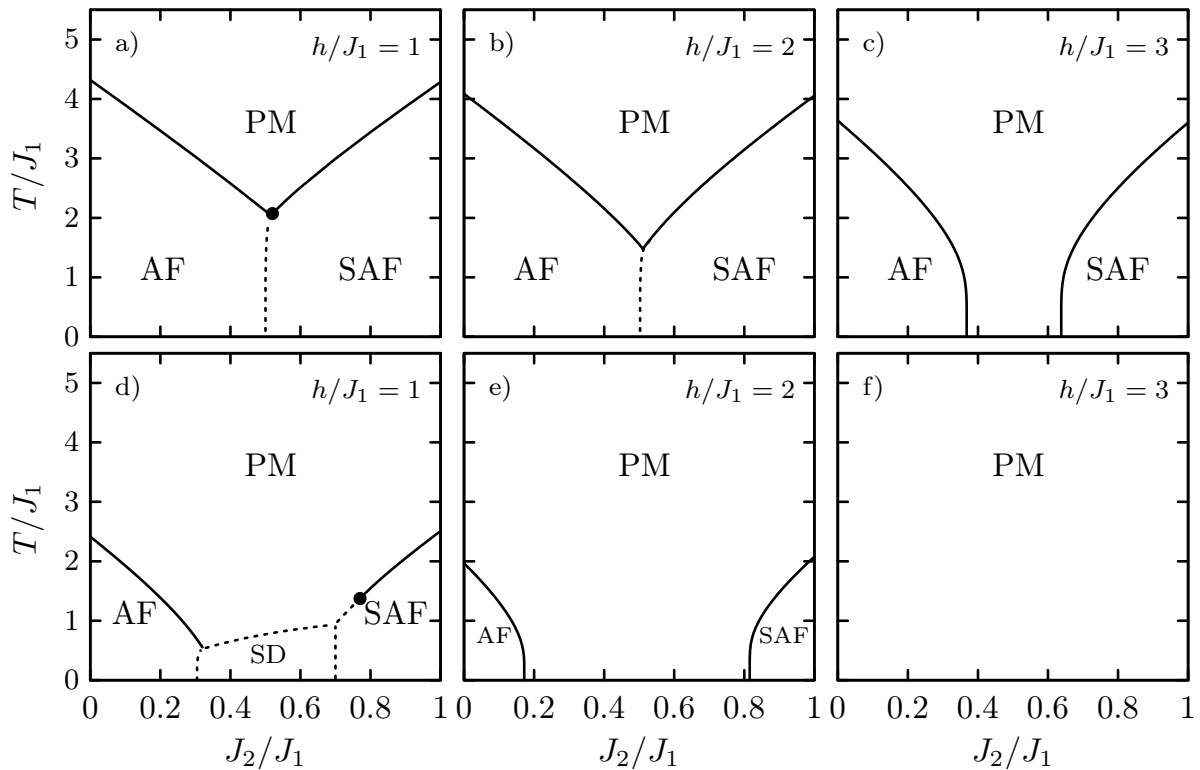
outras palavras, há um deslocamento do ponto crítico quântico para valores maiores de J_2/J_1 na fronteira entre as fases AF e PM, ao passo que este ponto é deslocado para valores menores de J_2/J_1 na fronteira entre as fases SAF e PM. Isso também pode ser observado pela característica desta interação entre terceiros vizinhos favorecer as fases ordenadas AF e SAF, o que reduz a região onde a fase paramagnética é encontrada em baixas temperaturas. O mesmo comportamento é observado no painel (c). No entanto, é possível notar na sequência dos painéis superiores, que a interação com um campo magnético externo mais intenso reduz a temperatura de ordenamento, favorecendo a fase PM em detrimento das demais fases ordenadas, como ocorre para $J_3/J_1 = \pm 0.05$.

Na Fig. 3.7 (d), notamos o surgimento da fase SD para J_3 antiferromagnética próximo do intervalo de valores $0.4 \leq J_2/J_1 \leq 0.6$, tal como sugerido pelo diagrama do estado fundamental clássico obtido na Fig. 3.1 e pelo diagrama do estado fundamental quântico da Fig. 3.5 (e). Podemos comparar este painel com o painel (b) da Fig. 3.2, que apresenta o diagrama de fases para o mesmo valor de J_3 , mas sem flutuação quântica. Notamos que a temperatura de ordenamento da fase SD também é reduzida ao incluir flutuações quânticas. Olhando para os painéis (e) e (f), notamos que o aumento de J_3 leva à redução da temperatura de ordenamento das fases AF e SAF, o que é intensificado pelo campo transversal.

Na Fig. 3.8, apresentamos os diagramas de fases obtidos para $J_3/J_1 = \pm 0.20$. No painel (a), notamos que a transição SAF-PM de primeira ordem ocorre em uma região muito pequena do diagrama de fases, fazendo com que o ponto tricrítico ocorra muito próximo de $J_2/J_1 = 0.5$. Este fenômeno é produzido pelo efeito combinado da interação ferromagnética entre terceiros vizinhos e flutuações quânticas introduzidas pelo campo transversal. No painel (b), é possível notar que o aumento da intensidade da interação J_3 leva ao desaparecimento da fase paramagnética em $T = 0$ para $h/J_1 = 2$. Ou seja, mesmo na presença de flutuações quânticas intensas, a interação J_3 ferromagnética favorece o estabelecimento das fases AF e SAF em baixas temperaturas. Contudo, para um campo transversal intenso o suficiente, o *gap* entre as fases AF e SAF é reestabelecido, conforme mostra o painel (c).

Nas Figuras 3.8 (d) e (e), observamos um diagrama análogo ao obtido para valores menores de J_3 antiferromagnético. Contudo, no painel (f), obtemos apenas uma fase paramagnética, como consequência das fortes flutuações quânticas e da frustração introduzida pela interação J_3 . É importante dizer que estes diagramas são consistentes com os obtidos na seção anterior para o estado fundamental.

Figura 3.8 – Diagramas de fases com flutuações térmicas e quânticas, com $J_3/J_1 = -0.20$ (painéis superiores) e $J_3/J_1 = 0.20$ (painéis inferiores).



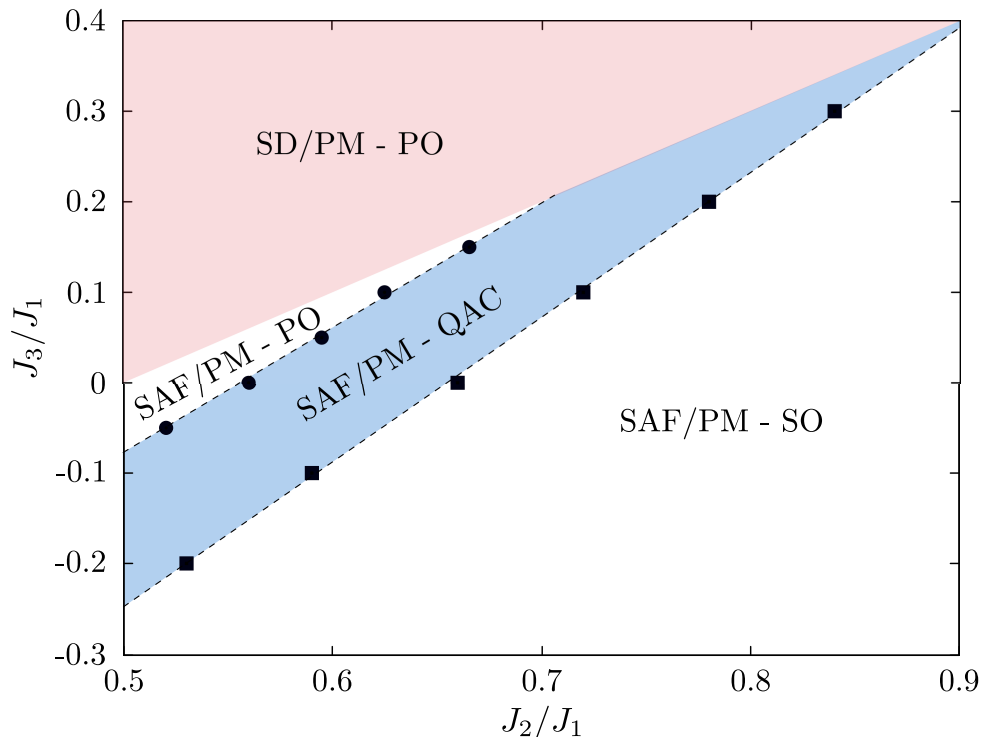
Fonte: Elaborado pelo autor.

3.3.2 Quantum Annealed Criticality

Na Fig. 3.9, apresentamos uma visualização esquemática dos principais resultados obtidos para as transições de fases clássicas e quânticas do modelo J_1 - J_2 - J_3 na rede quadrada com *spins* de Ising. Nesta ilustração, focamos na região $J_2/J_1 > 0.5$, na qual a natureza das transições de fase é afetada por flutuações quânticas e pela interação J_3 . Podemos identificar quatro regiões relevantes neste plano J_2/J_1 por J_3/J_1 , que apresenta a localização de diferentes pontos tricríticos clássicos ($h = 0$) e quânticos ($T = 0$), representados por quadrados e círculos, respectivamente. Com relação às transições entre as fases SAF e PM, há três regiões relevantes: uma região em que somente há transições de primeira ordem (PO), uma região somente com transições de segunda ordem (SO) e uma região em que podemos encontrar transições clássicas de primeira ordem e um ponto crítico quântico.

Nesta terceira região (indicada pela cor azul), para $h = 0$, as transições produzidas por flutuações térmicas são de primeira ordem, mas flutuações quânticas podem levar ao aparecimento de transições de segunda ordem e, conseqüentemente, de um ponto crítico quântico em $T = 0$. Este fenômeno é chamado de *quantum annealed criticality* (QAC) (CHANDRA et al., 2020). Nossos resultados permitem notar que o tamanho do espectro

Figura 3.9 – Deslocamento do ponto tricrítico para os casos quântico (círculos) e clássico (quadrados). As linhas tracejadas são guias para os olhos.



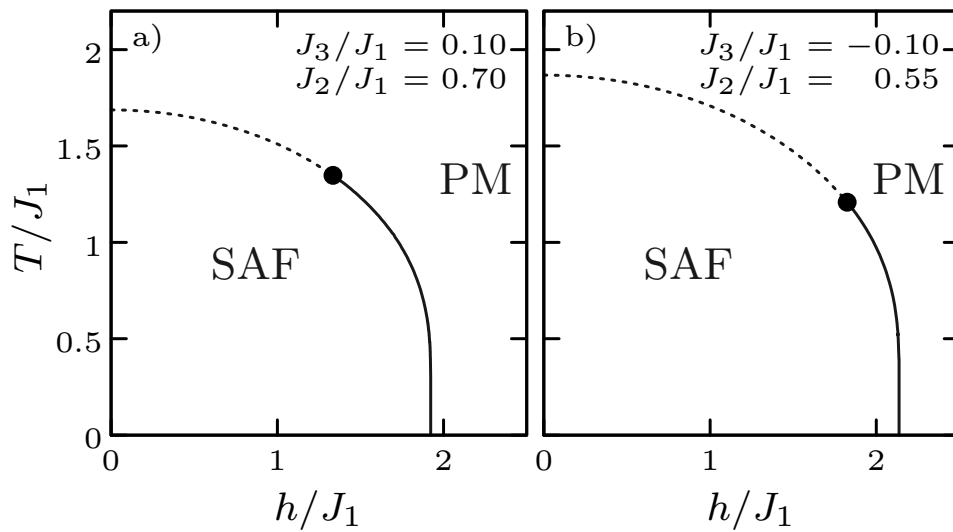
Fonte: Elaborado pelo autor.

de J_2/J_1 para o qual QAC é observada não é significativamente afetado pela interação J_3 . Contudo, a fase SD ocupa uma parte do diagrama de fases quando $J_3 > 0$. A região em que a fase SD é encontrada em $T = 0$ é representada pela cor vermelha. Como podemos notar, a região com o fenômeno QAC acaba sendo reduzida devido à competição entre as fases SD e SAF. Na fronteira entre as fases SD e PM, não observamos transições contínuas e, portanto, não encontramos o fenômeno QAC. Portanto, nossos resultados indicam que o fenômeno QAC será observado somente para valores de interação entre segundos e terceiros vizinhos correspondentes à região azul da Fig. 3.9.

Para ilustrar o fenômeno QAC, obtivemos diagramas da temperatura pelo campo transversal para alguns valores de interação que correspondem à região azul da Fig. 3.9. Em particular, exploramos os casos $J_3/J_1 = 0.1$ com $J_2/J_1 = 0.7$ e $J_3/J_1 = -0.1$ com $J_2/J_1 = 0.55$. Estes diagramas são apresentados nos painéis (a) e (b) da Fig. 3.10, respectivamente.

Em ambos os casos, transições de primeira ordem entre as fases SAF e PM ocorrem para campo magnético nulo ou fraco. Contudo, para um campo transversal intenso ou suficiente, um ponto tricrítico é observado no diagrama de fases. Em outras palavras, a natureza das transições de fase mudam de um caráter descontínuo para um caráter contínuo devido ao aumento da intensidade do campo transversal. Esta mudança na natureza das transições de fase é chamada de QAC. É importante notar que, embora as transições

Figura 3.10 – Diagramas de fases da temperatura pelo campo transverso para a interação entre terceiros vizinhos antiferromagnética (a) e ferromagnética (b).



Fonte: Elaborado pelo autor.

de fases clássicas sejam de primeira ordem quando $h = 0$, isso não impede o sistema de exibir um ponto crítico quântico. Diagramas análogos podem ser obtidos para valores de J_2 e J_3 correspondentes à região azul da Fig. 3.9.

4 CONCLUSÃO

Neste trabalho, estudamos o modelo de Ising na rede quadrada com interações entre primeiros (J_1 , antiferromagnética), segundos (J_2 , antiferromagnética) e terceiros (J_3 , antiferromagnética e ferromagnética) vizinhos com campo transversal através da teoria de campo médio com clusters. Exploramos os casos clássico (apenas flutuações térmicas) e quântico (com flutuações térmicas e quânticas) do modelo, analisando as transições de fase em diferentes cenários. Nestes cenários, consideramos a influência de interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas entre terceiros vizinhos e a aplicação de um campo magnético transversal incorporando flutuações quânticas ao sistema.

Dentre os resultados obtidos, encontramos transições de primeira ordem entre as fases *staggered dimer* (SD) e paramagnética (PM). Este mesmo comportamento foi encontrado por Landau e Binder (1985) através do método de Monte Carlo (MC). Portanto, este resultado para o limite clássico do modelo de Ising J_1 - J_2 - J_3 está em concordância com a literatura. Além disso, nossa abordagem sugere a existência de um ponto triplo à temperatura finita na fronteira entre as fases SD, PM e superantiferromagnética (SAF). No entanto, Landau e Binder (1985) sugerem a existência desse ponto triplo em $T = 0$.

No caso clássico, o diagrama para o estado fundamental indica que a fase SD ocorre apenas para o caso em que a interação entre terceiros vizinhos é antiferromagnética. Em particular, a técnica empregada é capaz de reproduzir o estado fundamental em concordância com os resultados de Landau e Binder (1985) e Liu et al. (2016). Ainda no caso clássico, foi possível observar a influência da interação entre terceiros vizinhos na localização do ponto tricrítico g^* na fronteira entre as fases SAF e PM. Em especial, na ausência da interação J_3 , ou em outras palavras, para o caso limite do modelo de Ising J_1 - J_2 , encontramos $g^* = 0.66$. Este valor está muito próximo do encontrado por Jin et al. (2013) através de simulações de MC. Nossos resultados mostram que este valor é modificado pela interação entre terceiros vizinhos. Em particular, quanto mais intensa a interação J_3 ferromagnética, mais g^* se aproxima de valores menores. Ao passo que no caso da interação J_3 antiferromagnética, esta favorece valores maiores de g^* . Essa tendência de aumento de g^* conforme J_3 aumenta está em acordo com os resultados de Monte Carlo obtidos por Liu et al. (2016). Também podemos notar que a interação J_3 ferromagnética favorece fases ordenadas, enquanto que a interação J_3 antiferromagnética favorece a fase PM. Outro resultado relevante para o caso clássico diz respeito ao salto da magnetização nas transições SAF-PM e SD-PM. Em geral, obtivemos que o salto do parâmetro de ordem da fase SD mantém um alto valor, enquanto o parâmetro de ordem da fase SAF apresenta um salto na transição que diminui conforme J_2/J_1 se aproxima do valor associado ao ponto tricrítico.

No caso quântico, notamos um deslocamento da coordenada do ponto tricrítico

para valores menores de J_2/J_1 em relação ao diagrama clássico. Em outras palavras, a transição de fase de segunda ordem é favorecida por um campo magnético transversal mais intenso. Além disso, a fase PM é favorecida com o aumento da intensidade das flutuações quânticas, como podemos ver pela redução da temperatura de ordenamento encontrada nos diagramas de fases. Em particular, temos o surgimento de dois pontos críticos quânticos para um campo transversal intenso o suficiente.

Os diversos resultados para o modelo de Ising quântico na rede quadrada J_1 - J_2 - J_3 , obtidos através do método de campo médio com clusters, foram sintetizados na Fig. 3.9 que mostra as coordenadas J_3/J_1 e J_2/J_1 dos pontos tricríticos nos casos clássico e quântico. O comportamento da tricriticalidade nos casos clássico e quântico permite identificar uma faixa de valores de J_3/J_1 e J_2/J_1 em que o fenômeno QAC é encontrado. Nesta faixa, é possível observar a presença de transições de fase de primeira ordem para campos fracos e temperatura alta e transições de segunda ordem em temperaturas próximas de zero na presença de campos mais intensos. Em outras palavras, nossos resultados indicam que flutuações de natureza quântica podem induzir uma mudança na natureza da transição de fase para uma rede quadrada no modelo de Ising com interações até terceiros vizinhos. Contudo, interações J_3 muito fortes levam ao desaparecimento do fenômeno QAC.

Como perspectivas futuras, pretendemos explorar este modelo com interações $J_3/J_1 > 0.5$, contexto em que uma outra fase magnética degenerada (não explorada no presente estudo) pode ser encontrada (LANDAU; BINDER, 1985). Também seria interessante investigar o papel das interações entre planos neste modelo de Ising em uma rede quadrada com campo transversal. Por fim, seria interessante estudar o sistema do presente trabalho, sob a ótica de outros métodos aproximativos, como a rede de Bethe (ALBARRACÍN; ROSALES; SERRA, 2018) e a teoria de campo efetivo (ANJOS; VIANA; SOUSA, 2008).

REFERÊNCIAS

ALBARRACÍN, F. A. G.; ROSALES, H. D.; SERRA, P. Phase transitions, order by disorder, and finite entropy in the ising antiferromagnetic bilayer honeycomb lattice. **Phys. Rev. E**, v. 98, p. 012139, 2018.

ANJOS, R. A. dos; VIANA, J. R.; SOUSA, J. R. de. Phase diagram of the ising antiferromagnet with nearest-neighbor and next-nearest-neighbor interactions on a square lattice. **Physics Letters A**, v. 372, n. 8, p. 1180–1184, 2008. ISSN 0375-9601.

ARAJ, S.; COLVIN, R. V. Ferromagneticparamagnetic transition in iron. **Journal of Applied Physics**, v. 35, n. 8, p. 2424–2426, 1964.

ARFKEN, G.; WEBER, H. **Física matemática: métodos matemáticos para engenharia e física**. Rio de Janeiro: Elsevier, 2007.

BABUJIAN, H. M.; KAROWSKI, M.; TSVELIK, A. M. Probing strong correlations with light scattering: Example of the quantum ising model. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 94, p. 155156, 2016.

BALCERZAK, T. et al. Phase diagram of the J_1-J_2 frustrated anisotropic antiferromagnet with spin $s = 1$ on the quadratic lattice. **Phys. Rev. E**, v. 98, p. 022123, 2018.

BELITZ, D.; KIRKPATRICK, T. R.; VOJTA, T. First order transitions and multicritical points in weak itinerant ferromagnets. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 82, p. 4707–4710, 1999.

BITKO, D.; ROSENBAUM, T. F.; AEPPLI, G. Quantum critical behavior for a model magnet. **Physical Review Letters**, v. 77, n. 5, p. 2069–2110, 1996.

BOBÁK, A. et al. Phase transitions in a frustrated ising antiferromagnet on a square lattice. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 91, p. 032145, 2015.

_____. Frustrated spin- $\frac{1}{2}$ ising antiferromagnet on a square lattice in a transverse field. **Phys. Rev. E**, v. 97, p. 022124, 2018.

BRUSH, S. G. History of the lenz-ising model. **Rev. Mod. Phys.**, v. 39, p. 883–893, 1967.

CALLEN, H. B. **"Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics"**. [S.l.]: "American Association of Physics Teachers", 1998.

CHANDRA, P. et al. Quantum annealed criticality: A scaling description. **Phys. Rev. Res.**, American Physical Society, v. 2, p. 043440, 2020.

CHAPMAN, S. J. **Fortran 95/2003 for Scientists and Engineers**. Third. Melbourne: McGraw-Hill, 2007.

DOMÍNGUEZ, E.; LOPETEGUI, C. E.; MULET, R. Quantum cluster variational method and phase diagram of the quantum ferromagnetic J_1-J_2 model. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 104, p. 014205, 2021.

EJIMA, S. et al. Ising tricriticality in the extended hubbard model with bond dimerization. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 93, p. 235118, 2016.

FEYNMAN, R. P.; LEIGHTON, R. B.; SANDS, M. **Lições de Física de Feynman**. Porto Alegre: Bookman, 2008.

HENELIUS, P.; SANDVIK, A. W. Sign problem in monte carlo simulations of frustrated quantum spin systems. **Phys. Rev. B**, v. 62, p. 1102–1113, 2000.

HU, Y.; CHARBONNEAU, P. Numerical transfer matrix study of frustrated next-nearest-neighbor ising models on square lattices. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 104, p. 144429, 2021.

JAEGER, G. The Ehrenfest Classification of Phase Transitions: Introduction and Evolution. **Archive for History of Exact Sciences**, v. 53, p. 51–88, 1998.

JIN, S. et al. Phase transitions in the frustrated ising model on the square lattice. **Phys. Rev. B**, v. 87, p. 144406, 2013.

JIN, S.; SEN, A.; SANDVIK, A. W. Ashkin-teller criticality and pseudo-first-order behavior in a frustrated ising model on the square lattice. **Phys. Rev. Lett.**, v. 108, p. 045702, 2012.

KAIRYS, P. et al. Simulating the shastry-sutherland ising model using quantum annealing. **PRX Quantum**, American Physical Society, v. 1, p. 020320, 2020.

KANÔ, K.; NAYA, S. Antiferromagnetism. The Kagomé Ising Net. **Progress of Theoretical Physics**, v. 10, n. 2, p. 158–172, 1953. ISSN 0033-068X.

KELLERMANN, N.; SCHMIDT, M.; ZIMMER, F. M. Quantum ising model on the frustrated square lattice. **Phys. Rev. E**, v. 99, p. 012134, 2019.

KIRKPATRICK, T. R.; BELITZ, D. Universal low-temperature tricritical point in metallic ferromagnets and ferrimagnets. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 85, p. 134451, 2012.

KOONIN, S. E.; MEREDITH, D. C. **Computational Physics: Fortran Version**. First. United States: Addison-Wesley Publishing Company, 1994. Fifth printing.

LANDAU, D. P.; BINDER, K. Phase diagrams and critical behavior of ising square lattices with nearest-, next-nearest-, and third-nearest-neighbor couplings. **Phys. Rev. B**, v. 31, p. 5946–5953, 1985.

LIU, R. M. et al. Role of further-neighbor interactions in modulating the critical behavior of the ising model with frustration. **Phys. Rev. E**, v. 93, p. 032114, 2016.

LIU, X. Z. et al. Microscopic evidence of a quantum magnetization process in the $s = \frac{1}{2}$ triangular-lattice heisenberg-like antiferromagnet $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 100, p. 094436, 2019.

MAZIERO, J. **Álgebra Linear**. 2018. <https://github.com/jonasmaziero/algebra_linear>. Accessed: 2022-10-20.

METCALF, M.; REID, J.; COHEN, M. **Fortran 95/2003 Explained (Numerical Mathematics and Scientific Computation)**. Third. United States: Oxford University Press, 2004.

MORÁN-LÓPEZ, J. L.; AGUILERA-GRANJA, F.; SANCHEZ, J. M. First-order phase transitions in the ising square lattice with first- and second-neighbor interactions. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 48, p. 3519–3522, 1993.

MOTT, N. **Metal-Insulator Transitions**. First. London: CRC Press, 1990.

OITMAA, J. Frustrated transverse-field ising model. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, IOP Publishing, v. 53, n. 8, p. 085001, 2020.

PLASCAK, J. Ensemble thermodynamic potentials of magnetic systems. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 468, p. 224–229, 2018.

SACHDEV, S. Quantum criticality: Competing ground states in low dimensions. **Science**, v. 288, n. 5465, p. 475–480, 2000.

SAHIMI, M.; STAUFFER, D. Ising model above the upper critical dimension: An application to biology. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 71, p. 4271–4273, 1993.

SALINAS, S. R. A. **Introdução à Física Estatística**. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2005.

SCHMIDT, M.; ZIMMER, F. M.; MAGALHAES, S. G. Weak randomness in geometrically frustrated systems: spin-glasses. **Physica Scripta**, v. 90, n. 2, p. 025809, jan 2015.

SUBERT, R.; MULDER, B. M. Frustration-induced complexity in order-disorder transitions of the $J_1-J_2-J_3$ ising model on the square lattice. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 106, p. 014105, 2022.

SUZUKI, S.; INOUE, J. ichi; CHAKRABARTI, B. K. **Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models**. Second. Berlin: Springer Berlin, 2013.

The University of Tennessee and The University of Tennessee Research Foundation; The University of California Berkeley; The University of Colorado. **Lapack**. License: BSD. Disponível em: <<https://netlib.org/lapack/>>.

VOJTA, M. Quantum phase transitions. **Reports on Progress in Physics**, v. 66, n. 12, p. 2069, 2003.

YAMAMOTO, D.; MARMORINI, G.; DANSHITA, I. Microscopic model calculations for the magnetization process of layered triangular-lattice quantum antiferromagnets. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 114, p. 027201, Jan 2015.

YAMAMOTO, D. et al. Magnetism driven by the interplay of fluctuations and frustration in the easy-axis triangular xxz model with transverse fields. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 100, p. 140410, 2019.

_____. Quantum and thermal phase transitions of the triangular su(3) heisenberg model under magnetic fields. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 125, p. 057204, 2020.

APÊNDICE A – CONVENÇÕES

Neste apêndice esclarecemos as escolhas acerca de algumas convenções (algumas usuais e outros não tão usuais) utilizadas neste trabalho. São elas:

Ponto como separador decimal: No Brasil, o separador decimal é escrito com o uso da vírgula, ou seja, $1/2 = 0,5$. Já no sistema americano, o separador decimal é escrito com o uso ponto, de forma que $1/2 = 0.5$. O padrão seria seguir a primeira forma, porém isso geraria alguns empecilhos. Por exemplo, todos os artigos acadêmicos citados neste trabalho estão em inglês, seguindo o padrão americano, portanto teríamos que converter todos os valores dos artigos ao falar sobre eles. Este padrão vigente nos artigos, faz com que culturalmente nos referimos aos valores como 0.5 e não como 0,5, por exemplo. O outro motivo seria estético, com os gráficos e equações tendo uma melhor apresentação visual. Resumindo, esta é uma mudança que não impacta negativamente no trabalho, bastando apenas esclarecer a convenção utilizada.

Unidades naturais: Alguns cálculos podem ficar demasiadamente entediados se ficarmos levando todas as constantes juntas durante o cálculo. Para contornar isso, utilizamos as unidades naturais, na qual,

$$\hbar = k_B = c = 1.$$

É importante frisar que este procedimento não conduz a resultados equivocados, uma vez que ao final dos cálculos é possível recuperar tais constantes.

APÊNDICE B – ÁLGEBRA LINEAR

O caso quântico exige um tratamento ligeiramente mais delicado do que o correspondente clássico, pois teremos que manipular matrizes e calcular produtos tensoriais envolvendo as matrizes de Pauli¹, representadas pelas equações abaixo:

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \sigma^0 = \mathbb{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.1})$$

Neste caso, as matrizes de Pauli representam as variáveis de *spin* para o modelo de Ising com *spin* igual a $\pm 1/2$. Dessa forma, a interação entre pares de *spins* será dada por um produto tensorial, como esquematizado nas equações a seguir:

$$\begin{aligned} \sigma_1^z \sigma_2^z &= \sigma^z \otimes \sigma^z \otimes \mathbb{I} \otimes \mathbb{I} \\ \sigma_1^z \sigma_3^z &= \sigma^z \otimes \mathbb{I} \otimes \sigma^z \otimes \mathbb{I} \\ \sigma_1^z \sigma_4^z &= \sigma^z \otimes \mathbb{I} \otimes \mathbb{I} \otimes \sigma^z \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Ressaltamos que este procedimento é análogo para as demais interações. Os produtos tensoriais da Eq. (B.2) formam uma matriz diagonal de dimensão 16×16 .

Já a interação do *spin* com um campo magnético externo Γ , adicionará elementos fora da diagonal principal da matriz hamiltoniana. Estes termos, para o caso de um cluster 2×2 , virão através do seguinte produto:

$$\begin{aligned} \Gamma \sum_i \sigma_i^x &= \Gamma (\sigma^x \otimes \mathbb{I} \otimes \mathbb{I} \otimes \mathbb{I} \\ &\quad + \mathbb{I} \otimes \sigma^x \otimes \mathbb{I} \otimes \mathbb{I} \\ &\quad + \mathbb{I} \otimes \mathbb{I} \otimes \sigma^x \otimes \mathbb{I} \\ &\quad + \mathbb{I} \otimes \mathbb{I} \otimes \mathbb{I} \otimes \sigma^x) \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Pode ser ligeiramente complicado implementar computacionalmente estes produtos tensoriais. Contudo, podemos utilizar um resultado que simplificará nosso trabalho, que se encontra em (ARFKEN; WEBER, 2007). Estes resultados corresponderam aqui às Eqs.(B.4) e (B.5). Como segue,

$$\begin{aligned} C_{mn \times nm} &= A_{m \times m} \otimes B_{n \times n} \\ C_{\alpha\beta} &= A_{ij} B_{kl} \end{aligned}, \quad (\text{B.4})$$

com

$$\alpha = m(i - 1) + k \quad \text{e} \quad \beta = n(j - 1) + l. \quad (\text{B.5})$$

¹Neste trabalho não vamos trabalhar com matrizes complexas.

Para calcular médias através do mecanismo da Eq. (2.9), necessitamos que a matriz hamiltoniana esteja diagonalizada. Mas a matriz σ^x torna a matriz não diagonal. Entretanto, ela é diagonalizável, pois se uma matriz $A_{n \times n}$ é simétrica, com autovalores $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, cujos autovetores podem ser acomodados numa matriz P , então a matriz A poderá ser diagonalizada através do seguinte procedimento:

$$A' = P^{-1}AP = P^T AP = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & & \\ & \lambda_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & \lambda_n \end{pmatrix}. \quad (\text{B.6})$$

Onde A' corresponde a matriz A diagonalizada. É através deste procedimento que iremos diagonalizar numericamente a matriz hamiltoniana. Os detalhes computacionais pertinentes a este procedimento são discutidos no apêndice E.

Como a hamiltoniana é uma matriz, para calcular a função de partição mediante a Eq. (2.7), devemos utilizar a decomposição espectral da hamiltoniana (MAZIERO, 2018), como segue abaixo:

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^n e^{-\beta\lambda_i}. \quad (\text{B.7})$$

Com λ_i correspondendo ao autovalores da matriz hamiltoniana e $|v_i\rangle$ os autovetores associados.

APÊNDICE C – VERIFICAÇÕES

Para os diagramas de fases no caso quântico no estado fundamental (na ausência de flutuações térmicas) da Fig. 3.5, precisamos definir um **zero numérico**, em outras palavras, trabalhar com $T = 10^{-5}$. Se implementarmos diretamente esse valor, obteríamos uma divergência na função de partição. Portanto, devemos utilizar um recurso algébrico que visa contornar essa divergência, que é a utilização de um *shift* na hamiltoniana. Fazer um *shift* na hamiltoniana consiste em somá-la a uma constante α , de mesma dimensionalidade. Neste apêndice, gostaríamos de verificar como um *shift* na hamiltoniana afeta as médias e a energia livre. Tomamos como exemplo a hamiltoniana para o caso clássico, ou seja, do tipo matriz coluna, apenas por comodidade, os resultados para o caso quântico são totalmente equivalentes.

C.1 – INVARIÂNCIA DA MÉDIA POR UM *SHIFT* NA HAMILTONIANA

Queremos verificar se um *shift* na hamiltoniana afeta cálculos da média. Começamos definindo uma hamiltoniana \mathcal{H} com um *shift* α :

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H} + \alpha \quad . \quad (\text{C.1})$$

Pelas propriedades da hamiltoniana, \mathcal{H}' também é uma hamiltoniana. Consideremos o valor médio do observável, descrito por uma hamiltoniana \mathcal{H} , como

$$\langle \sigma \rangle = \sum_i \sigma \frac{e^{-\beta \mathcal{H}_i}}{Z} = \frac{\sum_i \sigma e^{-\beta \mathcal{H}_i}}{\sum_i e^{-\beta \mathcal{H}_i}} \quad . \quad (\text{C.2})$$

Denotamos o valor médio de um observável de uma hamiltoniana com *shift*, através da equação

$$\langle \sigma' \rangle = \sum_i \sigma \frac{e^{-\beta \mathcal{H}'_i}}{Z} = \frac{\sum_i \sigma e^{-\beta(\mathcal{H}_i + \alpha)}}{\sum_i e^{-\beta(\mathcal{H}_i + \alpha)}} \quad . \quad (\text{C.3})$$

Fatorando a soma da Eq.(C.3),

$$\langle \sigma' \rangle = \frac{\sum_i \sigma e^{-\beta \mathcal{H}_i} e^{-\beta \alpha}}{\sum_i e^{-\beta \mathcal{H}_i} e^{-\beta \alpha}} \quad ,$$

tendo em vista que α não depende da soma, então colocamos ele para fora do somatório. Mas como este termo aparece tanto no denominador, como no numerador, simplificamos,

obtendo

$$\langle \sigma' \rangle = \frac{\sum_i \sigma e^{-\beta \mathcal{H}_i}}{\sum_i e^{-\beta \mathcal{H}_i}} . \quad (\text{C.4})$$

A partir da Eq.(C.2) podemos escrever a equação acima como

$$\langle \sigma' \rangle = \langle \sigma \rangle .$$

Concluindo então que *shifts* na hamiltoniana não afetam o cálculo da média de um observável físico.

C.2 – DESLOCAMENTO DA ENERGIA LIVRE POR UM *SHIFT* NA HAMILTONIANA

Nesta etapa, gostaríamos de verificar se a energia livre é afetada por um *shift* na hamiltoniana. Consideremos a função de partição

$$Z = \sum_i e^{-\beta \mathcal{H}_i} \quad (\text{C.5})$$

e de forma análoga, definimos a função de partição com *shift* na hamiltoniana:

$$Z' = \sum_i e^{-\beta \mathcal{H}'_i}. \quad (\text{C.6})$$

Escrevendo a energia livre como

$$f = -k_B T \ln Z \quad (\text{C.7})$$

e a energia livre com *shift* na hamiltoniana como

$$f' = -k_B T \ln Z' . \quad (\text{C.8})$$

Utilizando a Eq.(C.1) na Eq. (C.6), escrevemos

$$f' = -k_B T \ln \sum_i e^{-\beta(\mathcal{H}_i + \alpha)} . \quad (\text{C.9})$$

Como α não é afetado pelo somatório, reescrevemos a equação acima, obtendo

$$f' = -k_B T \ln \left| e^{-\beta \alpha} \sum_i e^{-\beta \mathcal{H}_i} \right| . \quad (\text{C.10})$$

Da propriedade $\ln(AB) = \ln(A) + \ln(B)$, escrevemos

$$f' = -k_B T \left(\ln e^{-\beta\alpha} + \ln \sum_i e^{-\beta\mathcal{H}_i} \right) . \quad (\text{C.11})$$

Que pode ser escrita como

$$f' = \alpha - k_B T \ln \sum_i e^{-\beta\mathcal{H}_i} . \quad (\text{C.12})$$

Da definição de energia livre da Eq. (C.7), obtemos

$$f' = f + \alpha . \quad (\text{C.13})$$

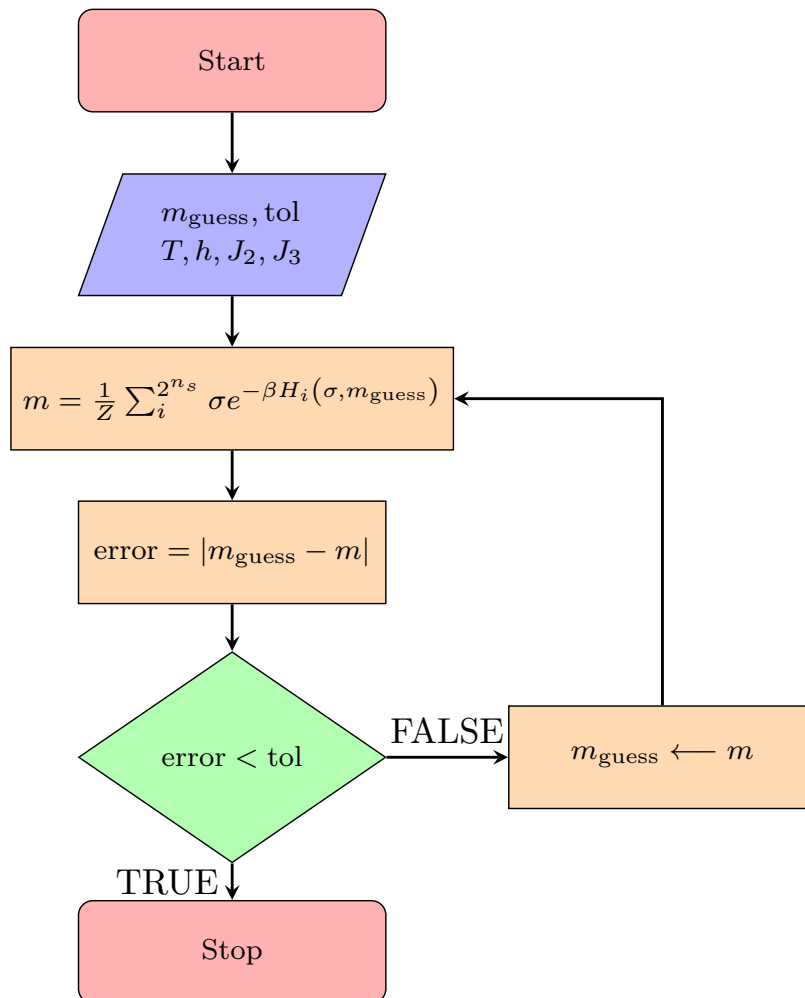
Concluimos então que um *shift* α em uma hamiltoniana \mathcal{H} tem como efeito um deslocamento da energia livre f por uma constante α . Isto não é um empecilho, uma vez que a energia não possui significado físico, ela é arbitrária, o que possui significado físico é a diferença entre as energias.

Adotamos neste estudo como *shift*, o menor autovalor da matriz hamiltoniana, contornando assim qualquer divergência causada por $T \approx 0$.

APÊNDICE D – ALGORITMO

Como discutido no capítulo 2, nós utilizamos como abordagem aproximativa a técnica de campo médio com clusters. Nesta técnica temos uma equação auto-consistente a ser resolvida através do método iterativo. Esta parte da técnica foi tratada computacionalmente, e os detalhes acerca do algoritmo utilizado, encontram-se neste apêndice. Abaixo apresentamos o fluxograma do **algoritmo da auto-consistência**.

Figura D.1 – Fluxograma do algoritmo da auto-consistência.



Fonte: Elaborado pelo autor.

A caixa quadrada (na cor vermelha) representa o início/fim do programa. A caixa retangular (na cor roxa) representa uma entrada. As caixas quadradas (na cor amarela) fazem menção a algum processo (cálculo). Por fim, a caixa em losango (na cor verde) indica uma decisão (uma condicional como *if-else*)

Este fluxograma pode ser traduzido no pseudo-código a seguir:

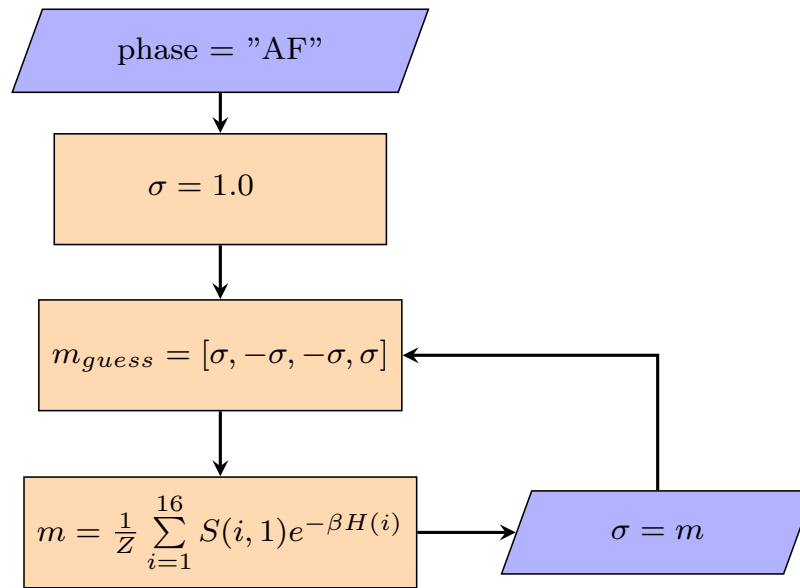
1. Alimentamos o algoritmo com as entradas iniciais. O chute da magnetização¹ m_{guess} . Estabelecemos a tolerância tol desejada, que a depender do problema em questão poderá oscilar de 10^{-6} até valores como 10^{-11} (este foi o caso dos resultados para os saltos da magnetização da Fig. 3.3). Porém, na maior parte do tempo este valor foi $tol = 10^{-8}$. E então, rodamos com os *inputs* da temperatura T , da intensidade do campo magnético h , dos termos de acoplamento J_2 e J_3 entre segundos e terceiros vizinhos, respectivamente. O termo de escala foi considerado como $J_1 = 1$.
2. Calculamos a função de partição Z e a magnetização m . A hamiltoniana H depende do chute da magnetização m_{guess} . A soma percorre todas as 2^{n_s} configurações, onde n_s é o número de sítios do cluster.
3. Calculamos a diferença (erro) entre o chute inicial e o valor calculado no processo anterior, atribuindo o respectivo valor para a variável *error*.
4. Se o erro exceder a tolerância, ou em outras palavras, o erro foi maior que a tolerância, atualizamos o chute, m_{guess} recebe m , que foi calculado no passo 2. Repetimos o procedimento do passo 2 até que o erro esteja seja menor que a tolerância.

No caso clássico, o chute da magnetização correspondia ao primeiro elemento do *array* m , que armazenava as variáveis de *spins* do cluster central. Cada fase tinha um *array* associado pelo seu parâmetro de ordem, conforme as equações (2.31), Eq. (2.32) e Eq. (2.33), para as fases AF, SAF e SD, respectivamente. A construção desse *array* se deu de tal forma que o primeiro elemento fosse sempre positivo. Dessa forma, o **chute inicial** m_{guess} era sempre feito igual a um para uma fase ordenada e igual a zero para a fase PM.

Na prática, calculávamos apenas a magnetização do primeiro sítio, e os demais sítios fixos fixados pela simetria. Em outras palavras, ao determinar a fase, por exemplo, AF, estabelecíamos o chute inicial $\sigma = 1.0$, e então escrevíamos o vetor m_{guess} em termos dessa variável σ . Realizávamos o cálculo da magnetização para o sítio 1, percorrendo os 16 estados acessíveis. E então, caso fosse necessário, substituíamos a variável σ pela magnetização calculada e atualizávamos o vetor m_{guess} com base no cálculo da magnetização do primeiro sítio. Conforme é mostrado na Fig. D.2 para o caso clássico, onde $H(i)$ é um *array* unidimensional que armazena as 16 configurações da hamiltoniana. O *array* $S(i, j)$ é uma matriz de dimensão 16×4 , que armazena a base de *spins* para os quatro sítios do cluster, conforme exibido de forma simplificada na Eq. (D.1). A i -ésima linha corresponde a configuração n_c , a j -ésima coluna corresponde ao sítio n_s .

¹*guess* do inglês, chute (suposição).

Figura D.2 – Fixação da simetria nas suposições da magnetização no processo iterativo.



Fonte: Elaborado pelo autor.

$$\mathcal{S}(n_c, n_s) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}. \quad (\text{D.1})$$

APÊNDICE E – BIBLIOTECA LAPACK

Neste trabalho, fizemos uso da biblioteca LAPACK ©1992-2013©2000-2013 ©2006-2013 . LAPACK é uma biblioteca desenvolvida para a linguagem FORTRAN, direcionada para cálculos de álgebra linear e distribuída gratuitamente. A razão de utilizar essa biblioteca foi a praticidade de ter ótimas rotinas prontas. Destas, utilizamos a rotina *dsyev* para diagonalizar a matriz hamiltoniana. Para isso, calculamos seus autovalores e autovetores correspondentes, conforme abordamos na Eq. (B.6).

Como há pouco material relacionado com a instalação e utilização de bibliotecas FORTRAN, discutiremos brevemente a instalação da biblioteca LAPACK e o uso da sub-rotina *dsyev*.

E.1 – INSTALAÇÃO DA BIBLIOTECA

Nesta seção, mostramos como instalar corretamente a biblioteca LAPACK e BLAS (temos que instalar esta biblioteca também) e como compilá-las, quando utilizadas em um programa FORTRAN.

1. Primeiramente, atualizamos o sistema

Listing E.1: Atualizações dos pacotes em distribuições Linux Ubuntu.

```
1 $ sudo apt update && sudo apt upgrade -y
2
```

Fonte: Adaptado da internet.

2. Então para instalar a biblioteca, digitamos no terminal:

Listing E.2: Instalação dos pacotes **blas** e **lapack**.

```
1 $ sudo apt install libblas-dev liblapack-dev
2
```

Fonte: Site Askubuntu.

Agora com a biblioteca devidamente instalada, toda vez que formos utilizar alguma sub-rotina desta biblioteca, basta chamá-la no código como se estivéssemos chamando uma sub-rotina qualquer. Já no terminal, para compilarmos um programa FORTRAN que faça uso dessa biblioteca, devemos adicionar as seguintes *flags* na compilação:

Listing E.3: Compilação de um programa que utiliza a biblioteca *blas* e *lapack*.

```
1 $ gfortran name_file.f90 -lblas -llapack
```

Fonte: Documentação da biblioteca.

E.2 – A SUB-ROTINA DSYEV

Podemos utilizar a sub-rotina `dsyev` para diagonalizar **matrizes simétricas** apenas. As variáveis desta sub-rotina são:

```
dsyev(JOBZ, UPLO, N, A, LDA, W, WORK, LWORK, INFO) .
```

Onde:

- JOBZ é do tipo CHARACTER(LEN=1)
 - 'N': Computa apenas os autovalores;
 - 'V': Computa os autovalores e autovetores.
- UPLO é CHARACTER(LEN=1)
 - 'U': Será armazenada a parte triangular superior da matriz A;
 - 'L': Será armazenada a parte triangular inferior da matriz A.
- N é INTEGER
 - É o tamanho da matriz $N \times N$ de uma matriz $A_{N \times N}$.
- A é a matriz de dupla precisão, DIMENSION(LDA, N)
 - Na entrada, a matriz A deve ser simétrica.
 - Se UPLO = 'U', a parte triangular superior $N \times N$ inicial de A contém a parte triangular superior da matriz A.
 - Se UPLO = 'L', a parte superior $N \times N$ inicial N parte triangular inferior de A conterà a parte triangular inferior da matriz A.
 - Na saída, se JOBZ = 'V', então se INFO = 0, A contém os autovetores ortonormais da matriz A.
 - Se JOBZ = 'N', então na saída do triângulo inferior (se UPLO='L') ou superior triângulo (se UPLO='U') de A, incluindo a diagonal, é destruído.
- LDA é INTEGER

- A dimensão principal da matriz A . $LDA \geq \max(1, N)$.
- W é um vetor unidimensional de dupla precisão, $\text{DIMENSION}(N)$
 - Se $\text{INFO} = 0$, os autovalores serão apresentados em ordem crescente.
- WORK é um *array* de dupla precisão, $\text{DIMENSION}(\text{MAX}(1, \text{LWORK}))$
 - Na saída, se $\text{INFO} = 0$, $\text{WORK}(1)$ retorna o LWORK ideal.
- LWORK é `INTEGER`
 - O comprimento da matriz WORK . $\text{LWORK} \geq \max(1, 3*N-1)$.
 - Para eficiência ideal, $\text{LWORK} \geq (\text{NB}+2)*N$, onde NB é o tamanho do bloco para `DSYTRD` retornado por `ILAENV`.
 - Se $\text{LWORK} = -1$, uma consulta de espaço de trabalho é assumida; a rotina calcula apenas o tamanho ideal do array WORK , retorna esse valor como a primeira entrada do array WORK , e nenhuma mensagem de erro relacionada ao LWORK é emitida pelo `XERBLA`.
- INFO é `INTEGER`
 - $= 0$: saída bem sucedida.
 - < 0 : se $\text{INFO} = -i$, o i -ésimo argumento tinha um valor ilegal.
 - > 0 : se $\text{INFO} = i$, o algoritmo não convergiu; i elementos fora da diagonal de uma forma tridiagonal intermediária não convergiram para zero.

Para mais informações, consulte a documentação.

E.3 – DIAGONALIZAÇÃO DE UMA MATRIZ

Agora vamos utilizar a sub-rotina `dseyev` para diagonalizar uma matriz simétrica 3×3 , como segue abaixo:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & -2 & 4 \\ -2 & 6 & 2 \\ 4 & 2 & 3 \end{pmatrix} \quad (\text{E.1})$$

Primeiro, calculamos os autovalores e autovetores desta matriz através do programa "testeDiagonalization" em FORTRAN 90 com algumas funcionalidades de FORTRAN 2003.

Listing E.4: Código para calcular os autovalores e autovetores de uma matriz.

```

1 program testeDiagonalization
2   implicit none
3   integer, parameter :: dim = 3, db = 8
4   real(KIND=db), dimension(dim,dim) :: A
5   !!!! Para diagonalizar !!!!!
6   character(len=1) :: JOBZ, UPLO
7   integer :: N, LDA, INFO, lwork
8   integer, parameter :: LWMAX = 1000
9   real(KIND=db), dimension(dim) :: W
10  real(kind=db), dimension(LWMAX) :: WORK
11
12  A = reshape([3.,-2.,4.,-2.,6.,2.,4.,2.,3.], [dim,dim])
13
14  !Consulte o espaço de trabalho ideal.
15  JOBZ = 'V'; UPLO = 'U'
16  N = dim; LDA = dim; lwork = -1
17
18  call dsyev(JOBZ, UPLO, N, A, LDA, W, WORK, LWMAX, INFO)
19
20  LWMAX = MIN(LWMAX, INT(WORK(1)))
21
22  !Resolvendo o problema de autovalores.
23  call dsyev(JOBZ, UPLO, N, A, LDA, W, WORK, LWMAX, INFO)
24
25  !Checando a convergência.
26  if ( info > 0 ) then
27      write(*,*) 'O algoritmo falhou em encontrar os autovalores'
28      stop
29  end if
30
31  !Print autovalores.
32  call print_matrix('eigenvalues', 1, n, w, 1)
33
34  !Print autovetores.
35  call print_matrix('Eigenvectors', n, n, A, LDA)
36 end program testeDiagonalization
37
38 subroutine print_matrix(desc, m, n, a, LDA)
39   implicit none
40   integer, parameter :: db = 8
41   character(len=*), intent(in) :: desc
42   integer, intent(in) :: m,n, lda
43   real(kind=db), dimension(LDA,*), intent(in) :: A
44   integer :: i,j
45
46   write(*,*) desc

```

```

47  do i = 1, m
48      write(*,20) (A(i,j), j=1,n)
49  end do
50  20 format(3(F6.2))
51  end subroutine

```

Fonte: Adaptado da documentação presente no site da Intel.

E então, para compilar devemos incluir no terminal as *flags* **lblas** e **llapack**:

Listing E.5: Compilação do código que calcula os autovalores de uma matriz.

```

1 $ gfortran nameProgramFortran.f90 -lblas -llapack

```

Fonte: Própria do autor.

Este programa nos trará como resultado os autovalores e autovetores da matriz A, como segue abaixo:

Listing E.6: *Print* dos autovalores e autovetores de uma matriz.

```

1  eigenvalues
2  -2.00  7.00  7.00
3  Eigenvectors (stored columnwise)
4   0.67 -0.66  0.35
5   0.33  0.69  0.65
6  -0.67 -0.31  0.68

```

Fonte: Própria do autor.

Agora de posse dos autovalores e autovetores, podemos diagonalizar a matriz A através do seguinte *script*:

Listing E.7: Código para diagonalizar uma matriz.

```

1  program matrixDiagonal
2      implicit none
3      integer, parameter :: dim = 3, db = 8
4      real(KIND=db), dimension(dim,dim) :: A, P, A_diagonal
5      !!!! Para diagonalizar !!!!!
6      character(len=1) :: JOBZ, UPLO
7      integer :: N, LDA, INFO, lwork
8      integer, parameter :: LWMAX = 1000
9      real(KIND=db), dimension(dim) :: W
10     real(kind=db), dimension(LWMAX) :: WORK
11
12     A = reshape([1.,-3.,0.,-3.,-1.,4.,0.,4.,6.], [dim,dim])
13     P = A

```

```

14
15 JOBZ = 'V'; UPLO = 'U'
16 N = dim; LDA = dim; lwork = -1
17
18 call dsyev(JOBZ, UPLO, N, P, LDA, W, WORK, LWORK, INFO)
19
20 LWORK = MIN(LWMAX, INT(WORK(1)))
21
22 call dsyev(JOBZ, UPLO, N, P, LDA, W, WORK, LWORK, INFO)
23
24 if ( info > 0 ) then
25     write(*,*) 'O algoritmo falhou em encontrar os autovalores'
26     stop
27 end if
28
29 call decompSpectral(dim, A, P, A_diagonal)
30
31 write(*,*) 'Matriz A'
32 call print_matrix(dim, dim, A)
33
34 write(*,*)
35 write(*,*) 'Autovalores da matriz A'
36 call print_matrix(1, n, w)
37
38 write(*,*)
39 write(*,*) 'Matriz P'
40 call print_matrix(dim, dim, P)
41
42 write(*,*)
43 write(*,*) 'Matriz A diagonalizada'
44 call print_matrix(dim, dim, A_diagonal)
45 end program matrixDiagonal
46
47 subroutine print_matrix(row, colum, A)
48     implicit none
49     integer, intent(in) :: row, colum
50     real(kind=8), dimension(row,*), intent(in) :: A
51     integer :: i,j
52
53     do i = 1, row
54         write(*,20) (A(i,j), j=1,colum)
55     end do
56     20 format(3(1X, F6.2))
57 end subroutine
58
59 subroutine decompSpectral(dim, A, P, matrixDiagonal)
60     implicit none

```

```

61  !Inputs
62  integer, parameter :: db = 8
63  integer, intent(in) :: dim
64  real(kind=db), dimension(dim,dim), intent(in) :: P, A
65  real(kind = db), dimension(dim, dim), intent(out) :: matrixDiagonal
66  !Variables
67  real(kind = db), dimension(dim,dim) :: AP
68
69  AP = matmul(A, P)
70  matrixDiagonal = matmul(transpose(P), AP)
71 end subroutine

```

Fonte: Própria do autor.

Através destes programas conseguimos obter a matriz P , que juntamente com sua transposta ($P^T = P^{-1}$) é capaz de diagonalizar a matriz A . Dessa forma, obtemos finalmente a matriz A diagonalizada, abaixo:

$$P = \begin{pmatrix} -0.47 & 0.86 & -0.19 \\ -0.82 & -0.35 & 0.45 \\ 0.32 & 0.37 & 0.87 \end{pmatrix}, \quad P^T A P = \begin{pmatrix} -4.27 & 0.00 & 0.00 \\ 0.00 & 2.21 & 0.00 \\ 0.00 & 0.00 & 8.06 \end{pmatrix}. \quad (\text{E.2})$$