

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS
INSTITUTO DE FÍSICA E MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

MATEUS BARCELLOS DA SILVA

**EFEITO DE CAMPOS MAGNÉTICOS ALEATÓRIOS NA REDE DE
ISING TRIANGULAR FRUSTRADA**

Pelotas
2024

Mateus Barcellos da Silva

**EFEITO DE CAMPOS MAGNÉTICOS ALEATÓRIOS NA REDE DE
ISING TRIANGULAR FRUSTRADA**

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

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

Coorientador: Prof. Dr. Fábio Mallmann Zimmer

Pelotas

2024

Universidade Federal de Pelotas / Sistema de Bibliotecas
Catalogação da Publicação

S586e Silva, Mateus Barcellos da

Efeito de campos magnéticos aleatórios na rede de Ising triangular frustrada [recurso eletrônico] / Mateus Barcellos da Silva ; Carlos Alberto Vaz de Moraes Júnior, orientador ; Fábio Mallmann Zimmer, coorientador. — Pelotas, 2024.
104 f. : il.

Dissertação (Mestrado) — Programa de Pós-Graduação em Física, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, 2024.

1. Modelo de Ising antiferromagnético. 2. Platôs na magnetização. 3. Campos magnéticos aleatórios. 4. Rede triangular bidimensional. I. Moraes Júnior, Carlos Alberto Vaz de, orient. II. Zimmer, Fábio Mallmann, coorient. III. Título.

CDD 538.3

Mateus Barcellos da Silva

EFEITO DE CAMPOS MAGNÉTICOS ALEATÓRIOS NA REDE DE ISING TRIANGULAR FRUSTRADA

Dissertação aprovada como requisito para a obtenção do grau de Mestre em Física, no Programa de Pós-Graduação em Física (IFM), Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas (UFpel).

Data da defesa: 6 de dezembro de 2024.

Documento assinado digitalmente
 **CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR**
Data: 16/12/2024 14:40:01-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Carlos Alberto Vaz de Moraes Junior (UFpel)

Documento assinado digitalmente
 **FABIO MALLMANN ZIMMER**
Data: 16/12/2024 11:54:18-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Fábio Mallmann Zimmer (UFMS)

Documento assinado digitalmente
 **MATEUS SCHMIDT**
Data: 16/12/2024 10:11:36-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Mateus Schmidt (UFMS)

Documento assinado digitalmente
 **JOSE RAFAEL BORDIN**
Data: 16/12/2024 14:33:38-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. José Rafael Bordin (UFpel)

Documento assinado digitalmente
 **FABIO TEIXEIRA DIAS**
Data: 16/12/2024 14:24:34-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Fábio Teixeira Dias (UFpel)

Pelotas
2024

Em memória de Luiz Carlos Cassahi Barcellos, minha eterna gratidão.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao programa de pós-graduação do Departamento de Física e Matemática (IFM) da Universidade Federal de Pelotas (UFPel) e ao Grupo Teórico-Computacional de Matéria Condensada (GTCMC) por fornecer a estrutura para execução desta dissertação de mestrado; a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela concessão de uma bolsa, sem a qual esta pesquisa não seria possível.

Expresso, também, minha gratidão as pessoas que acompanharam-me durante os anos que estive como estudante de mestrado na UFPel: meus pais, Tania e Renato, agradeço por seu apoio incondicional; meus professores, Dr. Carlos Alberto Vaz de Moraes Junior e Dr. Fábio Mallmann Zimmer, agradeço pelo comprometimento na orientação; minha companheira, Érica, agradeço por seu amor; meus amigos, Ezequiel, Felipe, Davi, Nicolas e Arthur agradeço por compartilharem comigo momentos de genuína amizade.

RESUMO

SILVA, M. B. **Efeito de campos magnéticos aleatórios na rede de Ising triangular frustrada**. 2024. 104p. Dissertação (Mestrado em Física) - Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2024.

Esta dissertação tem como objetivo investigar o fenômeno de platôs na magnetização no modelo de Ising antiferromagnético em redes triangulares bidimensionais, com ênfase no efeito combinado de campos magnéticos aleatórios e uniformes. Enquanto o modelo de Ising sob campo magnético uniforme já prevê a existência de um platô na curva de magnetização, estendemos a análise para considerar os possíveis efeitos de campos magnéticos aleatórios que mimetizam efeitos de impurezas que atuam localmente nos sítios da rede. A questão central que orienta este estudo é: até que ponto a aleatoriedade de campos magnéticos locais pode induzir a emergência de novos platôs, modificar os já existentes ou, inversamente, suprimir a formação desses platôs? Para responder a essa pergunta, adotamos uma metodologia baseada na enumeração exata da função de partição para *clusters* de diferentes tamanhos de rede (3, 6, 9 e 15 sítios) e na aproximação de campo médio com *clusters*. Os campos magnéticos aleatórios foram modelados utilizando duas distribuições de probabilidade discretas e simétricas: a bimodal e a trimodal, escolhidas por sua simplicidade e viabilidade analítica. Analisamos as propriedades magnéticas fundamentais, tais como magnetização, susceptibilidade magnética e entropia magnética, sob a influência simultânea dos campos magnéticos aleatórios e do campo magnético uniforme. Os resultados indicam que a desordem introduzida pelos campos magnéticos aleatórios pode, de fato, contribuir para o surgimento de platôs adicionais na magnetização, fragmentando os platôs já existentes. Observamos que o número e a posição desses platôs dependem tanto da distribuição de probabilidade dos campos aleatórios quanto de sua intensidade. Além disso, verificamos que a desordem afeta significativamente as quantidades termodinâmicas estudadas, em particular a entropia magnética, que apresentou máximos locais na região crítica dos platôs. Esses achados sugerem que os campos magnéticos aleatórios podem ser utilizados como um mecanismo de fragmentação de platôs na magnetização, trazendo luz à compreensão dos efeitos combinados de frustração geométrica e desordem no sistema estudado. Esses resultados são promissores para estudos futuros, incluindo extensões para o efeito magnetocalórico que, na região de campo crítico dos platôs, exibe máximos locais na entropia magnética, bem como para sistemas antiferromagnéticos diluídos com íons não magnéticos.

Palavras-chave: Modelo de Ising antiferromagnético. Platôs na magnetização. Campos magnéticos aleatórios. Rede triangular bidimensional.

ABSTRACT

SILVA, M. B. **Effect of random magnetic fields on the frustrated triangular Ising lattice.** 2024. 104p. Master's dissertation – Graduate Program in Physics, Federal University of Pelotas, Pelotas, 2024.

This dissertation aims to investigate the phenomenon of magnetization plateaus in the two-dimensional triangular lattice antiferromagnetic Ising model, with emphasis on the combined effect of random and uniform magnetic fields. While the Ising model under a uniform magnetic field already predicts the existence of a plateau in the magnetization curve, we extend the analysis to consider the possible effects of random magnetic fields that mimic the effects of impurities acting locally on the lattice sites. The central question guiding this study is: to what extent can the randomness of local magnetic fields induce the emergence of new plateaus, modify existing ones, or, conversely, suppress the formation of these plateaus? To answer this question, we adopted a methodology based on the exact enumeration of the partition function for clusters of different lattice sizes (3, 6, 9, and 15 sites) and on the cluster mean-field approximation. The random magnetic fields were modeled using two discrete and symmetric probability distributions: the bimodal and the trimodal, chosen for their simplicity and analytical feasibility. We analyzed the fundamental magnetic properties, such as magnetization, magnetic susceptibility, and magnetic entropy, under the simultaneous influence of random magnetic fields and a uniform magnetic field. The results indicate that the disorder introduced by random magnetic fields can indeed contribute to the emergence of additional plateaus in the magnetization, fragmenting the existing plateaus. We observed that the number and position of these plateaus depend on both the probability distribution of the random fields and their intensity. Furthermore, we verified that the disorder significantly affects the thermodynamic quantities studied, particularly the magnetic entropy, which exhibited local maxima in the critical region of the plateaus. These findings suggest that random magnetic fields can be used as a mechanism for plateau fragmentation in magnetization, shedding light on the understanding of the combined effects of geometric frustration and disorder in the studied system. These results are promising for future studies, including extensions to the magnetocaloric effect, which, in the critical field region of the plateaus, exhibits local maxima in magnetic entropy, as well as for diluted antiferromagnetic systems with non-magnetic ions.

Keywords: Antiferromagnetic Ising model. Magnetization plateaus. Random magnetic fields. Two-dimensional triangular lattice.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1	– Representação das fases magnéticas da matéria: ferromagnética (esquerda); paramagnética (centro); antiferromagnética (direita).	28
Figura 2	– Esquema de um <i>cluster</i> com geometria triangular e interações antiferromagnéticas entre <i>spins</i> que são primeiros vizinhos.	29
Figura 3	– Esquema de um <i>cluster</i> com geometria quadrada e interações antiferromagnéticas entre <i>spins</i> que são primeiros vizinhos.	29
Figura 4	– Magnetização (μ_B por Fe^{3+}) em função do campo magnético externo (T) para o material de composição $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ de rede triangular antiferromagnética. Valor de referência: $T = 1,3 \text{ K}$	30
Figura 5	– Magnetização em função do campo magnético uniforme para um antiferromagneto de rede triangular a luz do modelo de Ising. Gráfico (a) rede com 27 sítios. Gráfico (b) rede na extrapolação para o limite termodinâmico. . .	31
Figura 6	– Magnetização em função do campo magnético externo para diferentes valores X de diluição com íons não magnéticos. O sistema é uma rede triangular antiferromagnética com 9216 sítios, e resolvido a luz do modelo de Ising via método de Monte Carlo.	32
Figura 7	– Máquina térmica: demonstração do ciclo termodinâmico de refrigeração magnética por meio da desmagnetização adiabática.	33
Figura 8	– Estrutura do composto $\text{CsCo}_{0,83}\text{Mg}_{0,17}\text{Br}_3$, que apresenta uma rede triangular antiferromagnética com substituição de íons Co por Mg não magnéticos. . .	36
Figura 9	– Energia de cada configuração de <i>spin</i> da rede triangular com três sítios a luz do modelo de Ising com campo magnético uniforme.	38
Figura 10	– Energia das configurações de <i>spin</i> em função do campo magnético uniforme adimensional ($h/ \mathcal{J} $).	39
Figura 11	– Magnetização por sítio (m) como função do campo uniforme (h) normalizado pela constante de interação ($\mathcal{J}$). O tamanho do sistema é $N = 3$	40
Figura 12	– Gráfico da distribuição bimodal (gráfico à esquerda) e trimodal (gráfico à direita).	46
Figura 13	– As redes triangulares estão organizadas conforme o número de sítios com 3, 6, 9 e 15 sítios, respectivamente.	47
Figura 14	– Representação do sistema na aproximação de campo médio com clusters de geometria triangular com três sítios.	50
Figura 15	– Magnetização ($\mathcal{M}$) em função do campo magnético uniforme ($h/ \mathcal{J} $). Gráfico: distribuição bimodal (linha vermelha) e a distribuição trimodal (linha azul). Valores de referência: $T/ \mathcal{J} = 0,000001$, $h_0/ \mathcal{J} = 0,5$ e $ \mathcal{J} = 1$. . .	53

- Figura 16 – Magnetização ($\mathcal{M}$) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) para ausência de campos magnéticos aleatórios. Valores de referência: $T/|\mathcal{J}| = 0,000001$, $h_0/|\mathcal{J}| = 0$ e $|\mathcal{J}| = 1$ 54
- Figura 17 – Em (a) o gráfico m vs $h/|\mathcal{J}|$ para cada configuração de campos magnéticos aleatórios. Em (b) o gráfico M vs $h/|\mathcal{J}|$. Para ambos os casos, a rede é a triangular com três sítios, onde os campos magnéticos aleatórios seguem a distribuição bimodal. Valores de referência: $T/|\mathcal{J}| = 0,000001$, $h_0/|\mathcal{J}| = 0,5$ e $|\mathcal{J}| = 1$ 56
- Figura 18 – Para um *cluster* de geometria triangular com três sítios: (a) gráfico da energia interna (u) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) para cada configuração de campos magnéticos aleatórios; (b) gráfico energia interna ($\mathcal{U}$) por sítio e por desordem em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$). A distribuição de probabilidades para os campos magnéticos aleatórios é a bimodal. Valores de referência: $T/|\mathcal{J}| = 0,000001$, $h_0/|\mathcal{J}| = 0,5$ e $|\mathcal{J}| = 1$. 58
- Figura 19 – Gráficos da magnetização ($\mathcal{M}$) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) para diferentes intensidades de campos magnéticos aleatórios ($h_0/|\mathcal{J}|$) que seguem a distribuição bimodal na rede triangular antiferromagnética com três sítios. Valores de referência: $T/|\mathcal{J}| = 0,000001$ e $|\mathcal{J}| = 1$ 59
- Figura 20 – Gráficos da magnetização ($\mathcal{M}$) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) para diferentes intensidades de campos magnéticos aleatórios ($h_0/|\mathcal{J}|$) que seguem a distribuição trimodal na rede triangular antiferromagnética com três sítios. Valores de referência: $T/|\mathcal{J}| = 0,000001$ e $|\mathcal{J}| = 1$ 60
- Figura 21 – Magnetização por sítio ($\mathcal{M}$), campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) e intensidade dos campos magnéticos aleatórios ($h_0/|\mathcal{J}|$) para uma rede triangular antiferromagnética com três sítios. Vamos considerar uma análise separada para (a) distribuição bimodal e (b) distribuição trimodal de campos magnéticos aleatórios. Valores de referência: $T/|\mathcal{J}| = 0,000001$ e $|\mathcal{J}| = 1$ 61
- Figura 22 – Magnetização ($\mathcal{M}$), campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) e temperatura ($T/|\mathcal{J}|$). Gráfico: ausência de campos magnéticos aleatórios (gráficos em linha pontilhada), distribuição bimodal (gráficos em vermelho) e distribuição trimodal (gráficos em azul) de campos magnéticos aleatórios. Valor de referência: $h_0/|\mathcal{J}| = 0,5$ e $|\mathcal{J}| = 1$ 62
- Figura 23 – Susceptibilidade magnética ($\mathcal{X}$) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) para ausência de campos magnéticos aleatórios. Valores de referência: $h_0/|\mathcal{J}| = 0,0$, $T/|\mathcal{J}| = 0,1$ (linha azul), $T/|\mathcal{J}| = 0,2$ (linha amarela), $T/|\mathcal{J}| = 0,3$ (linha verde), $T/|\mathcal{J}| = 0,5$ (linha laranja) e $|\mathcal{J}| = 1$ 63

Figura 24 – Susceptibilidade magnética (χ) em função do campo magnético uniforme ($h/ \mathcal{J} $). Gráfico: distribuição bimodal (acima) e distribuição trimodal (abaixo). Valores de referência: $h_0/ \mathcal{J} = 0,5$, $T/ \mathcal{J} = 0,1$ (linha azul), $T/ \mathcal{J} = 0,2$ (linha amarela), $T/ \mathcal{J} = 0,3$ (linha verde), $T/ \mathcal{J} = 0,5$ (linha laranja) e $ \mathcal{J} = 1$	64
Figura 25 – Entropia magnética ($\mathcal{S}$) em função do campo magnético uniforme ($h/ \mathcal{J} $) para ausência de campos magnéticos aleatórios. Valores de referência: $h_0/ \mathcal{J} = 0,0$, $T/ \mathcal{J} = 0,1$ (linha azul), $T/ \mathcal{J} = 0,2$ (linha amarela), $T/ \mathcal{J} = 0,3$ (linha verde), $T/ \mathcal{J} = 0,5$ (linha laranja) e $ \mathcal{J} = 1$	65
Figura 26 – Entropia magnética ($\mathcal{S}$) em função do campo magnético uniforme ($h/ \mathcal{J} $). Gráfico: distribuição bimodal (acima) e distribuição trimodal (abaixo). Valores de referência: $h_0/ \mathcal{J} = 0,5$, $T/ \mathcal{J} = 0,1$ (linha azul), $T/ \mathcal{J} = 0,2$ (linha amarela), $T/ \mathcal{J} = 0,3$ (linha verde), $T/ \mathcal{J} = 0,5$ (linha laranja) e $ \mathcal{J} = 1$	66
Figura 27 – Magnetizações locais (m) em função da temperatura ($T/ \mathcal{J} $) para ausência de campos magnéticos. As linhas vermelhas, pretas e azuis representam as magnetizações m_1 , m_2 e m_3 respectivamente. Valor de referência: $ \mathcal{J} = 1$	67
Figura 28 – Magnetizações locais (m) em função da temperatura ($T/ \mathcal{J} $) com campo magnético uniforme. As linhas vermelhas, pretas e azuis representam as magnetizações m_1 , m_2 e m_3 respectivamente. Valor de referência: $ \mathcal{J} = 1$	68
Figura 29 – Magnetizações locais (m) em função da temperatura ($T/ \mathcal{J} $) com campos magnéticos aleatórios. Gráfico: distribuição bimodal (a esquerda) e distribuição trimodal (a direita). As linhas vermelhas, pretas e azuis representam as magnetizações m_1 , m_2 e m_3 respectivamente. Valor de referência: $ \mathcal{J} = 1$	68
Figura 30 – Magnetizações locais (m) em função da temperatura ($T/ \mathcal{J} $) quando ambos, o campo magnético uniforme e os campos magnéticos aleatórios, são considerados. Gráfico: distribuição bimodal (a) e distribuição trimodal (b). Valor de referência: $ \mathcal{J} = 1$	69
Figura 31 – Magnetização ($\mathcal{M}$) em função do campo magnético uniforme ($h/ \mathcal{J} $) via aproximação de campo médio com <i>clusters</i> . Gráfico: (a) ausência de campos magnéticos aleatórios, (b) campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição bimodal e (c) campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição trimodal. Valores de referência: $h_0/ \mathcal{J} = 0,5$, $T/ \mathcal{J} = 0,1$ e $ \mathcal{J} = 1$	69

Figura 32 – Susceptibilidade magnética (χ) em função do campo magnético uniforme ($h/ \mathcal{J} $) via aproximação de campo médio com <i>clusters</i> . Gráfico: (a) ausência de campos magnéticos aleatórios, (b) campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição bimodal e (c) campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição trimodal. Valores de referência: $h_0/ \mathcal{J} = 0,0$, $h_0/ \mathcal{J} = 0,5$, $T/ \mathcal{J} = 0,1$ e $ \mathcal{J} = 1$	70
Figura 33 – Entropia magnética (S) em função do campo magnético uniforme ($h/ \mathcal{J} $) via aproximação de campo médio com <i>clusters</i> . Gráfico: (a) ausência de campos magnéticos aleatórios, (b) campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição bimodal e (c) campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição trimodal. Valores de referência: $h_0/ \mathcal{J} = 0,0$, $h_0/ \mathcal{J} = 0,5$, $T/ \mathcal{J} = 0,1$ e $ \mathcal{J} = 1$	71
Figura 34 – Fluxograma para o Programa 1 que faz o cálculo da energia livre e magnetização por sítio e por desordem.	79
Figura 35 – Fluxograma da subrotina que armazena as possíveis configurações de <i>spins</i> na rede.	80
Figura 36 – Fluxograma da subrotina que contabiliza todas as interações entre <i>spins</i> na rede	81
Figura 37 – Fluxograma da subrotina que armazena os <i>spins</i> vizinhos para rede triangular.	82
Figura 38 – Fluxograma da subrotina que armazena os <i>spins</i> vizinhos para rede triangular com três sítios.	83
Figura 39 – Fluxograma da subrotina que armazena os <i>spins</i> vizinhos para rede triangular com seis sítios.	84
Figura 40 – Fluxograma da subrotina que armazena os <i>spins</i> vizinhos para rede triangular com nove sítios.	85
Figura 41 – Fluxograma da subrotina que armazena os <i>spins</i> vizinhos para rede triangular com quinze sítios.	86
Figura 42 – Fluxograma subrotina para armazenar as possíveis configurações de campos magnéticos aleatórios.	87
Figura 43 – Fluxograma subrotina para armazenar as possíveis configurações de campos magnéticos aleatórios para distribuição bimodal.	88
Figura 44 – Fluxograma subrotina para calcular a energia por sítio e por desordem. . . .	89
Figura 45 – Fluxograma subrotina para para calcular a energia livre por sítio e por desordem.	90
Figura 46 – Fluxograma subrotina para calcular a função de partição por desordem. . . .	91
Figura 47 – Fluxograma subrotina para calcular a magnetização por sítio e por desordem de campos magnéticos aleatórios.	92
Figura 48 – Fluxograma para o Programa 2 que faz o cálculo da entropia magnética por sítio e por desordem de campos magnéticos aleatórios.	93

Figura 49 – Fluxograma subrotina para calcular a entropia magnética por sítio e por desordem de campos magnéticos aleatórios via método das diferenças finitas centradas.	94
Figura 50 – Fluxograma para o Programa 3 que faz o cálculo da susceptibilidade magnética por sítio e por desordem de campos magnéticos.	95
Figura 51 – Fluxograma subrotina para calcular a susceptibilidade magnética por sítio e por desordem via método das diferenças finitas centradas.	96
Figura 52 – Fluxograma do programa para o cálculo da magnetização por sítio e por desordem de campos magnéticos aleatórios via aproximação de campo médio.	97
Figura 53 – Fluxograma da subrotina getSelfConsistency.	98
Figura 54 – Fluxograma da subrotina getEnergy.	99
Figura 55 – Fluxograma da subrotina getPartitionFunction.	100
Figura 56 – Fluxograma da subrotina getMagnetization.	101
Figura 57 – Fluxograma do programa para o cálculo da susceptibilidade magnética por sítio e por desordem de campos magnéticos aleatórios via aproximação de campo médio.	102
Figura 58 – Fluxograma do programa para o cálculo da entropia magnética por sítio e por desordem de campos magnéticos aleatórios via aproximação de campo médio.	103
Figura 59 – Fluxograma do programa para o cálculo da entropia magnética por sítio e por desordem de campos magnéticos aleatórios via aproximação de campo médio.	104

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Relação entre o número de sítios e o número de configurações possíveis de campos magnéticos aleatórios.	55
Tabela 2 – Configurações de campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição bimodal para uma rede triangular com três sítios.	55
Tabela 3 – Tabela da média térmica da magnetização por sítio de cada uma das configurações de campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição bimodal.	57

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

FM	Ferromagnetismo
PM	Paramagnetismo
AF	Antiferromagnetismo
DB	Distribuição bimodal
DT	Distribuição trimodal
UFPeI	Universidade Federal de Pelotas
UFMS	Universidade Federal do Mato Grosso do Sul
UFSC	Universidade Federal de Santa Catarina
CAPES	Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior
IFM	Instituto de Física e Matemática
GTCMC	Grupo Teórico-Computacional de Matéria Condensada
<i>FORTTRAN</i>	<i>Formula Translation</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

k_B	Constante de Boltzmann
μ_B	Magneton de Bohr
T	Temperatura
T_C	Temperatura de Curie
T_N	Temperatura de Néel
h	Campo magnético uniforme
σ_i	Variável de <i>spin</i> para o i-ésimo sítio da rede
α_i	Variável de campo magnético aleatório para o i-ésimo sítio da rede
$\{\sigma_i\}$	I-ésima coleção de configuração de <i>spin</i>
$\{\alpha_i\}$	I-ésima coleção de configuração de campos magnéticos aleatórios
E	Energia
$\mathcal{J}$	Constante de interação de troca entre <i>spins</i>
$\mathcal{Z}$	Função de partição
m	Magnetização por número de sítios
χ	Susceptibilidade magnética por número de sítios
s	Entropia magnética por número de sítios
$\mathcal{M}$	Magnetização por número de sítios e por desordem via campos magnéticos aleatórios
$\mathcal{X}$	Susceptibilidade magnética por número de sítios e por desordem via campos magnéticos aleatórios
$\mathcal{S}$	Entropia magnética por número de sítios e por desordem via campos magnéticos aleatórios
$T/ \mathcal{J} $	Energia térmica pelo módulo da constante de interação de troca entre <i>spins</i>
$h/ \mathcal{J} $	Energia Zeeman do campo magnético uniforme pelo módulo da constante de interação de troca entre <i>spins</i>
$h_0/ \mathcal{J} $	Energia Zeeman do campo magnético aleatório pelo módulo da constante de interação de troca entre <i>spins</i>

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	24
2	REFERENCIAL TEÓRICO	28
2.1	Fases magnéticas da matéria	28
2.2	O que é a frustração magnética?	29
2.3	O que são platôs na magnetização?	30
2.4	Efeito da diluição sobre a estrutura de platôs na magnetização	31
2.5	Efeito magnetocalórico	32
2.6	Modelo de Ising	34
2.6.1	Modelo de Ising com campo magnético uniforme	35
2.6.2	Modelo de Ising com campos magnéticos aleatórios	35
2.7	Termodinâmica do modelo de Ising	36
2.7.1	Como são calculadas as médias térmicas?	37
2.8	Técnica da enumeração exata	38
2.8.1	Exemplo: rede triangular (2D) antiferromagnética com três sítios	38
2.9	Princípio variacional via desigualdade de Bogoliubov	40
2.9.1	Exemplo: sistema com <i>spins</i> não interagentes	41
2.9.2	Exemplo: sistema com <i>spins</i> em <i>cluster</i> interagentes	44
3	METODOLOGIA	45
3.1	Técnica da enumeração exata (rede finita)	47
3.2	Aproximação de campo médio com <i>clusters</i> (rede infinita)	48
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	52
4.1	Método: técnica da enumeração exata	52
4.1.1	Magnetização	52
4.1.2	Susceptibilidade magnética	63
4.1.3	Entropia magnética	65
4.2	Método: aproximação de campo médio com <i>clusters</i>	66
4.2.1	Magnetização	67
4.2.2	Susceptibilidade magnética	70
4.2.3	Entropia magnética	71
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	72
	REFERÊNCIAS	74
	APÊNDICE A – FLUXOGRAMAS	79
A.1	Fluxogramas: enumeração exata	79
A.2	Fluxogramas: aproximação de campo médio com <i>clusters</i>	97

1 INTRODUÇÃO

O avanço no entendimento do magnetismo na matéria tem impulsionado o desenvolvimento de diversas aplicações tecnológicas como, por exemplo, em máquinas térmicas (GUT-FLEISCH et al., 2011). Para refrigeração, existem máquinas que operam em um ciclo em que a variação na intensidade de um campo magnético externo é capaz de variar, também, a temperatura (NIRMALA et al., 2015). Isso é possível a partir de um fenômeno conhecido como efeito magnetocalórico (LEE, 2023). Quando um campo magnético é aplicado a um material magnetocalórico, os momentos magnéticos dos átomos se alinham, reduzindo a desordem magnética e liberando energia térmica, o que aumenta a temperatura do material. Essa energia térmica pode ser transferida para um reservatório térmico apropriado, diminuindo a temperatura do material.

A partir disso, ao remover o campo magnético, a desordem magnética aumenta, o material absorve energia térmica do ambiente e sua temperatura diminui para abaixo do valor inicial. Esse ciclo permite a transferência de calor de um reservatório frio para um quente, possibilitando a refrigeração. Assim, temos a chamada refrigeração magnética. Isso é importante para a indústria, pois a refrigeração magnética poderia melhorar o controle de qualidade dos alimentos (ZHAO et al., 2024). No âmbito doméstico, existem protótipos, como, por exemplo, o desenvolvido na UFSC para refrigeração de uma adega de vinhos (NAKASHIMA et al., 2021). Esta é uma tecnologia que pode ser empregada no futuro (ZHANG et al., 2021).

Nesse sentido, é possível afirmar que a busca por materiais capazes de aumentar sua temperatura sob a aplicação de um campo magnético é intensa. Dentre os candidatos promissores, destacam-se os antiferromagnetos com geometria de rede triangular (ANTONIO et al., 2023). Esses materiais possuem uma característica particular: a presença de um platô na magnetização. Os platôs na magnetização são regiões em que a magnetização permanece constante apesar do aumento do campo magnético aplicado, sendo observados para frações racionais da magnetização de saturação em uma variedade de materiais magnéticos quando expostos à variação de um campo magnético externo aplicado. Exatamente no campo magnético crítico de transição para magnetização de saturação que ocorre um efeito magnetocalórico gigante (STREKA et al., 2015).

Um exemplo de material antiferromagnético com platô na magnetização é o $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ (SMIRNOV et al., 2007). Seu platô ocorre para 1/3 da magnetização de saturação. O material possui uma rede triangular antiferromagnética, o que conduz à frustração magnética. A frustração magnética surge devido à geometria da rede, e caracteriza-se por um cenário competitivo no qual as diferentes interações entre momentos magnéticos de *spin* não podem ser satisfeitas simultaneamente (RAMIREZ, 1994). Sua consequência é a degenerescência da energia do estado fundamental, a qual os platôs na magnetização em antiferromagnetos de geometria de rede triangular estão diretamente associados.

Além disso, outro mecanismo que pode influenciar a formação de platôs na magnetização é a diluição. Experimentalmente, Smirnov et al. (2018) demonstraram, através de espectroscopia de ressonância de *spin* eletrônico, que a substituição parcial de rubídio por potássio no

composto $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ resulta no desaparecimento do platô magnético em 1/3 da magnetização. Isso sugere que a desordem local introduzida pela diluição dos sítios da rede triangular antiferromagnética afeta significativamente os platôs de magnetização.

Teoricamente, Soldatov et al. (2019), por meio de simulações de Monte Carlo, propuseram que a diluição com íons não magnéticos pode aumentar o número de platôs em materiais antiferromagnéticos com geometria triangular. As simulações indicam que, mesmo com uma diluição mínima, o sistema originalmente caracterizado por um único platô de magnetização — induzido pela frustração magnética no sistema puro — pode evoluir para apresentar múltiplos platôs. Assim, a diluição em antiferromagnetos triangulares pode desempenhar um papel crucial na fragmentação dos platôs de magnetização, como também observado teoricamente por Yao (2010). Em última análise, a existência de múltiplos platôs na magnetização causados pela desordem via diluição poderia ser explorada, portanto, no contexto do efeito magnetocalórico.

De fato, qualquer cristal contém impurezas, mesmo que, em certo ponto, mínima, sendo uma característica inevitável (CAPELLADES et al., 2022). Qual a consequência disso? Uma pequena quantidade de impureza pode influenciar o comportamento das quantidades termodinâmicas de um material magnético (SCHMIDT et al., 2022). Isto posto, podemos dizer que para obter uma descrição mais próxima da realidade, um modelo (em nosso caso, o modelo de Ising) deve ser modificado adequadamente para atender o maior número de variáveis do problema físico, quando possível. Um exemplo ocorre quando consideramos a existência de um campo magnético que varia aleatoriamente de sítio para sítio da rede para modelar alguma impureza, os chamados campos magnéticos aleatórios (HADJIAGAPIOU, 2010; MORAIS et al., 2016). Como mostrou Akram et al. (2023), assim como na diluição, os campos magnéticos aleatórios poderiam ser interessantes para o desenvolvimento de materiais magnetocalóricos. Assim, a desordem local é caracterizada por uma distribuição de probabilidade específica como, por exemplo, a gaussiana (MAGALHÃES et al., 2011).

Propomos, portanto, avaliar a hipótese de que campos magnéticos aleatórios poderiam modelar a fragmentação de platôs magnéticos em antiferromagnetos — a qual, até então, tem sido associada à diluição com íons não magnéticos. Embora não examinemos essa hipótese em toda a sua abrangência, focaremos nossa análise na rede triangular antiferromagnética bidimensional (2D), escolhida devido à sua extensa exploração na literatura científica. A introdução de campos magnéticos aleatórios nos permitirá realizar comparações significativas com cenários em que esses campos estão ausentes, enriquecendo assim a compreensão dos mecanismos subjacentes à fragmentação de platôs magnéticos.

Dessa forma, podemos demonstrar que a desordem induzida por campos magnéticos aleatórios pode, de forma análoga à diluição com íons não magnéticos, fragmentar os platôs na magnetização é essencial para estabelecer uma conexão significativa entre os fenômenos de frustração magnética – decorrentes da geometria da rede – e a desordem introduzida via campos magnéticos aleatórios.

Isto posto, a pergunta principal que norteia esta pesquisa é: a desordem introduzida por campos magnéticos locais aleatórios pode induzir a emergência de novos platôs magnéticos, modificar os platôs já existentes ou, inversamente, suprimir a formação desses platôs?

Para aprofundar a investigação, formulamos as seguintes perguntas secundárias:

- Qual o comportamento da magnetização?
- Qual o comportamento da susceptibilidade magnética?
- Qual o comportamento da entropia magnética?

O objetivo geral é avaliar a influência da desordem via campos magnéticos aleatórios na rede triangular (2D) antiferromagnética, à luz do modelo de Ising.

Os objetivos específicos são:

- Determinar o comportamento da magnetização como função de campo magnético uniforme;
- Determinar o comportamento da magnetização como função da intensidade dos campos magnéticos aleatórios;
- Determinar o comportamento da magnetização como função da temperatura;
- Determinar o comportamento da susceptibilidade magnética como função de campo magnético uniforme;
- Determinar o comportamento da entropia magnética como função de campo magnético uniforme;

Para alcançar os objetivos propostos, a metodologia desta pesquisa focará na investigação do sistema magnético descrito pelo modelo de Ising sob a influência combinada de campos magnéticos — tanto aleatórios quanto uniformes — em uma rede triangular antiferromagnética bidimensional (2D). Optamos por utilizar campos magnéticos aleatórios com distribuições bimodal e trimodal devido à sua simplicidade. Iremos nos concentrar em possíveis efeitos que esses campos magnéticos aleatórios introduzem no sistema. A metodologia, portanto, está dividida em duas partes: (1) método da enumeração exata (rede finita) com 3, 6, 9 e 15 sítios; (2) método da aproximação de campo médio com *clusters* (rede infinita). Ambos os métodos têm como objetivo examinar o comportamento de quantidades termodinâmicas fundamentais — magnetização, susceptibilidade magnética e entropia magnética — sob a influência combinada de campos magnéticos aleatórios e de um campo magnético uniforme.

Nos capítulos seguintes, a dissertação está estruturada da seguinte forma: o Capítulo 2 apresenta o referencial teórico com os conceitos fundamentais; o Capítulo 3 detalha a metodologia empregada na pesquisa; no Capítulo 4, são apresentados e discutidos os resultados obtidos; o

Capítulo 5 traz as considerações finais, resumindo as principais descobertas desta pesquisa. Por fim, o Apêndice A organiza os fluxogramas dos algoritmos desenvolvidos em *FORTTRAN 95* para o cálculo das quantidades termodinâmicas de interesse.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

2.1 Fases magnéticas da matéria

Nesta seção, discutiremos como o momento magnético de *spin* se configura como a grandeza fundamental para a compreensão dos fenômenos magnéticos na matéria (CALLISTER, 2007). O *spin* é um momento angular intrínseco associado às partículas subatômicas, tais como elétrons, prótons e nêutrons (SAKURAI et al., 2017). Em particular, no caso dos elétrons, a orientação de seu *spin* desempenha um papel central na determinação das propriedades magnéticas dos materiais. Assim, os materiais exibem propriedades magnéticas quando os *spins* dos elétrons em seus átomos (ou moléculas) não se cancelam mutuamente – situação que ocorre em materiais com elétrons desemparelhados em orbitais atômicos (ou moleculares).

Isto posto, um exemplo é o átomo de ferro (Fe) que possui quatro elétrons com *spins* desemparelhados (ATKINS et al., 2018). Essa é uma característica necessária, mas não suficiente para que um material seja considerado magnético, e dizemos, então, que um material é considerado magnético devido à orientação coletiva de seus *spins* desemparelhados (BLUNDELL, 2001). Essa orientação do *spin* ocorre via interações *spin-spin* (ou interações entre *spins*) de elétrons de átomos vizinhos (ou moléculas vizinhas), como visto, por exemplo, na Figura 1.

Figura 1 – Representação das fases magnéticas da matéria: ferromagnética (esquerda); paramagnética (centro); antiferromagnética (direita).



Fonte: adaptado de Blundell (2001).

Podemos compreender as interações entre *spins* descritas acima como:

- Fase ferromagnética: orientação paralela entre os *spins* de átomos vizinhos mais próximos (ou moléculas vizinhas);
- Fase paramagnética: orientação aleatória entre os *spins* de átomos vizinhos mais próximos (ou moléculas vizinhas);
- Fase antiferromagnética: orientação antiparalela entre os *spins* de átomos vizinhos mais próximos (ou moléculas vizinhas);

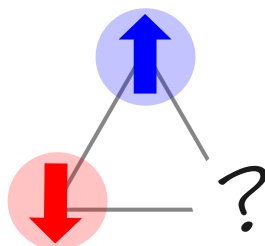
A orientação dos *spins*, conforme Kittel (2004), pode ser perturbada via interação Zeeman, isto é, o material está sob a influência de um campo magnético externo, bem como pela variação da temperatura. Ao analisar um material sob variação de um campo magnético ou temperatura, podemos observar assinaturas gráficas em quantidades termodinâmicas como, por exemplo, na magnetização e susceptibilidade magnética (BLUNDELL, 2001).

2.2 O que é a frustração magnética?

Nesta seção, apresentamos o fenômeno da frustração magnética que é muito importante no magnetismo na matéria (JURCISINOVA et al., 2024). Em sistemas magnéticos, a saber, os *spins* procuram se alinhar em uma configuração que minimiza a energia total do sistema (NISHIMORI, 2001). No entanto, em certos casos, há uma competição nas interações magnéticas, que impede o sistema de encontrar uma configuração única de menor energia. Esse tipo de competição é o que chamamos de frustração magnética.

A competição entre *spins* em um cristal magnético pode ocorrer, por exemplo, devido à geometria de sua rede. Isso fica claro no exemplo da Figura 2 de um material (em geral, um cristal) com geometria de rede triangular de um antiferromagneto. Ao considerar as interações antiferromagnéticas, cada *spin* tem uma tendência energética a se alinhar de forma antiparalela com seus vizinhos mais próximos, mas a geometria da rede impede que todas essas interações sejam satisfeitas simultaneamente. Isso faz com que exista uma variedade de configurações de *spin* para o estado fundamental.

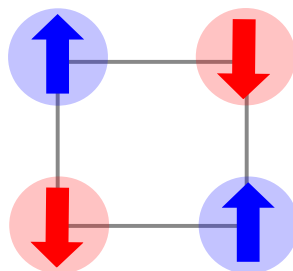
Figura 2 – Esquema de um *cluster* com geometria triangular e interações antiferromagnéticas entre *spins* que são primeiros vizinhos.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Pode-se ver na Figura 3 que a rede quadrada, porém, permite uma solução mais simples para o problema de alinhamento de *spins* em um cristal. Isso porque, em uma rede quadrada, os *spins* sempre podem se alinhar de maneira antiparalela com todos os seus vizinhos mais próximos, o que faz com que exista um estado fundamental único, onde a energia do sistema é minimizada.

Figura 3 – Esquema de um *cluster* com geometria quadrada e interações antiferromagnéticas entre *spins* que são primeiros vizinhos.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

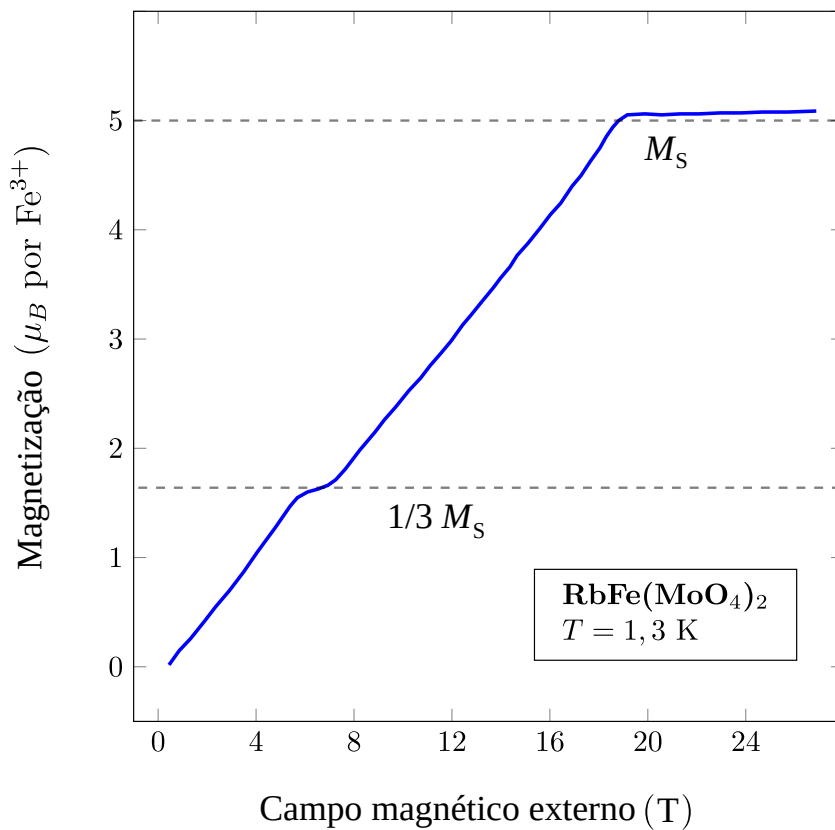
O ponto central é que a frustração magnética via geometria da rede provoca a degenerescência do estado fundamental. A implicação disso é que cristais antiferromagnéticos com

rede de geometria triangular podem apresentar um comportamento magnético exótico quando expostos a um campo magnético externo aplicado.

2.3 O que são platôs na magnetização?

Um platô na magnetização ocorre quando, ao aumentar a intensidade de um campo magnético externo aplicado a um material, a magnetização permanece constante (LACROIX et al., 2011). Os platôs na magnetização são associados, muitas vezes, a materiais com frustração magnética (SHANGGUAN et al., 2023). Um exemplo é o cristal antiferromagnético $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ de rede triangular (SMIRNOV et al., 2007). A frustração magnética nesse material surge devido à geometria da sua rede. Se exposto a um campo magnético externo, o cristal apresenta um platô em $1/3$ da magnetização de saturação (M_S), como mostrado na Figura 4, que ilustra a magnetização em função do campo magnético externo. Nesse caso, a magnetização atinge a saturação próxima de $5 \mu_B$ por Fe^{3+} , onde μ_B é o magneton de Bohr.

Figura 4 – Magnetização (μ_B por Fe^{3+}) em função do campo magnético externo (T) para o material de composição $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ de rede triangular antiferromagnética. Valor de referência: $T = 1,3 \text{ K}$.

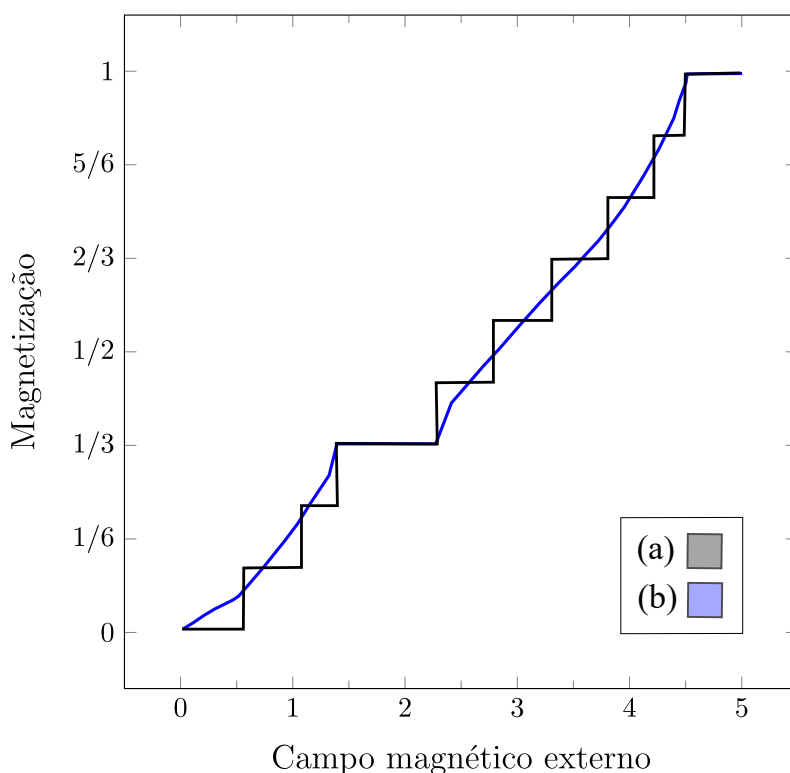


Fonte: adaptado de Smirnov et al. (2007).

A pesquisa de Honecker (1999) mostrou no gráfico (a) da Figura 5 a obtenção teórica de platôs na magnetização para um cristal antiferromagnético a partir de um *cluster* triangular com número finito de sítios. São observados nove platôs intermediários à magnetização de saturação. Apenas o platô em $1/3$ da magnetização permanece para a extrapolação ao limite termodinâmico, como mostrado no gráfico (b), o que está em concordância com o comportamento

de antiferromagnetos de rede triangular sob a presença de um campo magnético externo. Essa extrapolação ao limite termodinâmico pode ser realizada, por exemplo, com uma simulação de Monte Carlo, mas exige um custo computacional muito maior.

Figura 5 – Magnetização em função do campo magnético uniforme para um antiferromagneto de rede triangular a luz do modelo de Ising. Gráfico (a) rede com 27 sítios. Gráfico (b) rede na extrapolação para o limite termodinâmico.



Fonte: adaptado de Honecker (1999).

É interessante notar que os gráficos (a) e (b) demonstram que um número finito de sítios na rede influencia a emergência de platôs adicionais na magnetização. Como a formação de um platô está associada à degenerescência das configurações de *spins* na rede, o aumento do número de sítios levaria à diminuição dessa degenerescência; conseqüentemente, a maioria dos platôs desaparece. No entanto, o platô em $1/3$ da magnetização de saturação permanece, correspondendo ao que se observa experimentalmente, por exemplo, no $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$.

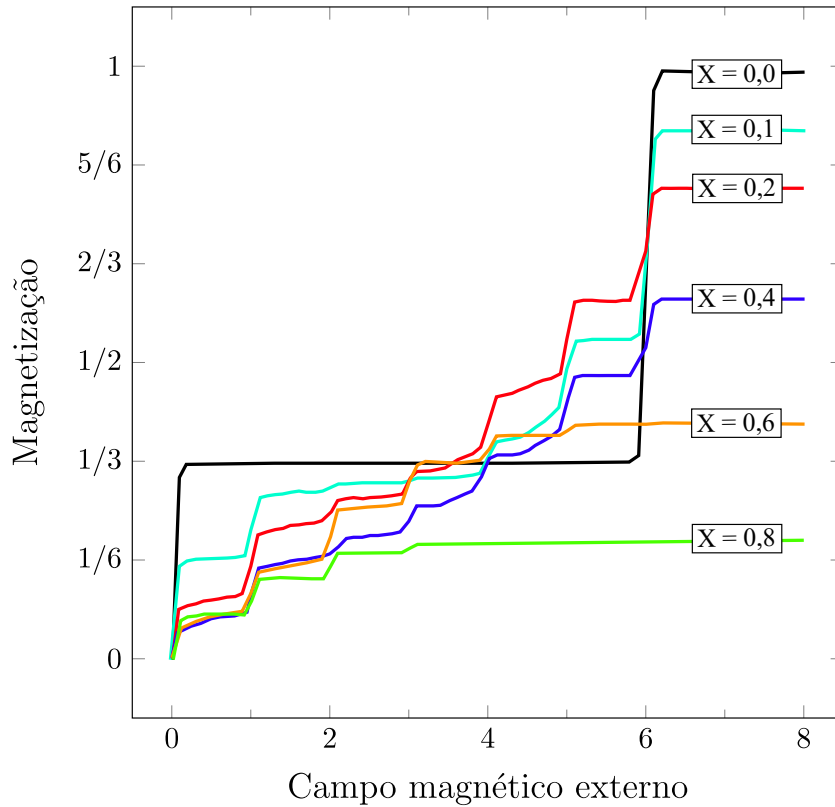
2.4 Efeito da diluição sobre a estrutura de platôs na magnetização

Nesta seção, apresentamos o efeito da diluição com íons não magnéticos sobre cristais antiferromagnéticos em *clusters* com geometria triangular. Isso é interessante porque, além da diluição, teremos uma combinação com a frustração magnética via geometria da rede. Um exemplo é a pesquisa realizada por Soldatov et al. (2019) à luz do modelo de Ising que, com simulação de Monte Carlo, investiga a estrutura de platô em $1/3$ da magnetização de saturação associada ao *cluster* de geometria triangular com interações antiferromagnéticas sob diluição com íons não magnéticos.

Essa investigação pode ser compreendida a partir do gráfico da Figura 6, que ilustra o comportamento da magnetização em função de um campo magnético externo de uma rede

triangular antiferromagnética sob a diluição X com íons não magnéticos. No gráfico, é possível observar que ao aumentar o percentual de diluição com íons não magnéticos de $X = 0,0$ (0% de diluição) até $X = 0,8$ (80% de diluição), surgem mais platôs na magnetização.

Figura 6 – Magnetização em função do campo magnético externo para diferentes valores X de diluição com íons não magnéticos. O sistema é uma rede triangular antiferromagnética com 9216 sítios, e resolvido a luz do modelo de Ising via método de Monte Carlo.



Fonte: adaptado de Soldatov et al. 2019.

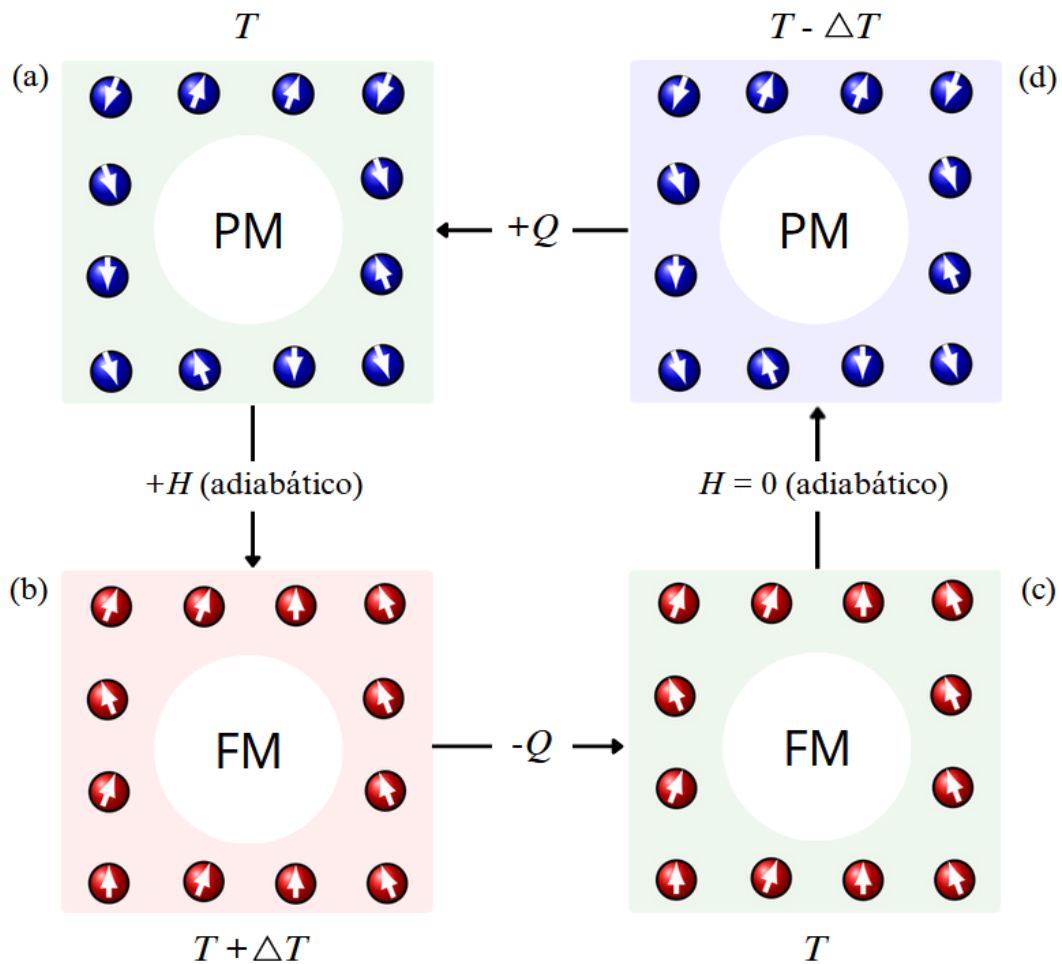
A partir disso, a pesquisa de Soldatov et al. (2019) sugere que a diluição com íons não magnéticos poderia acarretar na fragmentação do platô em $1/3$ observado em cristais antiferromagnéticos com geometria triangular de rede. Esse aumento no número de platôs na magnetização poderia ter consequências no desenvolvimento, por exemplo, de materiais magnetocalóricos.

2.5 Efeito magnetocalórico

Nesta seção, estudaremos o efeito magnetocalórico envolvido na tecnologia de refrigeração magnética. A Figura 7 apresenta, de forma esquemática, o ciclo termodinâmico envolvido nesse tipo de máquina térmica, evidenciando as etapas fundamentais do processo de conversão entre energia magnética e térmica: (a) representação de um material paramagnético em temperatura ambiente, T , com orientação magnética desordenada; (b) aplicação adiabática de um campo magnético externo, $+H$, onde os momentos magnéticos de *spin* se alinham, resultando em um aumento de temperatura do material de T para $T + \Delta T$; (c) remoção do calor, $-Q$, gerado via contato com um fluido de refrigeração, levando o sistema de volta a temperatura ambiente, T ,

enquanto mantém a ordem magnética; (d) remoção adiabática do campo magnético, $H = 0$, que causa uma desorientação dos momentos magnéticos, e uma diminuição da temperatura do material de T para $T - \Delta T$, o sistema retorna ao estado desordenado inicial em temperatura ambiente, T , com a absorção de calor do ambiente, $+Q$. Esse ciclo mostra, então, a transferência de calor do material magnético para o fluido de refrigeração, evidenciando o mecanismo de desmagnetização adiabática utilizado na refrigeração magnética. Do ponto de vista termodinâmico, a refrigeração magnética descrita, especialmente no passo (d), atua como uma máquina térmica porque realiza um ciclo de refrigeração através da manipulação de fluxos de calor em função da variação de um campo magnético, seguindo as leis da termodinâmica (NAIR; EL-GENDY, 2018).

Figura 7 – Máquina térmica: demonstração do ciclo termodinâmico de refrigeração magnética por meio da desmagnetização adiabática.



Fonte: adaptado de Nair e El-Gendy (2018).

É correto afirmar que o efeito magnetocalórico está intrinsecamente relacionado ao processo de desmagnetização adiabática, que ocorre a partir de uma transição de ordem para desordem (BLAZKOVA et al., 2004; WANG et al., 2015). Logo, no esquema da Figura 7, a transição é: fase ferromagnética, com *spins* orientados na mesma direção, para fase paramagnética, com *spins* orientados aleatoriamente. Isso acontece, também, na transição de um platô na

magnetização para a magnetização de saturação, ou seja, materiais que apresentam platôs na magnetização podem ser candidatos promissores como materiais magnetocalóricos (STREKA et al. 2015; ANTONIO et al., 2023).

2.6 Modelo de Ising

Nesta seção, introduziremos o modelo de Ising. Ele pode ser usado, por exemplo, para descrever a termodinâmica de materiais reais com rede de geometria triangular como $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$, ClCoCl_3 , CsCoBr_3 e FeI_2 (MURTAZAEV et al., 2022). O modelo de Ising, a princípio, fornece uma expressão para a energia de um sistema magnético, tal que

$$E = -\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j. \quad (2.1)$$

A constante $\mathcal{J}$ quantifica a magnitude da força de interação entre pares de *spins* vizinhos em uma rede, sendo chamada de constante de interação de troca entre *spins*. Ela não precisa, necessariamente, ser uma constante, e pode depender do acoplamento. Sua origem provém do princípio de exclusão de Pauli na anti-simetrização da função de onda, ocorrendo sempre que existe uma superposição da função de onda de elétrons vizinhos (GROSSKLAGS, 2020).

A partir do sinal da constante de interação de troca entre *spins* podemos inferir, via modelo de Ising, uma propensão a manifestação de uma ordem magnética no sistema:

- $\mathcal{J} > 0$: a energia do sistema é minimizada quando os *spins* vizinhos estão alinhados paralelamente, caracterizando um comportamento ferromagnético.
- $\mathcal{J} < 0$: a minimização da energia ocorre quando os *spins* vizinhos estão alinhados antiparalelamente, indicativo de um comportamento antiferromagnético.

O somatório $\sum_{\langle i,j \rangle}$ está associado à contabilização das possíveis interações entre *spins* vizinhos na rede. A forma de contabilizar as interações entre vizinhos depende do tipo de problema a ser estudado. Por exemplo, existe a possibilidade de considerar somente as interações entre *spins* que são vizinhos mais próximos na rede, o que acaba sendo representado pelo índice $\langle i, j \rangle$. Aqui, o índice i ($i = 1, 2, 3, \dots, N$) se refere à posição de um *spin* específico na rede (N : número de sítios da rede). O índice j é usado para os sítios da rede que são adjacentes ao sítio i , onde cada par de vizinhos é contado apenas uma vez na soma.

A variável σ_i refere-se a orientação do *spin* do i -ésimo sítio da rede, e pode assumir valores $+1$ ou -1 , sendo binária (BRUSH, 1967). Isso quer dizer que

$$\sigma = (\sigma_i)_{i=1}^N \in \{-1, +1\}^N \quad (2.2)$$

representa a coleção de todas as variáveis de *spin*, pois $(\sigma_i)_{i=1}^N$ é um vetor no espaço de configuração do sistema, onde cada componente do vetor é independente e assume um dos 2^N possíveis estados.

Por conta da equação (2.2), o resultado da interação entre dois *spins* assume:

$$\sigma_i \sigma_j = \begin{cases} 1, & \text{para } \textit{spins} \text{ alinhados paralelamente} \\ -1, & \text{para } \textit{spins} \text{ alinhados antiparalelamente} \end{cases} \quad (2.3)$$

O produto $\sigma_i \sigma_j = 1$ caracteriza um estado energeticamente favorável sob condições ferromagnéticas (quando $\mathcal{J} > 0$), onde os *spins* tendem a alinhar-se paralelamente para minimizar a energia do sistema. Este alinhamento paralelo é um indicativo da interação cooperativa entre os *spins*, resultando em um estado de menor energia que favorece, por exemplo, a emergência de magnetização espontânea. O produto $\sigma_i \sigma_j = -1$ descreve uma configuração favorável ao antiferromagnetismo (quando $\mathcal{J} < 0$), na qual os *spins* vizinhos preferem orientações antiparalelas. Este arranjo reflete à formação, por exemplo, de um estado de baixa energia sem magnetização líquida.

2.6.1 Modelo de Ising com campo magnético uniforme

Uma extensão do modelo de Ising ocorre quando o sistema está sob a presença de um campo magnético uniforme. Isso significa acrescentar na equação (2.1) a interação Zeeman associada ao campo magnético externo, tal que:

$$E = -\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - g\mu_B h \sum_i \sigma_i, \quad (2.4)$$

onde g representa o fator de Landé e μ_B é o magneton de Bohr.

Considera-se que a variável de campo magnético uniforme, simplesmente, absorve as constantes, e podemos reescrever a equação (2.4) como:

$$E = -\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i. \quad (2.5)$$

2.6.2 Modelo de Ising com campos magnéticos aleatórios

Um sistema magnético com campos magnéticos aleatórios também pode ser estudado, como mostrado por Imry e Ma (1975), via modelo de Ising, tal que:

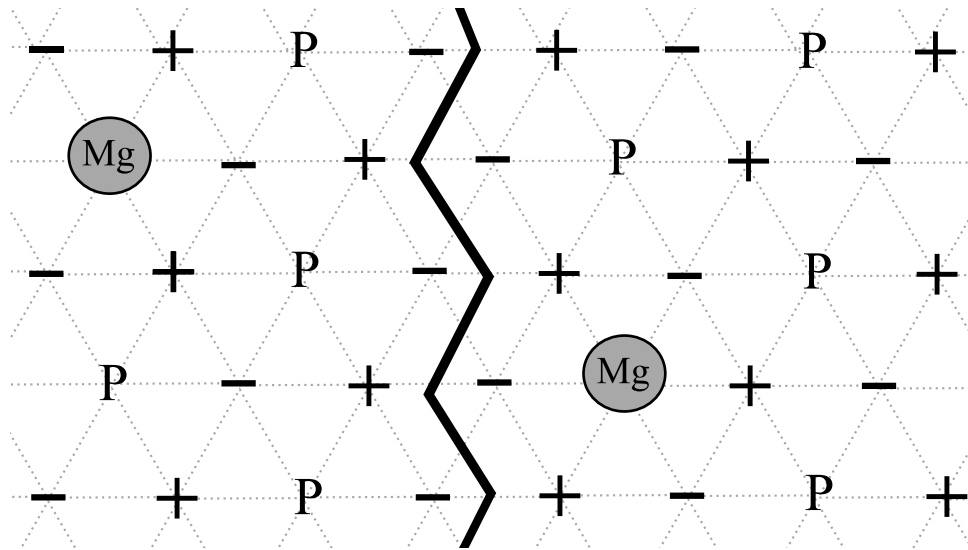
$$E = -\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \sum_i \alpha_i \sigma_i, \quad (2.6)$$

onde α_i é a variável de campos magnéticos aleatórios para o i -ésimo sítio de uma rede, e depende de uma distribuição de probabilidade como, por exemplo, a distribuição gaussiana.

O modelo de Ising com campos magnéticos aleatórios é utilizado para estudar sistemas magnéticos com impurezas, como observado no estudo do composto $\text{CsCo}_{0,83}\text{Mg}_{0,17}\text{Br}_3$ (DUIJN et al., 2004). Esse é um composto antiferromagnético, e a impureza ocorre via diluição com íons de magnésio (Mg^{+2}), que ocupam sítios não magnéticos. Isso porque 17% dos íons de cobalto são substituídos por íons de magnésio. Na Figura 8, mostramos esse sistema. Veja que $\pm$ são a

orientação de cada *spin* na rede; P são *spins* desordenados na rede; Mg são íons de magnésio na rede. Os íons de magnésio geram vacâncias não magnéticas que introduzem a desordem local em algumas sub-redes. As demais sub-redes podem assumir uma orientação para seus *spins* ($\pm$), sendo o *spin* ao centro desordenado (P), e são chamadas de sub-redes parcialmente antiferromagnéticas. Isto é, são redes com frustração magnética via geometria da rede. Essa diluição com íons magnéticos gera domínios magnéticos distintos que são desordenados. Sugere-se, portanto, a existência de campos magnéticos aleatórios.

Figura 8 – Estrutura do composto $\text{CsCo}_{0,83}\text{Mg}_{0,17}\text{Br}_3$, que apresenta uma rede triangular antiferromagnética com substituição de íons Co por Mg não magnéticos.



Fonte: adaptado pelo autor de Duijn et al. (2004).

Esse cenário, portanto, estabelece um contexto adequado para a aplicação do modelo de Ising com campos magnéticos aleatórios, os quais podem emergir a partir da diluição, ou seja, da substituição de íons magnéticos por íons não magnéticos de um material.

2.7 Termodinâmica do modelo de Ising

Em um sistema magnético, com o modelo de Ising, todas as quantidades termodinâmicas associadas podem ser obtidas a partir de médias térmicas. Essas médias térmicas estão associadas ao formalismo dos *ensembles* estatísticos, que, conforme Salinas (2005), consiste em considerar um grande número de cópias do sistema, cada uma representando uma possível configuração de *spins* em que o sistema pode estar.

Isso se traduz no cálculo da função de partição canônica:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \sum_{\sigma_3} \dots \sum_{\sigma_i} \exp(-\beta E), \quad (2.7)$$

onde $\exp\{-\beta E\}$ é a distribuição de Boltzmann. O somatório contabiliza a contribuição das possíveis configurações de *spins* em banho térmico. A constante é $\beta = 1/k_B T$: k_B constante de Boltzmann; T temperatura.

Suponha, por exemplo, que um sistema antiferromagnético do tipo Ising está sob um campo magnético uniforme. Assim, a energia E é descrita pela equação (2.5), e substituindo em (2.7) obtemos:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[-\beta \left(-\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \right) \right]. \quad (2.8)$$

Uma vez obtida a expressão para a função de partição na equação (2.8), podemos realizar a conexão com a termodinâmica calculando a energia livre magnética por número de sítios:

$$f = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(-\frac{T}{N} \ln(\mathcal{Z}) \right). \quad (2.9)$$

É essencial notar que estamos empregando um *ensemble* que é analogamente similar ao *ensemble* de pressão. No lugar da pressão, temos o campo magnético uniforme.

2.7.1 Como são calculadas as médias térmicas?

Para determinar as médias térmicas em sistemas magnéticos, partimos da expressão diferencial da energia livre por sítio:

$$df = -s dT - m dh \quad (2.10)$$

onde s é a entropia magnética por sítio, T é a temperatura, m é a magnetização por sítio e h é o campo magnético uniforme.

A partir da equação (2.10), a entropia magnética por sítio pode ser expressa como:

$$s = - \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_h. \quad (2.11)$$

Já a magnetização por sítio é obtida calculando a média térmica dos momentos magnéticos de *spin*:

$$m = \left(\frac{1}{N} \right) \left\langle \sum_i \sigma_i \right\rangle \quad (2.12)$$

ou, simplesmente,

$$m = \left(\frac{1}{N} \right) \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_i \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_i e^{-\beta E}. \quad (2.13)$$

Com a expressão (2.13), a susceptibilidade magnética por número de sítios, que quantifica a resposta do sistema a pequenas variações no campo magnético, é dada por:

$$\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial h} \right)_T. \quad (2.14)$$

A energia interna (u) por número de sítios é:

$$u = \left(\frac{1}{N} \right) \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\{\sigma_i\}} E \exp(-\beta E). \quad (2.15)$$

2.8 Técnica da enumeração exata

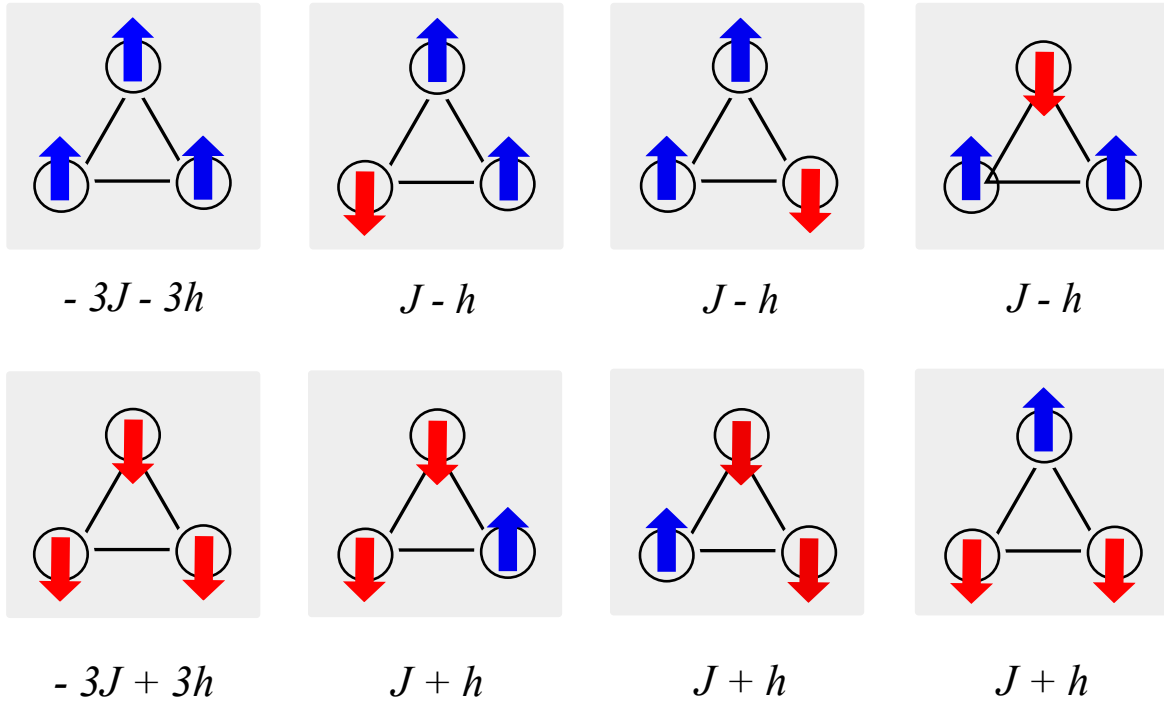
Nesta seção, apresentamos a técnica da enumeração exata, uma abordagem poderosa para sistemas de tamanho finito que permite calcular exatamente a função de partição ao considerar todas as possíveis configurações de *spin* na rede. Isso possibilita a determinação precisa de quaisquer quantidades termodinâmicas de interesse porque o sistema não está no limite termodinâmico.

2.8.1 Exemplo: rede triangular (2D) antiferromagnética com três sítios

Para ilustrar a aplicação da técnica, consideramos inicialmente uma rede triangular antiferromagnética com três sítios, conforme ilustra a Figura 9. Essa rede incorpora a frustração magnética de origem geométrica. Assim como mostrou Ramos (2020), essa rede pode ser utilizada para investigar qualitativamente o fenômeno dos platôs no modelo de Ising sob campo magnético uniforme na escala finita.

Considerando que $T \rightarrow 0$, apenas as configurações de *spin* de menor energia são permitidas para o sistema. Isso é importante, pois apenas essas configurações contribuem para o cálculo da função de partição. Todas as possíveis configurações e *spins* para a rede são mostradas na Figura 8.

Figura 9 – Energia de cada configuração de *spin* da rede triangular com três sítios a luz do modelo de Ising com campo magnético uniforme.

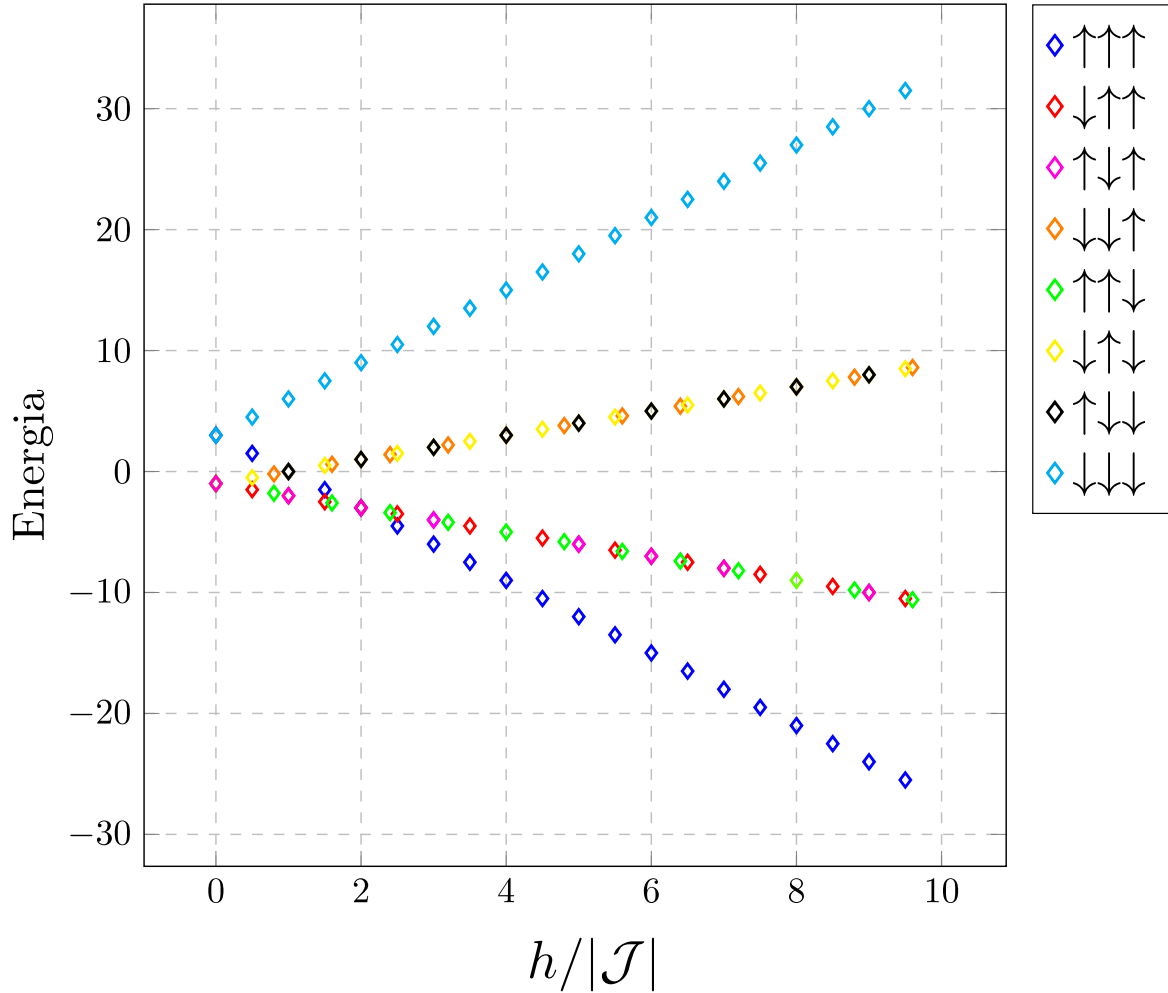


Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Se a rede é antiferromagnética, teremos que $\mathcal{J} < 0$ e constante, uma opção é fazer $\mathcal{J} = -1$. Isso faz com que todas as expressões para a energia de cada configuração de *spin* sejam funções decrescentes do primeiro grau, onde a variável independente é o campo magnético uni-

forme. Na Figura 9, mostramos um gráfico da energia (E) de cada configuração de *spin* no *cluster* em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$). É simples identificar as configurações de menor energia. Para o intervalo de $0 \leq h/|\mathcal{J}| < 2$ as configurações $\downarrow\uparrow\uparrow$, $\uparrow\downarrow\uparrow$ e $\uparrow\uparrow\downarrow$ representam a menor energia, sendo esta energia degenerada. Enquanto para o intervalo de $2 \leq h/|\mathcal{J}| \leq 10$ apenas a configuração $\uparrow\uparrow\uparrow$ representa a menor energia.

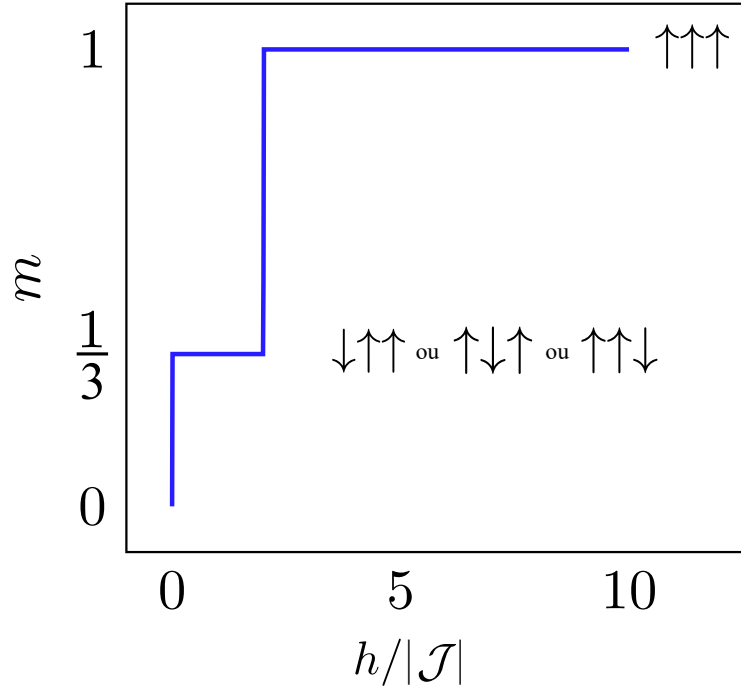
Figura 10 – Energia das configurações de *spin* em função do campo magnético uniforme adimensional ($h/|\mathcal{J}|$).



Fonte: adaptado de Ramos (2020).

Assim, descobrimos quem são as configurações que contribuem para a função de partição, podemos resolvê-la com auxílio da equação (2.8). Uma vez calculada, com a equação (2.13), podemos conhecer o comportamento da magnetização por sítio sob variação da intensidade do campo magnético uniforme. Ao fazer isso, no gráfico da Figura 11, podemos ver o platô em $1/3$ da magnetização de saturação. Podemos afirmar, com a análise anterior, que para o intervalo de existência do platô magnético, teremos as configurações $\downarrow\uparrow\uparrow$, $\uparrow\downarrow\uparrow$ e $\uparrow\uparrow\downarrow$ responsáveis pelo platô. Quando a magnetização atinge sua saturação, associamos a configuração $\uparrow\uparrow\uparrow$.

Figura 11 – Magnetização por sítio (m) como função do campo uniforme (h) normalizado pela constante de interação ($\mathcal{J}$). O tamanho do sistema é $N = 3$.



Fonte: adaptado de Ramos (2020).

Percebemos, portanto, que mesmo com um número finito de sítios podemos descrever características importantes de sistemas com platôs na magnetização.

2.9 Princípio variacional via desigualdade de Bogoliubov

Nesta seção, explicaremos o princípio variacional via desigualdade de Bogoliubov (KUZEMSKY, 2015). Muitas vezes, a desigualdade de Bogoliubov é utilizada associada a aproximações do modelo de Ising ao limite termodinâmico, como mostrado, por exemplo, por Roos e Schmidt (2024). Para isso, considere um sistema com energia E no limite termodinâmico, ao qual chamaremos de sistema original. Este sistema não admite uma solução exata sem a realização de aproximações. Podemos, então, considerar um sistema de referência, com energia E_0 , semelhante ao sistema original, mas que admite uma solução exata. A função de partição do sistema de referência pode ser determinada exatamente, tornando-o uma aproximação útil para o sistema original.

Naquilo que refere-se à precisão dessa aproximação, obtemos a expressão matemática conhecida como a desigualdade de Bogoliubov, definida por

$$F \leq F_0 + \langle E - E_0 \rangle_0, \quad (2.16)$$

onde F é a energia livre do sistema original, F_0 é a energia livre do sistema de referência, e $\langle E - E_0 \rangle_0$ é a média da diferença entre as energias E e E_0 , calculada em relação ao sistema de referência.

Explicitamente, essa média térmica é dada por

$$\langle E - E_0 \rangle_0 = \text{Tr}((E - E_0)e^{-\beta E_0}), \quad (2.17)$$

onde Tr denota a operação de traço.

A desigualdade de Bogoliubov, portanto, impõe um limite superior à energia livre do sistema original.

Para manipular a precisão com que E_0 se aproxima de E , introduzimos um parâmetro variacional γ na energia E_0 . Assim, temos que

$$E_0 = E_0(\gamma) \quad (2.18)$$

e

$$F_0 = F_0(\gamma). \quad (2.19)$$

Para obter a melhor aproximação possível, desejamos que

$$F \approx F_0. \quad (2.20)$$

Para alcançar isso, é necessário que o lado direito da desigualdade de Bogoliubov assumo seu valor mínimo. Isso significa que a função

$$\Phi(\gamma, E) = F_0 + \langle E - E_0 \rangle_0 \quad (2.21)$$

deve estar em seu ponto de mínimo absoluto.

2.9.1 Exemplo: sistema com *spins* não interagentes

Nesta subseção, analisaremos do princípio variacional via desigualdade de Bogoliubov para um sistema de referência com *spins* não interagentes. Algo que, muitas vezes, acarreta em uma aproximação ao limite termodinâmico se o sistema original é um gás de *spins* sob um campo magnético (SALINAS, 2005).

Então, considere que o sistema original é uma rede com *spins* interagentes sob a presença de um campo magnético, sendo o mesmo descrito a luz do modelo de Ising:

$$E = -\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i. \quad (2.22)$$

O sistema de referência, a saber, é uma rede com *spins* não interagentes. A expressão da energia do sistema de referência é:

$$E_0 = -\gamma \sum_i \sigma_i, \quad (2.23)$$

onde γ é o parâmetro variacional a ser determinado.

O fato do sistema de referência ser não interagente é importante. Isto garante que a função de partição, $\mathcal{Z}_0$, seja dada como o produto das funções de partições individuais de cada *spin* na rede, tal que

$$\mathcal{Z}_0 = \prod_i^N \mathcal{Z}_i = \prod_i^N \left(\sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta E_0} \right) = \sum_{\{\sigma\}} (e^{-\beta(-\gamma\sigma_1)})^N = (e^{-\beta\gamma} + e^{\beta\gamma})^N. \quad (2.24)$$

Neste momento, podemos usar a identidade

$$\frac{e^{-x} + e^x}{2} = \cosh(x) \quad (2.25)$$

para reescrever a equação (2.24) como

$$\mathcal{Z}_0 = (2 \cosh(\beta\gamma))^N. \quad (2.26)$$

Para esse caso, a energia livre magnética é

$$F_0 = -\beta \ln(\mathcal{Z}_0) = -N\beta \ln(2 \cosh(\beta\gamma)). \quad (2.27)$$

Consequentemente, a densidade de energia livre magnética por *spin* é

$$f_0 = -\beta \ln(2 \cosh(\beta\gamma)). \quad (2.28)$$

A média térmica para magnetização por sítio é

$$\langle m \rangle = -\frac{\partial f_0}{\partial \gamma}. \quad (2.29)$$

Se realizarmos a derivada, descobrimos que

$$\langle m \rangle = \tanh(\beta\gamma), \quad (2.30)$$

mas ainda não conhecemos γ .

O parâmetro variacional será aquele que minimiza a função $\Phi(E, \gamma)$.

$$\phi = g_0 + \frac{\langle E - E_0 \rangle_0}{N} \quad (2.31)$$

Agora, precisamos determinar $\langle E - E_0 \rangle_0$:

$$\langle E - E_0 \rangle_0 = -\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_0 - h \sum_i \langle \sigma_i \rangle_0 + \sum_i \gamma_i \langle \sigma_i \rangle_0 \quad (2.32)$$

Os sítios i e j são independentes, portanto,

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_0 = \langle \sigma_i \rangle_0 \langle \sigma_j \rangle_0. \quad (2.33)$$

Então, teremos

$$\langle E - E_0 \rangle_0 = -\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \sigma_i \rangle_0 \langle \sigma_j \rangle_0 - h \sum_i \langle \sigma_i \rangle_0 + \sum_i \gamma_i \langle \sigma_i \rangle_0 \quad (2.34)$$

ou

$$\langle E - E_0 \rangle_0 = -\frac{z\mathcal{J}Nm^2}{2} - Nm(h + \gamma). \quad (2.35)$$

onde z é o número de vizinhos mais próximos de um sítio.

Quando o somatório ocorre sobre pares de sítios $\langle i, j \rangle$ em uma rede, como em $\sum_{\langle i,j \rangle}$, cada par $\langle i, j \rangle$ é contado duas vezes. Isso acontece porque a interação entre dois sítios é simétrica, ou seja, a interação entre i e j é a mesma que a interação j e i . Para corrigir essa contagem dupla, introduz-se o fator $1/2$ na equação (2.35). Assim, garante-se que cada par de *spins* é contabilizado apenas uma vez.

Todavia, substituindo (2.35) e (2.28) em (2.31), obtemos

$$\phi(\gamma, E) = -\beta \ln(2 \cosh(\beta\gamma)) - \frac{z\mathcal{J}m^2}{2} - m(h + \gamma). \quad (2.36)$$

Para investigar os pontos críticos de $\phi(\gamma, E)$, precisamos procurar quando a primeira derivada com respeito a γ é zero:

$$\frac{\partial \phi}{\partial \gamma} = (-z\mathcal{J}m^2 - (h - \gamma)) \frac{\partial m}{\partial \gamma} = 0 \quad (2.37)$$

ou, simplesmente,

$$-z\mathcal{J}m - (h - \gamma) = 0. \quad (2.38)$$

O valor que representa um mínimo absoluto da função ϕ é

$$\gamma = z\mathcal{J}m + h. \quad (2.39)$$

O parâmetro variacional obtido em (2.39) também pode ser compreendido como o campo efetivo necessário para outra aproximação, a aproximação via campo médio.

Finalmente, determinamos que

$$m = \tanh(\beta(z\mathcal{J}m + h)). \quad (2.40)$$

Mais interessante, quando $h = 0$, a equação (2.40) reduz-se para

$$m = \tanh(\beta(z\mathcal{J}m)). \quad (2.41)$$

Em ambas as equações, (2.40) e (2.41), são transcendentais. Elas podem ser resolvidas numericamente de maneira autoconsistente.

2.9.2 Exemplo: sistema com *spins* em *cluster* interagentes

Nesta subseção, analisaremos o princípio variacional via desigualdade de Bogoliubov para um sistema de referência subdividido em *clusters*, e seus *spins* interagem entre si apenas dentro de cada *clusters*.

A expressão para energia do sistema de referência é dada por

$$E_0 = \sum_c (E_0)_c = -\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \sigma_i \rangle_0 \langle \sigma_j \rangle_0 - \mathcal{J} \left(\frac{1}{2} \right) \sum_{\langle i,j \rangle'} \langle \sigma_i \rangle_0 \langle \sigma_j \rangle_0 - \sum_i \gamma_i \sigma_i \quad (2.42)$$

onde γ_i é o parâmetro variacional.

A expressão para energia do sistema original é

$$E = -\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (2.43)$$

Dessa forma, temos que

$$\langle (E)_c - (E_0)_c \rangle_0 = \mathcal{J} \left(\frac{1}{2} \right) \sum_{\langle i,j \rangle'} \langle \sigma_i \rangle_0 \langle \sigma_j \rangle_0 + \gamma \sum_i^N \langle \sigma_i \rangle_0. \quad (2.44)$$

Precisamos calcular

$$\frac{\partial \phi}{\partial \gamma_k} = 0. \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial F_0}{\partial \gamma_k} = \frac{\partial}{\partial \gamma_k} \left[-\frac{1}{\beta} \ln(\mathcal{Z}_0) \right] = -\frac{\sum_{\{\sigma\}} \sigma_k e^{-\beta E_0}}{\sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta E_0}} = -\langle \sigma_k \rangle_0 \quad (2.46)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \gamma_k} = \sum_i \gamma_i (\langle \sigma_i \sigma_k \rangle_0 - \langle \sigma_i \rangle_0 \langle \sigma_k \rangle_0) + \mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle'} \langle \sigma_j \sigma_k \rangle_0 - \langle \sigma_j \rangle_0 \langle \sigma_k \rangle_0 = 0 \quad (2.47)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \gamma_k} = \sum_i \left(\gamma_i + \mathcal{J} \sum_{(j)_i} \langle \sigma_j \rangle_0 \right) a_{ik} = 0, \quad (2.48)$$

onde $\sum_{(j)_i}$ é uma soma para um dado i sobre os sítios de *clusters* vizinhos j .

Assim,

$$\gamma_i = -\mathcal{J} \sum_{(j)_i} \langle \sigma_j \rangle_0. \quad (2.49)$$

O parâmetro variacional obtido em (2.49) pode ser entendido como um campo efetivo para aproximação de campo médio com *clusters*.

3 METODOLOGIA

O sistema em investigação é uma rede triangular (2D) antiferromagnética sob a presença de campos magnéticos, são eles: o campo magnético uniforme (externo) e os campos magnéticos aleatórios (interno).

A luz do modelo de Ising, a expressão da energia desta rede é:

$$E = -\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i - \sum_i \alpha_i \sigma_i, \quad (3.1)$$

onde $\mathcal{J} < 0$, caracterizando as interações antiferromagnéticas entre os *spins* que minimizam a energia do sistema.

Destacamos que o modelo contém as seguintes dependências:

- Função do campo magnético uniforme (h);
- Função das i -ésimas coleções de configurações de *spins* ($\{\sigma_i\}$);
- Função das i -ésimas coleções de configurações de campos magnéticos aleatórios ($\{\alpha_i\}$).

A partir disso, a rede é frustrada — via geometria da rede — e desordenada — via campos magnéticos aleatórios. Logo, o sistema serve como um protótipo para investigar o efeito combinado destes fenômenos. Visto que queremos avaliar as quantidades termodinâmicas desta rede, torna-se necessário definir uma função de distribuição de probabilidade para a variável aleatória de campos magnéticos aleatórios.

Em um primeiro momento, avaliaremos campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição bimodal:

$$\mathcal{P}(\alpha_i) = \frac{1}{2} [\delta(\alpha_i - h_0) + \delta(\alpha_i + h_0)]. \quad (3.2)$$

Em um segundo momento, avaliaremos campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição trimodal:

$$\mathcal{P}(\alpha_i) = \frac{1}{3} [\delta(\alpha_i - h_0) + \delta(\alpha_i + h_0) + \delta(\alpha_i)]. \quad (3.3)$$

Isso porque, as distribuições (3.2) e (3.3), são as mais simples para examinar a desordem local via campos magnéticos aleatórios. Nessas condições, os espaços amostrais são:

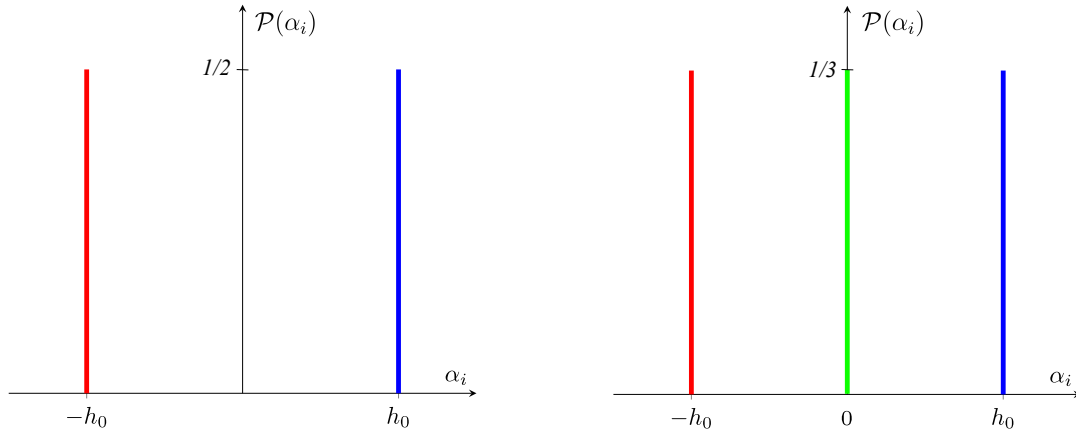
$$\{\alpha\}_{\text{DB}} = \{-h_0, h_0\} \quad (3.4)$$

e

$$\{\alpha\}_{\text{DT}} = \{-h_0, 0, h_0\}. \quad (3.5)$$

Em (3.2) e (3.3) cada elemento do espaço amostral possui a mesma probabilidade. As distribuições de probabilidade são, portanto, simétricas e discretas. A seguir, a Figura 12 mostra uma representação gráfica da distribuição bimodal (DB) e distribuição trimodal (DT).

Figura 12 – Gráfico da distribuição bimodal (gráfico à esquerda) e trimodal (gráfico à direita).



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Como podemos avaliar quantidades termodinâmicas neste modelo? Uma sugestão é contabilizar a desordem devido aos campos magnéticos aleatórios. Suponha que esses campos magnéticos aleatórios atuem de forma independente em cada sítio da rede. Nesse caso, é necessário utilizar o conceito de probabilidade conjunta, que é dado pelo produto das probabilidades individuais.

Esta probabilidade conjunta é

$$\mathcal{P}(\alpha_i) = \prod_i^N \mathcal{P}(\alpha_i), \quad (3.6)$$

onde N é o número de sítios da rede.

Dessa forma, a expressão que utilizaremos para calcular o valor esperado de um observável termodinâmico

$$[O] = \int_{\Omega} \left(\prod_i^N \langle O(\alpha_i) \rangle \mathcal{P}(\alpha_i) d\alpha_i \right), \quad (3.7)$$

onde $[\dots]$ representa a média sobre a desordem.

A ideia central é que realizando a integração (veja Apêndice B), teremos uma média aritmética. Isso porque a probabilidade associada a cada elemento do espaço amostral de ambas as distribuições (DB ou DT) são iguais. Aliado a isso, os elementos do espaço amostral são discretos, o que transforma a integral em um somatório.

Chegamos à conclusão que

$$[O] = \frac{1}{2^N} \sum_i^{2^N} \langle O(\{\alpha_i\}) \rangle \quad (3.8)$$

e

$$[O] = \frac{1}{3^N} \sum_i^{3^N} \langle O(\{\alpha_i\}) \rangle \quad (3.9)$$

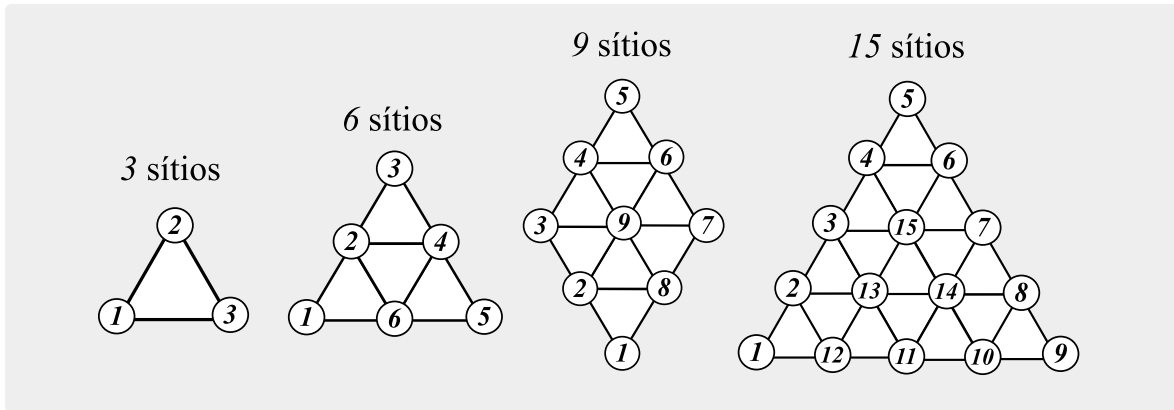
são as expressões para o valor esperado de um observável por desordem via campos magnéticos aleatórios que seguem a DB ou DT, respectivamente.

Em vista disso, podemos afirmar que a média por desordem via campos magnéticos aleatórios pode ser avaliada por meio do somatório que é uma média aritmética das médias térmicas. Isto é, levando-se em conta as médias térmicas para cada i -ésima coleção de campos magnéticos aleatórios.

3.1 Técnica da enumeração exata (rede finita)

A metodologia da técnica da enumeração exata é aplicada para avaliar as propriedades termodinâmicas (magnetização, susceptibilidade magnética e entropia magnética) do modelo proposto. A Figura 13 mostra que este método é empregado para quatro tipos de *clusters*. Elas diferem quanto ao número de sítios. Isso é importante, pois o número de sítios pode afetar o comportamento das propriedades magnéticas (ZUKOVIC, 2015). Vamos explorar esta variável do aumento do tamanho do número de sítios do *cluster*.

Figura 13 – As redes triangulares estão organizadas conforme o número de sítios com 3, 6, 9 e 15 sítios, respectivamente.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Se os sítios estão enumerados, podemos calcular exatamente a função de partição como:

$$\mathcal{Z}(\{\alpha_i\}) = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta E}. \quad (3.10)$$

Neste ponto, perceba que:

- $\sum_{\{\sigma_i\}}$: somatório sobre as i -ésimas coleções de *spins* na rede;
- $\sum_{\{\alpha_i\}}$: somatório sobre as i -ésimas coleções de campos magnéticos aleatórios na rede.

Uma vez calculada a função de partição, podemos determinar as propriedades termodinâmicas do sistema, são elas:

A energia magnética ($\mathcal{F}$) por número de *spins* e por desordem via campos magnéticos aleatórios é

$$\mathcal{F} = \frac{1}{N} \left[\frac{1}{\Lambda} \sum_{\{\alpha_i\}} -T \ln(\mathcal{Z}(\{\alpha_i\})) \right], \quad (3.11)$$

onde $k_B = 1$.

A magnetização ($\mathcal{M}$) por número de *spins* e por desordem via campos magnéticos aleatórios é

$$\mathcal{M} = \frac{1}{N} \left[\frac{1}{\Lambda} \sum_{\{\alpha_i\}} \left(\frac{1}{\mathcal{Z}(\{\alpha_i\})} \sum_{\{\sigma_i\}} \sum_i \sigma_i e^{-\beta E} \right) \right]. \quad (3.12)$$

A energia interna ($\mathcal{U}$) por número de *spins* e por desordem via campos magnéticos aleatórios é

$$\mathcal{U} = \frac{1}{N} \left[\frac{1}{\Lambda} \sum_{\{\alpha_i\}} \left(\frac{1}{\mathcal{Z}(\{\alpha_i\})} \sum_{\{\sigma_i\}} E e^{-\beta E} \right) \right]. \quad (3.13)$$

Para simplificar as equações quanto a escolha da distribuição de probabilidades, escrevemos: Λ é igual a 2^N para distribuição bimodal de campos magnéticos aleatórios; Λ é igual a 3^N para distribuição trimodal de campos magnéticos aleatórios.

A entropia magnética ($\mathcal{S}$) por número de *spins* e por desordem via campos magnéticos aleatórios é

$$\mathcal{S} = - \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial T} \right)_h. \quad (3.14)$$

A susceptibilidade magnética ($\mathcal{X}$) por número de *spins* e por desordem via campos magnéticos aleatórios é

$$\mathcal{X} = \left(\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial h} \right)_T. \quad (3.15)$$

Estas equações para as propriedades termodinâmicas via enumeração exata são resolvidas para as redes triangulares (2D) antiferromagnéticas com 3, 6, 9 e 15 sítios.

3.2 Aproximação de campo médio com *clusters* (rede infinita)

A aproximação de campo médio assume que os elementos de um sistema físico de muitos corpos interagem apenas por meio de um campo efetivo (h_{eff}). Para um sistema magnético, esta aproximação diz que as propriedades termodinâmicas do mesmo podem ser explicadas a partir de apenas um único elemento. Por exemplo, em um sistema magnético do tipo Ising, um único *spin* sob a presença de um campo magnético efetivo poderia explicar o comportamento macroscópico do sistema.

Contudo, a aproximação de campo médio contém limitações. Ela não captura características de competição de interações. Em outras palavras, a frustração magnética não pode ser estudada com a aproximação de campo médio. Sem interação entre *spins* em um material magnético, não pode haver a frustração magnética. Não podemos ignorar isso.

Se adaptada, a aproximação de campo médio pode incluir a possibilidade de interações entre os elementos do sistema. Para um sistema magnético, a interação entre *spins*. Por consequência, a possibilidade de avaliar a competição entre interações. Esta adaptação é conhecida como aproximação de campo médio com *clusters* (YAMAMOTO, 2009). O sistema é subdividido em *clusters*, e as interações entre *spins* dentro de um mesmo *cluster* são permitidas.

Nessa aproximação, as interações dentro de cada *cluster* são incorporadas exatamente, por exemplo, com a enumeração exata, e as interações com os *cluster* adjacentes é aproximada via campo médio convencional. Isso é o suficiente para preservar algumas correlações locais que são importantes para descrever corretamente o comportamento de um sistema magnético que contém competição de interações.

De acordo com Jin et al. (2013), o campo médio pode ser determinado utilizando o princípio variacional na desigualdade de Bogoliubov. Para tanto, o campo médio precisa ser entendido como o parâmetro variacional.

Nessas condições, o modelo é

$$E = -\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i + \sum_i \alpha_i \sigma_i + h_{eff} \quad (3.16)$$

para *clusters* com três sítios.

Visto que estamos lidando com um sistema de *spins* em *cluster* interagentes (consulte a subseção 2.9.2), pressupomos que

$$h_{eff} = -\mathcal{J} \sum_{(j)_i} \mathcal{M}_{(j)_i} \quad (3.17)$$

é campo efetivo responsável por gerador da aproximação de campo médio com *clusters* em nosso sistema com desordem via campos magnéticos aleatórios.

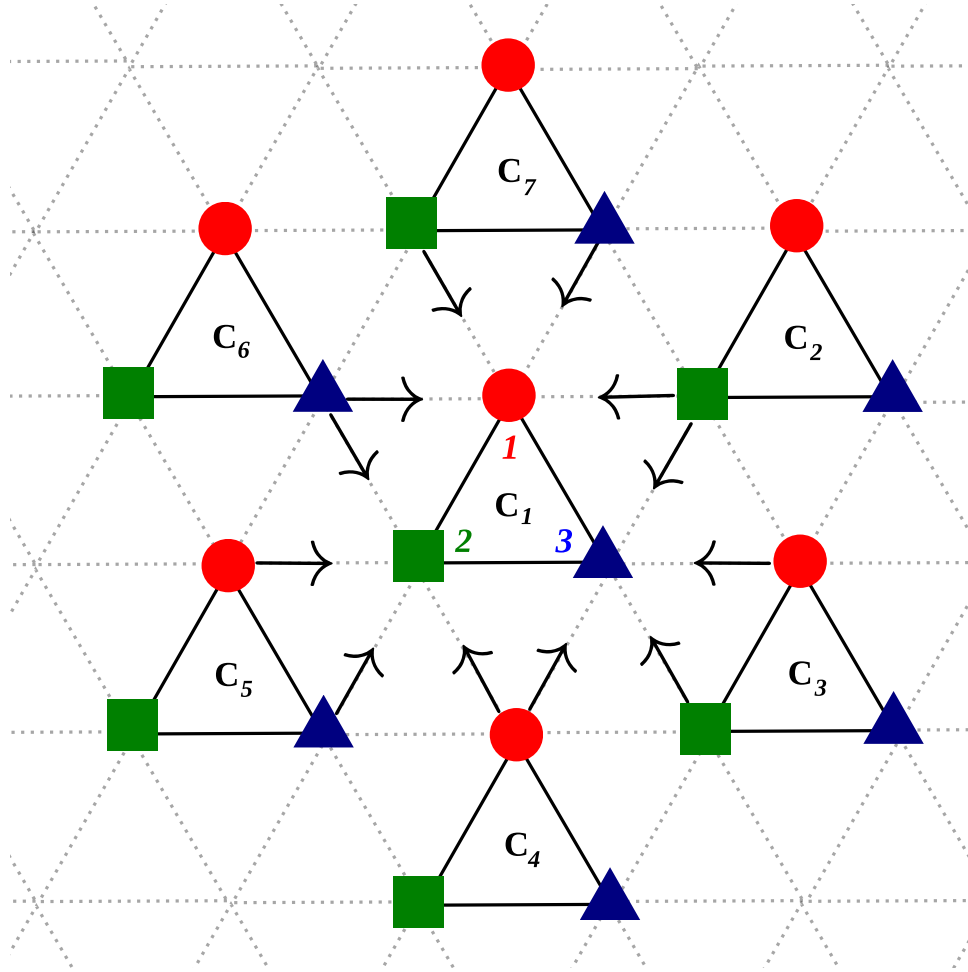
Ao substituir (3.17) em (3.16), teremos

$$E = -\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i - \sum_i \alpha_i \sigma_i - \mathcal{J} \sum_{(j)_i} \mathcal{M}_{(j)_i} \sigma_i. \quad (3.18)$$

Nesta dissertação, o método da aproximação de campo médio considera um *cluster* de geometria triangular com três sítios (YOKOTA, 2014). Podemos ver a representação deste sistema na Figura 14, no *cluster* C_1 as interações entre os seus *spins* são antiferromagnéticas, mas os *clusters* adjacentes interagem entre com os *spins* do *cluster* C_1 via campo efetivo. Os *clusters* são idênticos, e cada sítio é representado por um símbolo. Isto garante que a simetria do sistema é considerada. Vamos, especificamente, observar o *cluster* C_1 . Neste *cluster*, os *spins* podem interagir entre si (*cluster* interagente). Veremos a seguir como os sítios deste *cluster* interagem via campo médio com os demais sítios dos *clusters* vizinhos (*clusters* não-interagentes):

- **Sítio 1:** Interage via campo médio com o sítio 2 e 3 do *cluster* C_7 , com o sítio 2 do *cluster* C_2 e com o sítio 3 do *cluster* C_6 .
- **Sítio 2:** Interage via campo médio com o sítio 1 e 3 do *cluster* C_5 , com o sítio 3 do *cluster* C_6 e com o sítio 1 do *cluster* C_4 .
- **Sítio 3:** Interage via campo médio com o sítio 1 e 2 do *cluster* C_3 , com o sítio 1 do *cluster* C_4 e com o sítio 2 do *cluster* C_2 .

Figura 14 – Representação do sistema na aproximação de campo médio com clusters de geometria triangular com três sítios.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Após compreendermos as interações entre os *spins* de cada *clusters*, concluímos que

$$h_{eff} = -\mathcal{J} (2(\mathcal{M}_2 + \mathcal{M}_3)\sigma_1 + 2(\mathcal{M}_1 + \mathcal{M}_3)\sigma_2 + 2(\mathcal{M}_1 + \mathcal{M}_2)\sigma_3). \quad (3.19)$$

A energia passa a depender também da magnetização de cada sítio do *cluster*, a qual é determinada pelas *i*-ésimas coleções de campos magnéticos aleatórios.

Assim, o modelo possui as seguintes dependências:

- Função do campo magnético uniforme (h);
- Função das *i*-ésimas coleções de configurações de *spins* ($\{\sigma_i\}$);
- Função das *i*-ésimas coleções de configurações de campos magnéticos aleatórios ($\{\alpha_i\}$);
- Função das *j*-ésimas magnetizações ($\mathcal{M}_{(j)i}$).

Em última análise, o método da aproximação de campo médio com *clusters* significa calcular a energia do sistema de maneira autoconsistente, sendo um processo de caráter numérico

computacional. Quando a magnetização é convergente, a energia é obtida. Além disso, as equações para as propriedades termodinâmicas são as mesmas para o método da enumeração exata.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo, apresentamos e discutimos os resultados obtidos a partir da análise do modelo de Ising com campos magnéticos — aleatórios e uniformes — para uma rede triangular (2D) antiferromagnética (sistema protótipo). Neste sentido, estaremos avaliando quantitativamente o efeito combinado de frustração magnética — via geometria do *cluster* — e desordem local — via campos magnéticos aleatórios.

A partir disso, investigaremos as propriedades magnéticas do modelo, com foco em três principais observáveis termodinâmicos: magnetização ($\mathcal{M}$), susceptibilidade magnética ($\mathcal{X}$) e a entropia magnética ($\mathcal{S}$). Uma vez obtidas, essas quantidades serão suficientes para o nosso propósito.

Os gráficos apresentados destas quantidades são adimensionais, o que melhora a análise dos resultados. Estamos normalizando a expressão da energia do modelo pelo módulo da constante da energia de interação de troca.

Veja, por exemplo, que:

- $h/|\mathcal{J}|$: energia Zeeman do campo magnético uniforme pelo módulo da energia de interação de troca entre *spins*;
- $h_0/|\mathcal{J}|$: energia Zeeman dos campos magnéticos aleatórios pelo módulo da energia de interação de troca entre *spins*;
- $T/|\mathcal{J}|$: energia térmica pelo módulo da energia de interação de troca entre *spins*.

Considera-se que a geometria da rede é triangular (2D) com interações antiferromagnéticas. Isto é, a garantia de que o sistema é geometricamente frustrado. Em cada sítio da rede, campos magnéticos aleatórios aplicam uma força magnética sobre os *spins*. Os campos magnéticos aleatórios seguem diferentes distribuições de probabilidade — a distribuição bimodal (DB) e a distribuição trimodal (DT) — para comparações quanto ao número de elementos do espaço amostral. Consideramos, também, o caso sem campos magnéticos aleatórios.

4.1 Método: técnica da enumeração exata

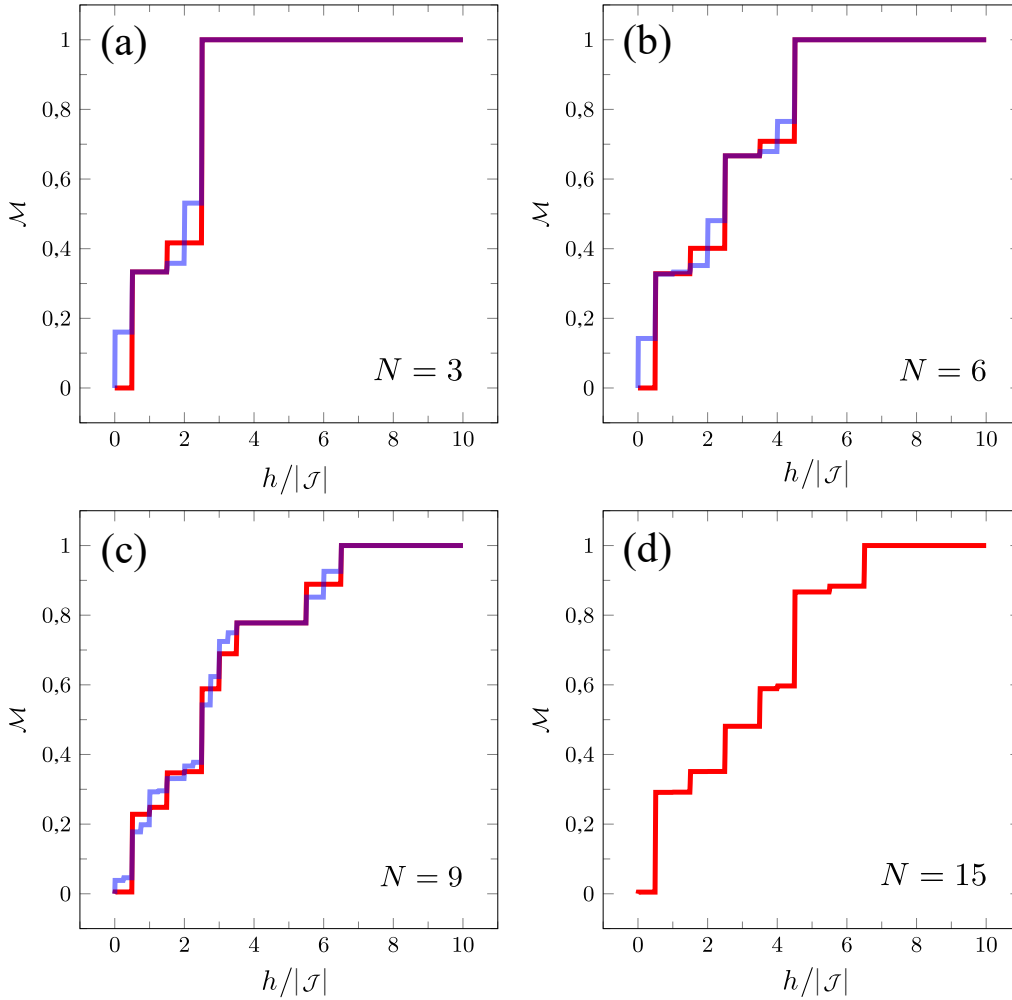
Nesta seção, mostramos o comportamento da magnetização ($\mathcal{M}$), susceptibilidade magnética ($\mathcal{X}$) e entropia magnética ($\mathcal{S}$) considerando uma rede finita com 3, 6, 9 e 15 sítios via método da enumeração exata. Isso significa que estamos analisando o sistema que não está no limite termodinâmico, mas o comportamento das quantidades termodinâmicas funciona como um resultado preliminar.

4.1.1 Magnetização

A Figura 15 apresenta gráficos da magnetização ($\mathcal{M}$) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) para quatro *clusters* de geometria triangular com 3, 6, 9 e 15 sítios, respectiva-

mente. A partir destes resultados, procuramos responder à pergunta: Qual é o comportamento da magnetização sob a variação de um campo magnético uniforme?

Figura 15 – Magnetização ($\mathcal{M}$) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$). Gráfico: distribuição bimodal (linha vermelha) e a distribuição trimodal (linha azul). Valores de referência: $T/|\mathcal{J}| = 0,000001$, $h_0/|\mathcal{J}| = 0,5$ e $|\mathcal{J}| = 1$.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Nos gráficos (a), (b), (c) e (d), observamos que nosso modelo que combina o efeito de frustração magnética — via geometria do *cluster* — e desordem — via campos magnéticos aleatórios — descreve platôs na magnetização quando consideramos um *cluster* com número finito de sítios. O número de platôs na magnetização aumenta ao passo que o número de sítios do *cluster* também aumenta, indicando, por exemplo, que a condição para o surgimento destes platôs na magnetização não depende de que o *cluster* contenha um número muito pequeno de sítios.

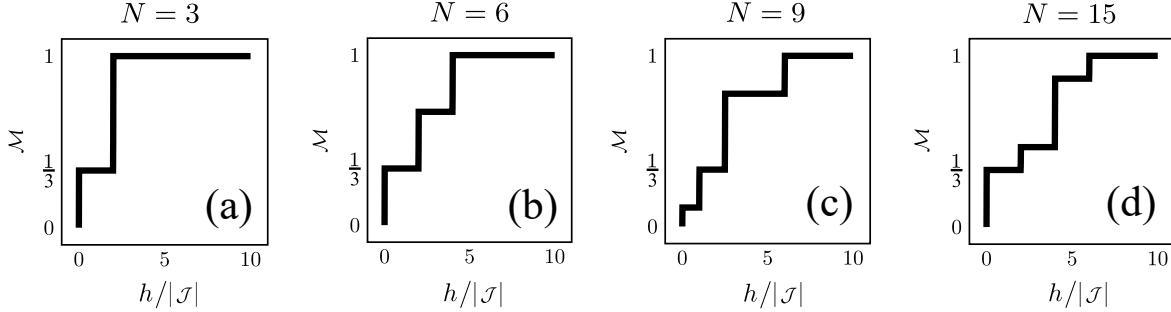
Além disso, apontamos que o valor para o qual a magnetização atinge a saturação se aproxima de $h/|\mathcal{J}| = 6,5$ conforme o número de sítios aumenta para ambas distribuições de probabilidades (DB ou DT). Mesmo assim, isso é apenas uma amostra do que pode acontecer quando o sistema é avaliado no limite termodinâmico.

Por outro lado, os gráficos (a), (b) e (c) da Figura 15 demonstram que o número de platôs na magnetização depende da distribuição de probabilidades utilizada, isto é, a natureza da desordem local no *cluster*. Assim, observamos um menor número de platôs na magnetização quando utilizamos a distribuição bimodal ao invés da distribuição trimodal. Não se limitando a isso, comprovamos que nosso modelo admite o caso particular para ausência de campos magnéticos aleatórios.

Para tanto, a Figura 16 mostra os gráficos de $\mathcal{M}$ vs $h/|\mathcal{J}|$ para os mesmos *clusters* com número finito de sítios, mas considerando que a intensidade dos campos magnéticos aleatórios é nula ($h_0 = 0$). A partir disso, constatou-se que os platôs na magnetização em (a), (b), (c) e (d) são idênticos aos obtidos nas mesmas condições por Ramos (2020) que considera apenas o campo magnético uniforme. Tal procedimento é relevante porque mostra a validade de nossa metodologia.

É importante ressaltar que esta concordância persiste mesmo quando a rede é aumentada. O *cluster* (a), composto por três sítios, é o que apresenta melhor concordância com as observações experimentais, pelo menos no que se refere à contagem do número de platôs na magnetização (RAMOS, 2020). Isso implica que podemos esperar a observação de três platôs na magnetização para uma distribuição bimodal e quatro platôs para uma distribuição trimodal, respectivamente.

Figura 16 – Magnetização ($\mathcal{M}$) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) para ausência de campos magnéticos aleatórios. Valores de referência: $T/|\mathcal{J}| = 0,000001$, $h_0/|\mathcal{J}| = 0$ e $|\mathcal{J}| = 1$.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Neste momento, estamos habilitados a realizar a seguinte pergunta: por quê surgem os platôs na magnetização sob a desordem via campos magnéticos aleatórios? Os platôs na magnetização devem surgir a partir da maneira com a qual contabilizamos a desordem. Por isso, precisamos analisar mais de perto o processo com que ocorre a média aritmética sobre a desordem que utilizamos para determinar todas as quantidades termodinâmicas. Assim, estaremos nos aprofundando mais sobre a natureza de platôs na magnetização em um sistema magnético desordenado de campos magnéticos aleatórios.

Contudo, essa análise depende da escolha da distribuição de probabilidade. Isso porque o número de elementos do espaço amostral é uma variável importante. De acordo com a Tabela 1, o número de configurações de campos magnéticos aleatórios cresce exponencialmente com o número de sítios, sendo muito maior para a distribuição trimodal do que para a distribuição bimodal, especialmente para *clusters* com um maior número de sítios. Por exemplo, quando

$N = 15$ o número de configurações de campos magnéticos aleatórios precisa ser avaliado na casa das dezenas de milhares ou dezenas de milhões para distribuição bimodal ou trimodal, respectivamente.

Tabela 1 – Relação entre o número de sítios e o número de configurações possíveis de campos magnéticos aleatórios.

Número de sítios	Bimodal (2^N)	Trimodal (3^N)
3	8	27
6	64	729
9	512	19683
15	32768	15348907

Fonte: elaborado pelo autor (2024).

A partir disso, a rede triangular antiferromagnética com apenas três sítios é mais acessível para prosseguir com a análise sobre os platôs na magnetização que surgem devido a desordem via campos magnéticos aleatórios. O comportamento para uma rede com um maior número de sítios deve ser uma generalização daquilo que analisaremos para o *cluster* de geometria triangular com três sítios. Mesmo assim, precisamos determinar qual a natureza da desordem. Escolhemos utilizar a distribuição de probabilidades com menor número de configurações de campos magnéticos aleatórios para *cluster* triangular com três sítios, ou seja, a distribuição bimodal.

Isto posto, a Tabela 2 apresenta as oito configurações possíveis de campos magnéticos aleatórios que seguem uma distribuição bimodal para uma rede triangular composta por três sítios. Cada configuração é descrita pelos sinais dos campos em cada sítio, denotados como α_1 , α_2 e α_3 , onde os campos podem assumir valores positivos ou negativos (+ ou −) de h_0 .

Tabela 2 – Configurações de campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição bimodal para uma rede triangular com três sítios.

Configuração	α_1	α_2	α_3
$\{\alpha_1\}$	+	+	+
$\{\alpha_2\}$	+	+	−
$\{\alpha_3\}$	+	−	+
$\{\alpha_4\}$	+	−	−
$\{\alpha_5\}$	−	+	+
$\{\alpha_6\}$	−	+	−
$\{\alpha_7\}$	−	−	+
$\{\alpha_8\}$	−	−	−

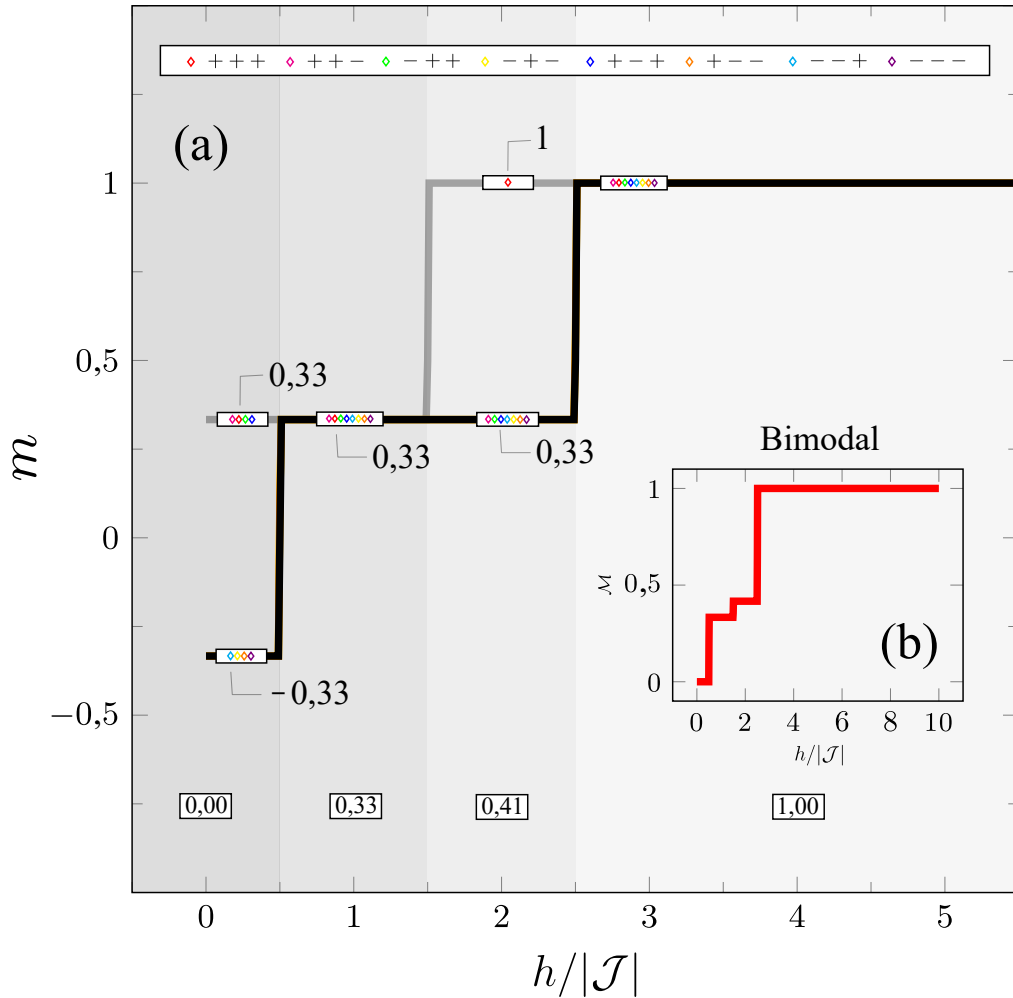
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Nesse sentido, a Figura 17 com o gráfico (a) mostra a magnetização por número de sítios (m) em função do campo magnético uniforme $h/|\mathcal{J}|$ para cada uma das oito configurações da distribuição bimodal de campos magnéticos aleatórios. É interessante notar no gráfico (a) que as

magnetizações obtidas para cada uma das oito possíveis configurações de campos magnéticos aleatórios apresentam diferentes estruturas de platôs intermediários à magnetização de saturação. Ao contrário, se todas as magnetizações fossem idênticas, não haveria qualquer possibilidade do surgimento de novos platôs na magnetização, vistos no gráfico (b) da Figura 17. Essa parece ser uma condição importante para que possa ser fragmentado.

Outra diferença é que a magnetização de saturação é deslocada para maiores valores de $h/|\mathcal{J}|$. Sem campos magnéticos aleatórios, a saturação ocorre para $h/|\mathcal{J}| = 2$. Enquanto no caso com campos magnéticos aleatórios de intensidade $h_0 = 0,5$ temos $h/|\mathcal{J}| = 2,5$ para saturação.

Figura 17 – Em (a) o gráfico m vs $h/|\mathcal{J}|$ para cada configuração de campos magnéticos aleatórios. Em (b) o gráfico M vs $h/|\mathcal{J}|$. Para ambos os casos, a rede é a triangular com três sítios, onde os campos magnéticos aleatórios seguem a distribuição bimodal. Valores de referência: $T/|\mathcal{J}| = 0,000001$, $h_0/|\mathcal{J}| = 0,5$ e $|\mathcal{J}| = 1$.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

No gráfico (a) da Figura 17, podemos estudar os intervalos $h/|\mathcal{J}|$ para os quais a magnetização é constante. Para o intervalo de $0 \leq h/|\mathcal{J}| \leq 0,5$ existem quatro magnetizações equivalentes a $m = 0,33$ e quatro magnetizações equivalentes a $m = -0,33$. Isso culmina em um platô em $\mathcal{M} = 0,00$. Para o intervalo de $0,5 \leq h/|\mathcal{J}| \leq 1,5$, temos as oito magnetizações correspondendo a $m = 0,33$, resultando em um platô em $\mathcal{M} = 0,33$. Para o intervalo de

$1,5 \leq h/|\mathcal{J}| \leq 2,5$, temos sete magnetizações equivalentes a $m = 0,33$ e apenas uma única magnetização $m = 1,00$. Assim, surge o platô em $\mathcal{M} = 0,41$. Por último, no intervalo de $2,5 \leq h/|\mathcal{J}| \leq 5$, todas as magnetizações são $m = 1,00$ e, portanto, temos $\mathcal{M} = 1,00$ que corresponde a magnetização de saturação.

Dessa forma, descobrimos que desordem via campos magnéticos aleatórios conduz à estrutura de platôs na magnetização para distribuição bimodal em uma rede com três sítios. Além disso, no gráfico (b) de $\mathcal{M}$ vs $h/|\mathcal{J}|$ vemos que para campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição bimodal. Podemos ver que é razoável o surgimento de mais platôs na magnetização a partir da média aritmética das médias térmicas das magnetizações por número de sítios.

Podemos, agora, explorar o cálculo da média aritmética que é a maneira pela qual contabilizamos a desordem via campos magnéticos aleatórios. Essa operação pode ser melhor compreendida a partir da Tabela 3, que está organizada da seguinte maneira: a coluna 1 mostra os valores $h/|\mathcal{J}|$ de campo magnético uniforme para os quais existem platôs na magnetização; as colunas 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, e 9 mostram as magnetizações por sítio para cada uma das possíveis distribuições de campos aleatórios; a coluna 10 é a média aritmética das magnetizações por sítio, resultando na magnetização por sítio e por desordem. Consequentemente, podemos ver como ocorre a contabilização da média aritmética da magnetização por número de sítios e por desordem via campos magnéticos aleatórios.

Tabela 3 – Tabela da média térmica da magnetização por sítio de cada uma das configurações de campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição bimodal.

$h/ \mathcal{J} $	+++	--+	-++	+ - +	- + -	++-	+ - -	- - -	$\mathcal{M}$
0,50	0,33	-0,33	0,33	0,33	-0,33	0,33	-0,33	-0,33	0,00
1,50	0,33	0,33	0,33	0,33	0,33	0,33	0,33	0,33	0,33
2,50	1,00	0,33	0,33	0,33	0,33	0,33	0,33	0,33	0,41
5,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00

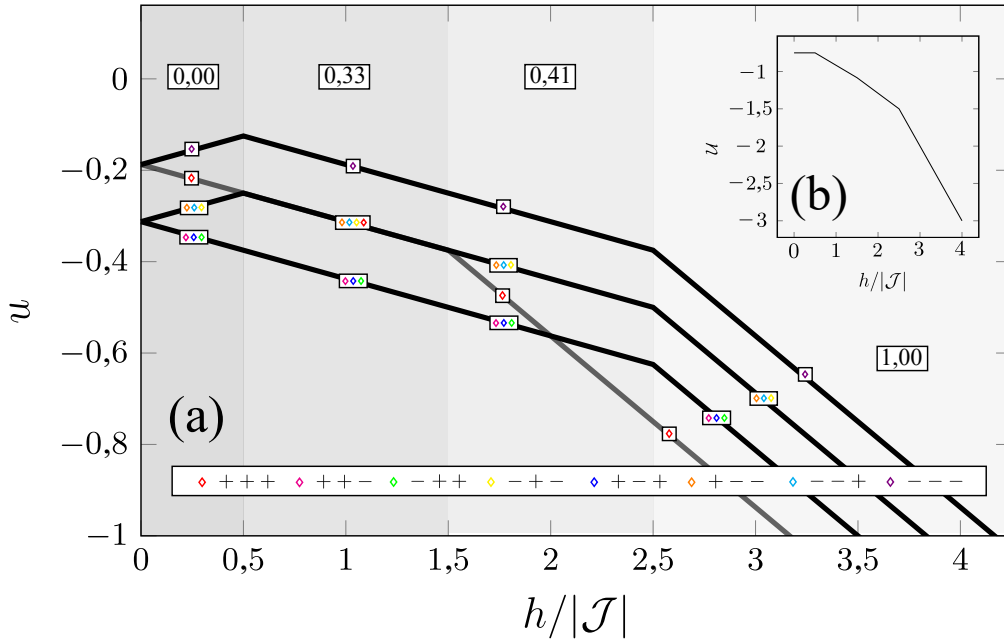
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Baseando-se na Tabela 3, observamos que a desordem local, gerada por campos magnéticos aleatórios seguindo a distribuição bimodal, só consegue introduzir novos platôs na magnetização quando as configurações dos campos magnéticos resultam em magnetizações por sítio distintas que influenciam a média aritmética. Por exemplo, para $h/|\mathcal{J}| = 0,50$, temos que $\mathcal{M} = 0,00$ devido ao equilíbrio entre valores positivos e negativos. Em contraste, para $h/|\mathcal{J}| = 2,50$, quase todas as configurações contribuem igualmente com valores 0,33, exceto 1,00 para a configuração + + +, sendo essa a configuração responsável por $\mathcal{M} = 0,41$.

Para aprofundar a compreensão sobre o surgimento dos novos platôs na magnetização, é essencial analisar o comportamento da energia interna (u) para cada configuração de campo magnético aleatório. A Figura 18 apresenta no gráfico (a) a energia interna para cada uma das configurações de campos magnéticos aleatórios, que seguem uma distribuição bimodal, em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$). Essa abordagem permite examinar como

diferentes configurações influenciam a resposta energética do sistema, fornecendo como a energia média de cada configuração contribui para a formação de platôs na magnetização. Mantemos nosso foco na rede triangular com três sítios. O gráfico (b) mostra a energia interna ($\mathcal{U}$) por sítio e por desordem.

Figura 18 – Para um *cluster* de geometria triangular com três sítios: (a) gráfico da energia interna (u) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) para cada configuração de campos magnéticos aleatórios; (b) gráfico energia interna ($\mathcal{U}$) por sítio e por desordem em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$). A distribuição de probabilidades para os campos magnéticos aleatórios é a bimodal. Valores de referência: $T/|\mathcal{J}| = 0,000001$, $h_0/|\mathcal{J}| = 0,5$ e $|\mathcal{J}| = 1$.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Por quê analisar a média térmica da energia para cada configuração de campos magnéticos aleatórios? Esta quantidade fornece uma informação acerca do intervalo $h/|\mathcal{J}|$ de existência dos platôs na magnetização. Perceba que os gráficos são funções do primeiro grau — são retas — que possuem um determinado coeficiente angular. O coeficiente angular caracteriza a inclinação de cada uma das retas. No gráfico, nem sempre o coeficiente angular é o mesmo para cada configuração de campos magnéticos aleatórios.

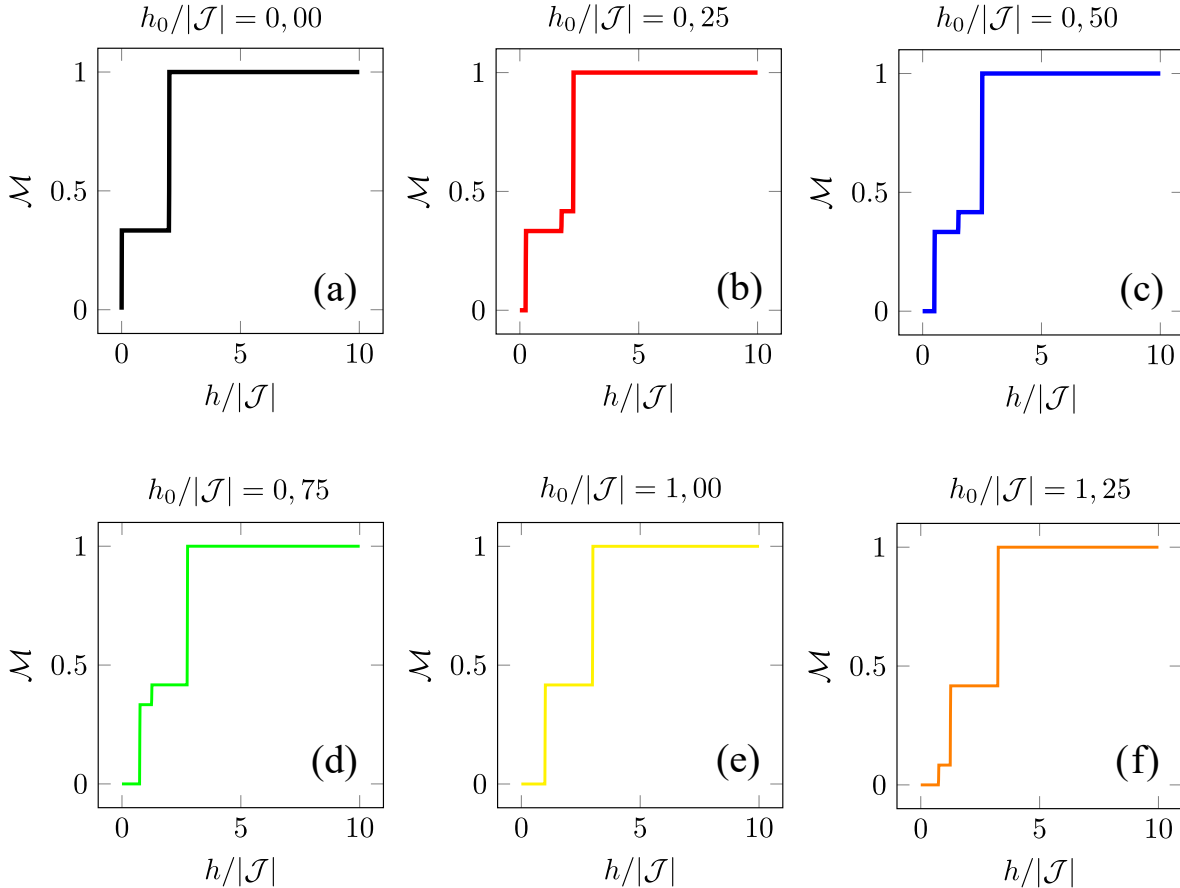
A variável de interesse quando estamos lidando com platôs na magnetização é o coeficiente angular de cada configuração de campos magnéticos aleatórios. Não precisamos nos preocupar com o seu valor, mas com sua variação conforme o campo magnético uniforme aumenta. Apenas precisamos reconhecer que cada coeficiente angular corresponde à magnetização por sítio de cada configuração de campos magnéticos aleatórios determinada anteriormente.

A ideia central é que os platôs na magnetização em $\mathcal{M} = 0,00$ e $\mathcal{M} = 0,41$ para distribuição bimodal de campos magnéticos aleatórios estão associados a intervalos de $h/|\mathcal{J}|$ nos quais u vs $h/|\mathcal{J}|$ contém pelo menos uma configuração de campos magnéticos aleatórios com coeficiente angular diferente. Para o intervalo $0,00 \leq h/|\mathcal{J}| \leq 0,50$ a metade das configurações

possui o coeficiente angular com sinal inverso, o que conduz ao platô na magnetização $\mathcal{M} = 0,00$. Para o intervalo $1,50 \leq h/|\mathcal{J}| \leq 2,50$ surge o platô na magnetização em $\mathcal{M} = 0,41$ porque a configuração $\{+, +, +\}$ de campos magnéticos aleatórios possui o coeficiente angular com inclinação mais proeminente dos demais para o mesmo intervalo.

Neste ponto, outro questionamento é: qual o comportamento de $\mathcal{M}$ vs $h/|\mathcal{J}|$ quando alteramos a intensidade dos campos magnéticos aleatórios? Vamos começar com a Figura 19 que mostra os gráficos de $\mathcal{M}$ vs $h/|\mathcal{J}|$ para diferentes intensidades de $h_0/|\mathcal{J}|$ para a distribuição bimodal de campos magnéticos aleatórios na rede triangular antiferromagnética com três sítios. A intensidade $h_0/|\mathcal{J}|$ aumenta em incrementos de 0,25. Exceto para (e), com intensidade $h_0/|\mathcal{J}| = 1$, que mostra dois platôs intermediários a magnetização de saturação, observamos três platôs na magnetização para (b), (c), (d) e (f).

Figura 19 – Gráficos da magnetização ($\mathcal{M}$) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) para diferentes intensidades de campos magnéticos aleatórios ($h_0/|\mathcal{J}|$) que seguem a distribuição bimodal na rede triangular antiferromagnética com três sítios. Valores de referência: $T/|\mathcal{J}| = 0,000001$ e $|\mathcal{J}| = 1$.

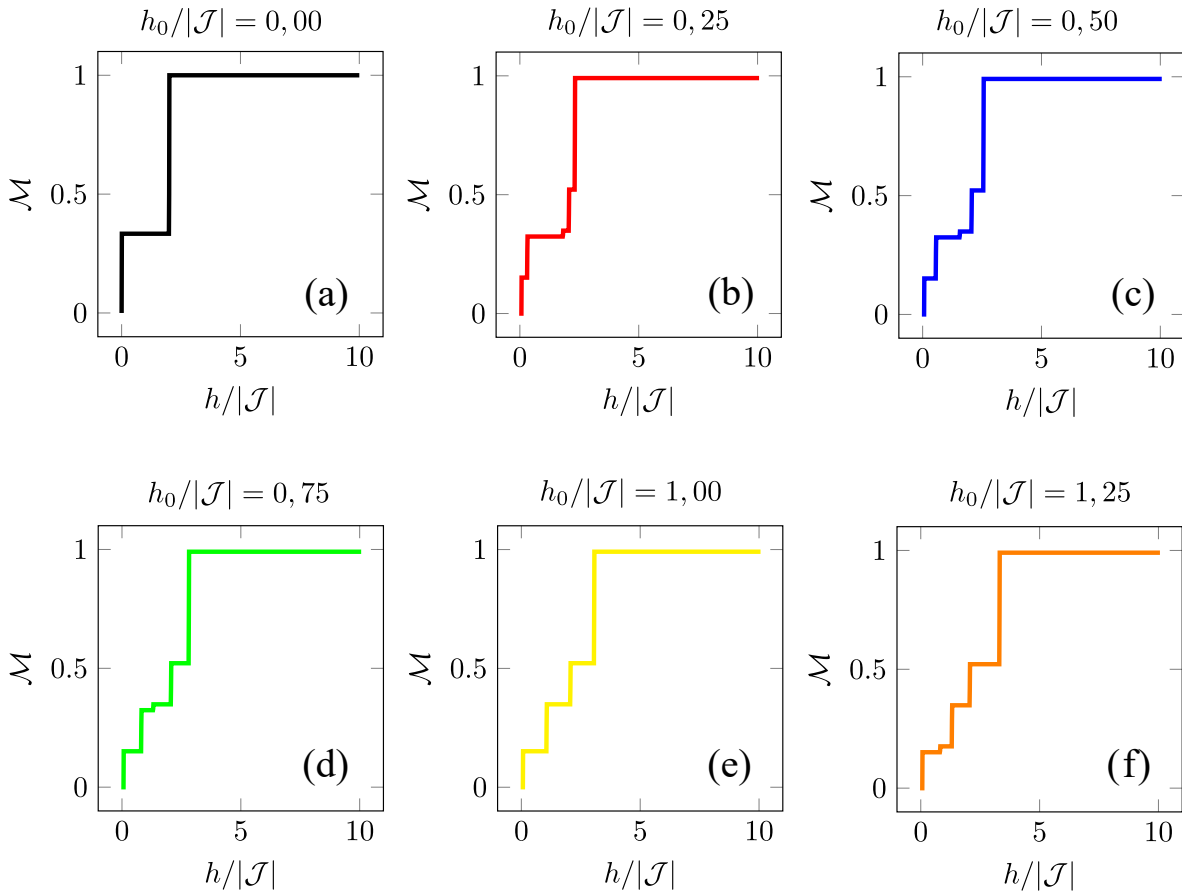


Fonte: elaborado pelo autor (2024).

O próximo passo é avaliar o mesmo para distribuição trimodal de campos magnéticos aleatórios. Isso é feito na Figura 20 que mostra que o comportamento de $\mathcal{M}$ vs $h/|\mathcal{J}|$ é similar, mas não igual, quando consideramos diferentes intensidades de $h_0/|\mathcal{J}|$. Exceto para (e) com três platôs na magnetização para a intensidade $h_0/|\mathcal{J}| = 1$, observamos quatro platôs na magnetização para (b), (c), (d) e (f). Afinal, por quê em $h/|\mathcal{J}| = 1$ existe um número específico

de platôs na magnetização? Ao aumentar $h_0/|\mathcal{J}|$ de 0 até 1,25 estamos variando os valores $h/|\mathcal{J}|$ para os quais a magnetização por número de sítios de cada configuração de campos magnéticos aleatórios (DB ou DT) apresenta platôs na magnetização. Assim, a fragmentação do platô na magnetização em $\mathcal{M} = 0,33$ se altera. Compreendemos isso como o deslocamento do gráfico de $\mathcal{M}$ vs $h/|\mathcal{J}|$ para maiores valores de $h/|\mathcal{J}|$. Isso afeta, principalmente, o intervalo $h/|\mathcal{J}|$ para o qual surgem os novos platôs na magnetização. Por conta disso, à medida que $h_0/|\mathcal{J}|$ aumenta, a transição para a saturação ocorre em valores mais elevados de $h/|\mathcal{J}|$.

Figura 20 – Gráficos da magnetização ($\mathcal{M}$) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) para diferentes intensidades de campos magnéticos aleatórios ($h_0/|\mathcal{J}|$) que seguem a distribuição trimodal na rede triangular antiferromagnética com três sítios. Valores de referência: $T/|\mathcal{J}| = 0,000001$ e $|\mathcal{J}| = 1$.

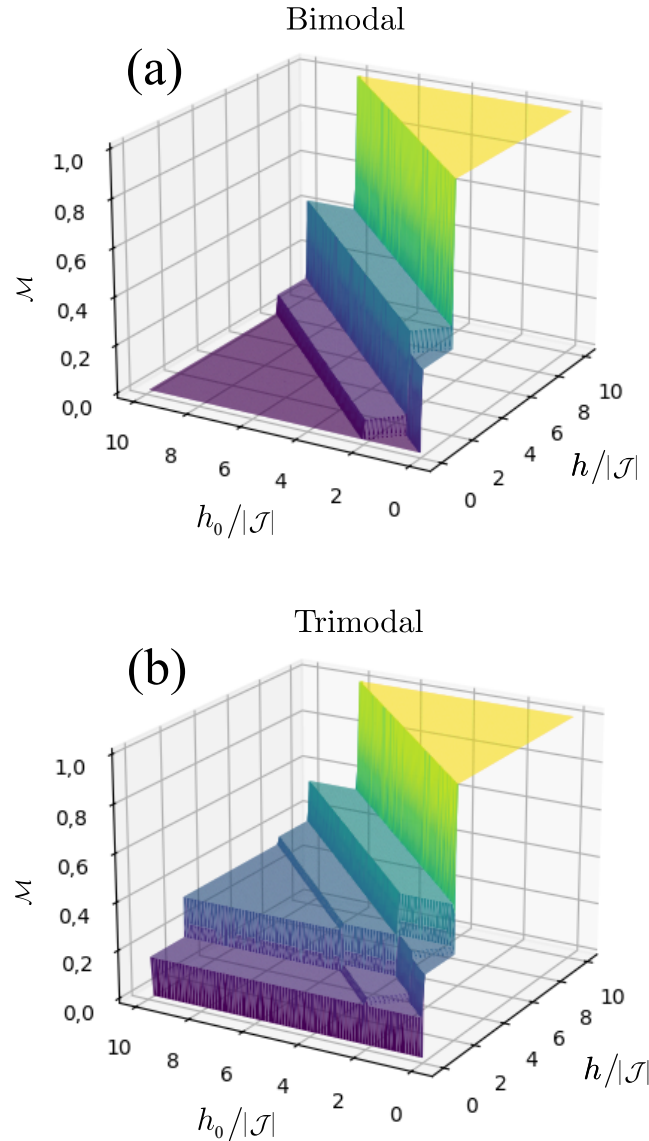


Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Para melhorar a explicação, considere o seguinte exemplo para distribuição bimodal de campos magnéticos aleatórios na rede triangular antiferromagnética com três sítios. Ao aumentar $h_0/|\mathcal{J}|$ de 0,25 para 0,5 estamos alterando de $0 \leq h/|\mathcal{J}| \leq 0,5$ para $0 \leq h/|\mathcal{J}| \leq 0,75$ o intervalo para o qual existe um platô na magnetização em $\mathcal{M} = 0,00$. Contudo, o intervalo para o platô na magnetização em $\mathcal{M} = 0,41$ muda de $1,5 \leq h/|\mathcal{J}| \leq 2,5$ para $1,25 \leq h/|\mathcal{J}| \leq 2,75$. O aumento da intensidade $h_0/|\mathcal{J}|$ também aumenta o intervalo $h/|\mathcal{J}|$ para o qual existem os novos platôs na magnetização. Quando $h_0/|\mathcal{J}| = 1$ o intervalo $h/|\mathcal{J}|$ para o platô na magnetização $\mathcal{M} = 0,41$ é o mesmo que para o platô na magnetização $\mathcal{M} = 0,33$. Neste caso, prevalece o platô em $\mathcal{M} = 0,33$. Quando $h_0/|\mathcal{J}| = 1,25$ temos o platô na magnetização em $\mathcal{M} = 0,08$.

A seguir, a Figura 21 mostra $\mathcal{M}$ vs $h/|\mathcal{J}|$ para um maior conjunto de valores $h_0/|\mathcal{J}|$. Em (a) e (b) torna-se evidente que existem intervalos para os quais $h_0/|\mathcal{J}|$ tem um menor número de platôs na magnetização. À medida que a intensidade $h_0/|\mathcal{J}|$ aumenta, o campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) necessário para atingir a saturação também aumenta de maneira linear.

Figura 21 – Magnetização por sítio ($\mathcal{M}$), campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) e intensidade dos campos magnéticos aleatórios ($h_0/|\mathcal{J}|$) para uma rede triangular antiferromagnética com três sítios. Vamos considerar uma análise separada para (a) distribuição bimodal e (b) distribuição trimodal de campos magnéticos aleatórios. Valores de referência: $T/|\mathcal{J}| = 0,000001$ e $|\mathcal{J}| = 1$.

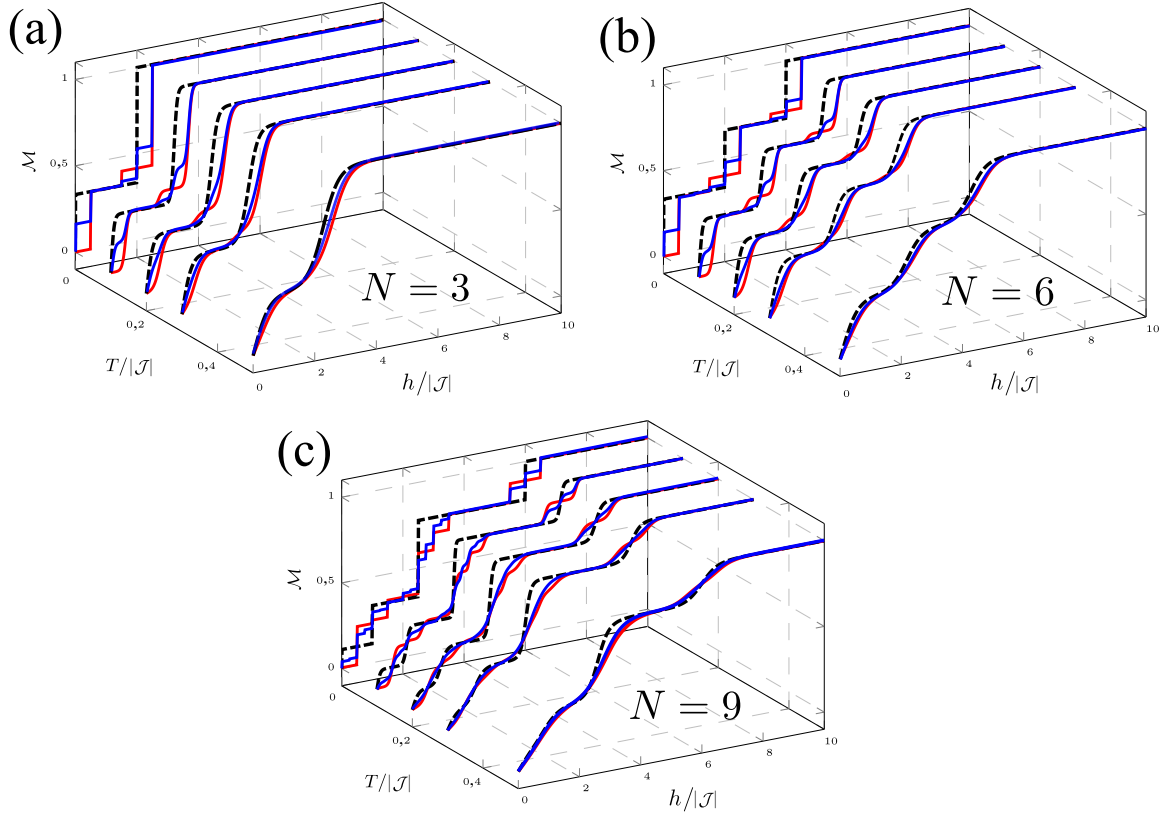


Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Para terminar nossa análise com relação a magnetização por sítio e por desordem, precisamos observar como $\mathcal{M}$ vs $h/|\mathcal{J}|$ se comporta ao aumentar a temperatura ($T/|\mathcal{J}|$). Isso é mostrado na Figura 22 para três *clusters* de geometria triangular com 3, 6 e 9 sítios, respectivamente. Para cada número de sítios, são mostrados gráficos para a ausência de campos magnéticos aleatórios (gráficos em linha pontilhada), com campos magnéticos que seguem a distribuição

bimodal (gráficos em vermelho) e para campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição trimodal (gráficos em azul).

Figura 22 – Magnetização ($\mathcal{M}$), campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) e temperatura ($T/|\mathcal{J}|$). Gráfico: ausência de campos magnéticos aleatórios (gráficos em linha pontilhada), distribuição bimodal (gráficos em vermelho) e distribuição trimodal (gráficos em azul) de campos magnéticos aleatórios. Valor de referência: $h_0/|\mathcal{J}| = 0,5$ e $|\mathcal{J}| = 1$.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Nos gráficos (a), (b) e (c) observamos que a temperatura influencia a estabilidade da estrutura de platôs na magnetização. Entende-se por estabilidade o intervalo $h/|\mathcal{J}|$ para o qual a magnetização é constante. Em $T/|\mathcal{J}| = 0$, os efeitos magnéticos são dominantes. Por exemplo, os platôs da magnetização são considerados um resultado advindo da presença de frustração magnética — via geometria do *cluster*. Consequentemente, há grande degenerescência de microestados para um campo externo de intensidade menor que o campo externo que conduz à magnetização de saturação do sistema. Quando a desordem via campos magnéticos aleatórios é considerada em nosso modelo, ocorre o surgimento de fragmentação adicional em relação a um cenário de frustração magnética existente.

Por outro lado, os resultados provenientes das interações magnéticas são fortemente afetados quando flutuações térmicas são consideradas. As flutuações térmicas introduzem desvios aleatórios a partir do estado médio que ocorre no sistema em equilíbrio, em que no caso dos momentos magnéticos, pode conduzir a uma alteração na orientação destes. À medida que a temperatura aumenta, a agitação térmica é responsável por desestabilizar os platôs na magnetização. O aumento da temperatura tende a afetar, portanto, a degenerescência dos microestados,

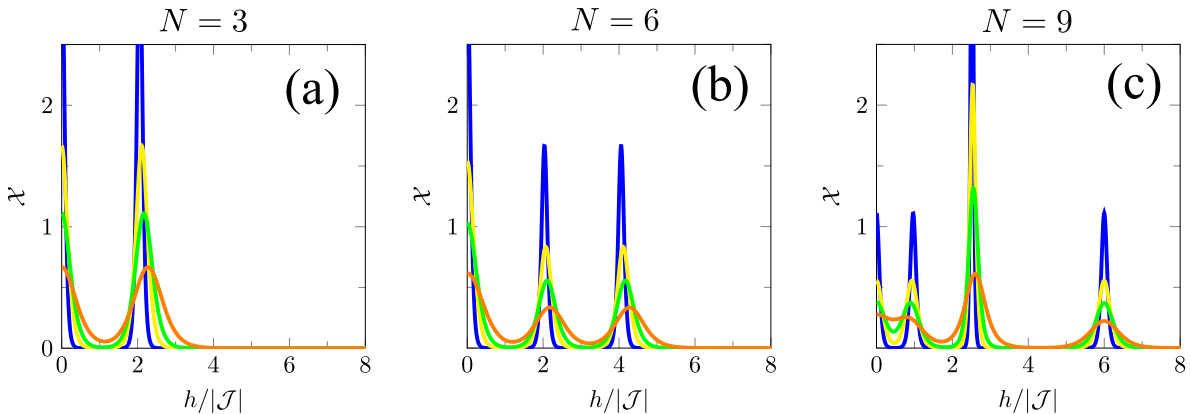
fazendo com que as mudanças na magnetização não ocorram de forma abrupta, mas sim de forma contínua e progressiva à medida que o campo externo é aumentado.

4.1.2 Susceptibilidade magnética

Nesta subseção, analisaremos o comportamento da susceptibilidade magnética (χ) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$). Para tanto, são utilizadas três *clusters* antiferromagnéticas com geometria triangular com 3, 6 e 9 sítios. Por que analisar a susceptibilidade magnética é importante? A susceptibilidade magnética ajuda a compreender melhor os platôs na magnetização. Uma vez que a susceptibilidade magnética é uma medida da resposta da magnetização quando aplicamos um campo magnético externo (em nosso caso, o campo magnético uniforme). Isto é, saberemos o quanto o valor da magnetização se altera na transição entre platôs na magnetização.

Na ausência de campos magnéticos aleatórios, a Figura 23 mostra os gráficos (a), (b) e (c) picos na susceptibilidade magnética para os valores $h/|\mathcal{J}|$ nos quais existe a transição entre platôs na magnetização. Esse é um comportamento característico da susceptibilidade magnética em antiferromagnetos que descrevem platôs na magnetização (SHANGGUAN et al., 2023). Mostrando, portanto, que o modelo descreve um comportamento conhecido. Observa-se que, nos pontos $h/|\mathcal{J}|$ onde a magnetização se mantém constante, a susceptibilidade magnética diminui. Existe, também, a susceptibilidade magnética diferente de zero quando o campo magnético uniforme é zero. Isso porque a magnetização apresenta um platô na magnetização em 1/3 da magnetização de saturação.

Figura 23 – Susceptibilidade magnética (χ) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) para ausência de campos magnéticos aleatórios. Valores de referência: $h_0/|\mathcal{J}| = 0,0$, $T/|\mathcal{J}| = 0,1$ (linha azul), $T/|\mathcal{J}| = 0,2$ (linha amarela), $T/|\mathcal{J}| = 0,3$ (linha verde), $T/|\mathcal{J}| = 0,5$ (linha laranja) e $|\mathcal{J}| = 1$.



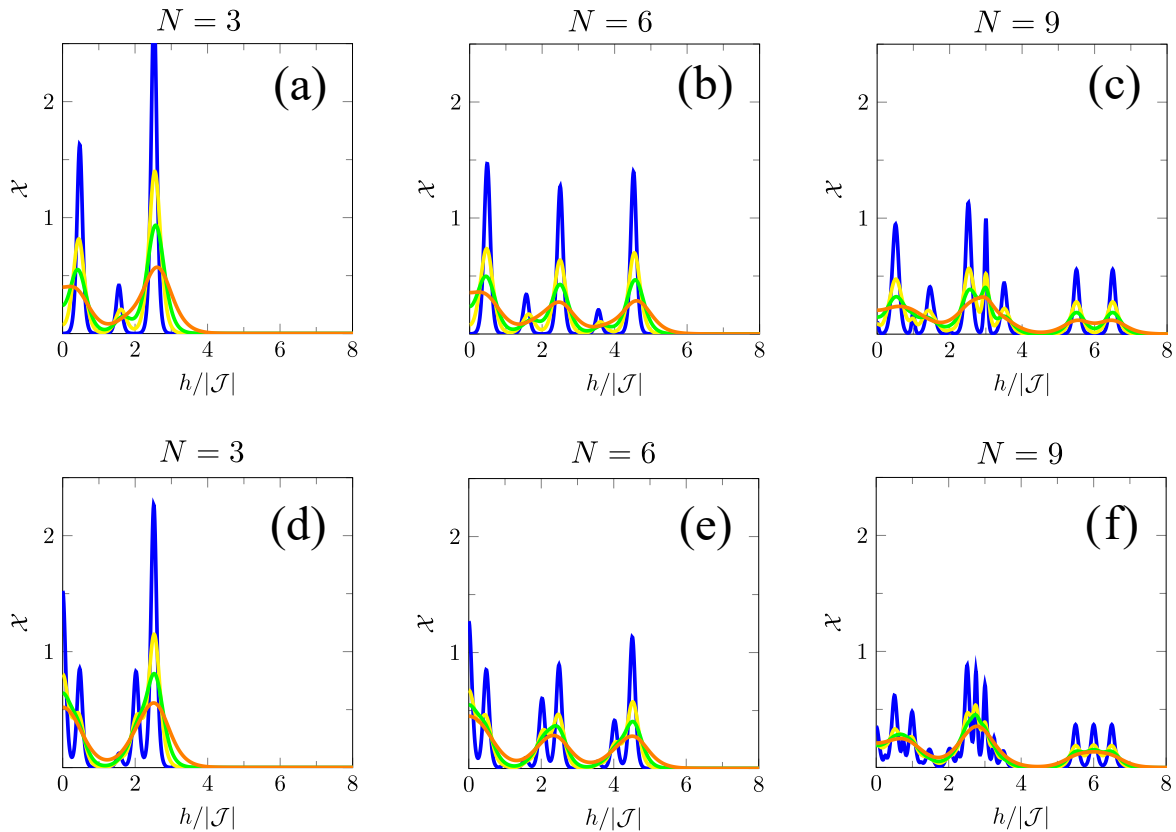
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Nos gráficos (a), (b) e (c) da Figura 23, verificamos como χ vs $h/|\mathcal{J}|$ se comporta quanto ao aumento do número de sítios da rede. Ao aumentar o número de sítios da rede, o número de platôs na magnetização aumenta. Consequentemente, o número de picos na susceptibilidade magnética aumenta, mas reduzimos a intensidade da mesma. A diferença entre os valores de magnetização dos platôs na magnetização passa a ser menor.

Nos mesmos gráficos, verificamos, também, como χ vs $h/|\mathcal{J}|$ se comporta quanto ao aumento da temperatura. Ao aumentar a temperatura, a intensidade na variação da susceptibilidade magnética diminui. Os picos são mais estreitos quando a temperatura é menor, como, por exemplo, em $T/|\mathcal{J}| = 0,1$ e mais largos conforme a temperatura aumenta, como, por exemplo, em $T/|\mathcal{J}| = 0,5$. Uma explicação para tal comportamento é a relação antagônica entre a frustração magnética e a temperatura. Isso porque a frustração magnética é mais pronunciada em temperaturas baixas, resultando em picos estreitos na susceptibilidade. Conforme a temperatura aumenta, a energia térmica passa a dominar, reduzindo os efeitos da frustração e suavizando a resposta magnética, o que alarga os picos.

Na Figura 24, os gráficos (a), (b), (c), (d), (e) e (f) mostram que a diferença na susceptibilidade magnética quando consideramos campos magnéticos aleatórios é o aumento no número de picos, pois aumentam o número de platôs na magnetização. Esse é um comportamento coerente com os resultados para a ausência de campos magnéticos aleatórios, e preserva as demais características analisadas.

Figura 24 – Susceptibilidade magnética (χ) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$). Gráfico: distribuição bimodal (acima) e distribuição trimodal (abaixo). Valores de referência: $h_0/|\mathcal{J}| = 0,5$, $T/|\mathcal{J}| = 0,1$ (linha azul), $T/|\mathcal{J}| = 0,2$ (linha amarela), $T/|\mathcal{J}| = 0,3$ (linha verde), $T/|\mathcal{J}| = 0,5$ (linha laranja) e $|\mathcal{J}| = 1$.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

No gráficos acima, observamos em (a), (b) e (c) um menor número de picos na susceptibilidade magnética do que em (d), (e) e (f). Entendemos esse comportamento da susceptibilidade magnética porque sabemos que campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição trimodal

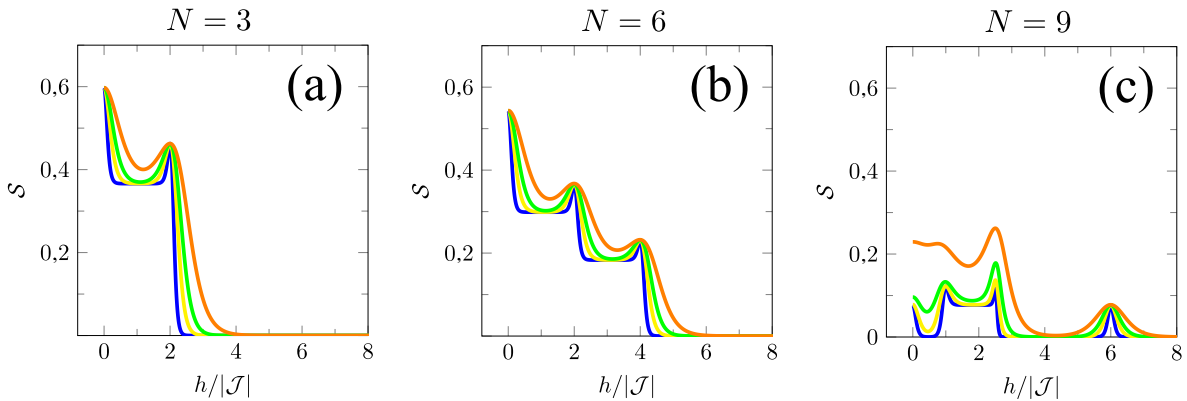
apresentam um maior número de platôs na magnetização do que campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição bimodal. O que acontece ao aumentar a intensidade dos campos magnéticos aleatórios? Esperamos que os picos na susceptibilidade magnética sejam deslocados para maiores valores de $h/|\mathcal{J}|$. Isso quer dizer que o aumento de $h_0/|\mathcal{J}|$ pode impactar a resposta da susceptibilidade magnética ao campo magnético uniforme.

4.1.3 Entropia magnética

Nesta subseção, analisaremos o comportamento da entropia magnética (S) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$). Para tanto, são utilizadas três *clusters* antiferromagnéticas com geometria triangular com 3, 6 e 9 sítios. Por que analisar a entropia magnética é importante? Em essência, grandes mudanças na magnetização são atreladas aos picos na entropia magnética.

Na ausência de campos magnéticos aleatórios, a Figura 25 mostra em (a), (b) e (c), para diferentes valores de $T/|\mathcal{J}|$, que a entropia magnética apresenta um valor residual quando $h/|\mathcal{J}| = 0$. Essa entropia magnética residual é uma assinatura de *clusters* com frustração magnética via geometria (BRADLEY et al., 2019). Mostrando, mais uma vez, que o modelo é capaz de descrever um comportamento conhecido. É importante observar que existe o ganho de entropia magnética para os valores de campo magnético uniforme que correspondem à transição entre platôs na magnetização. A entropia magnética aumenta monotonicamente com a temperatura.

Figura 25 – Entropia magnética (S) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) para ausência de campos magnéticos aleatórios. Valores de referência: $h_0/|\mathcal{J}| = 0,0$, $T/|\mathcal{J}| = 0,1$ (linha azul), $T/|\mathcal{J}| = 0,2$ (linha amarela), $T/|\mathcal{J}| = 0,3$ (linha verde), $T/|\mathcal{J}| = 0,5$ (linha laranja) e $|\mathcal{J}| = 1$.

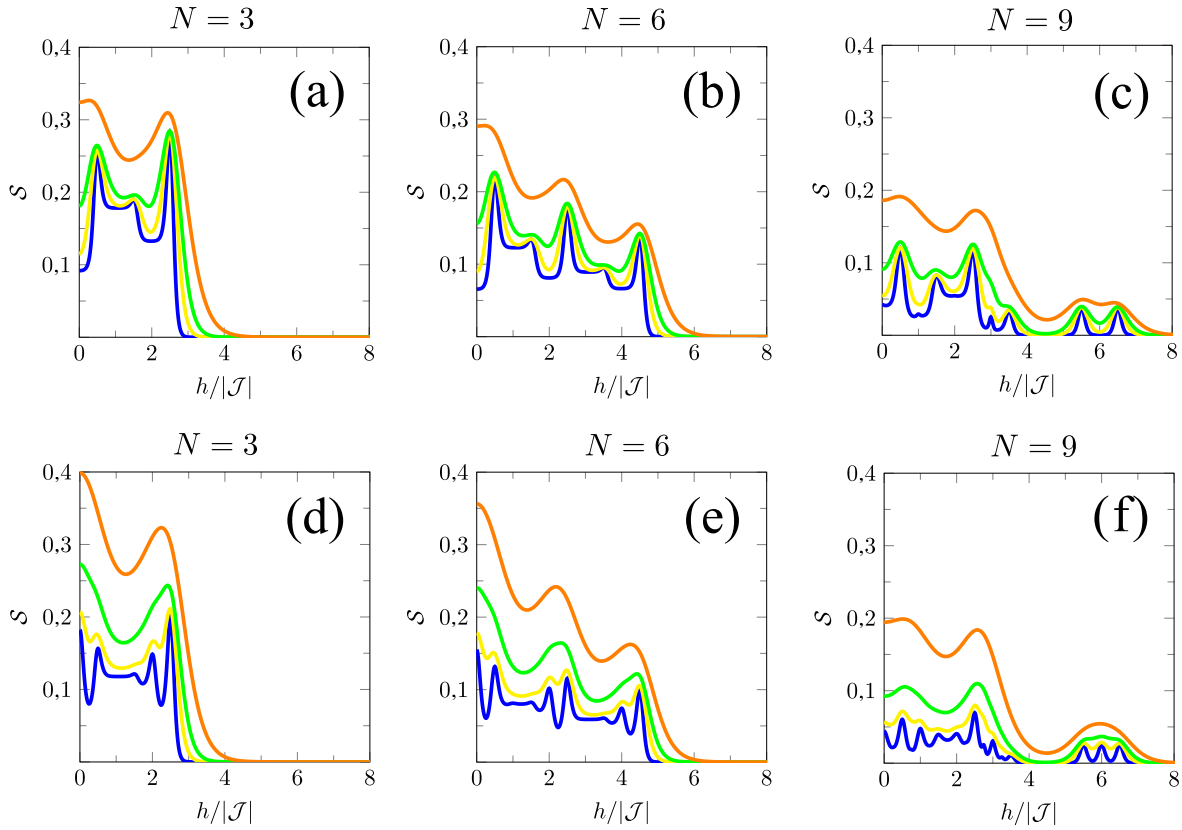


Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Os gráficos (a), (b), (c), (d), (e) e (f) da Figura 26 mostram que os campos magnéticos aleatórios (DB e DT) introduzem picos na entropia magnética, sendo um ganho entrópico, mas são menores quando comparados aos resultados para ausência de campos magnéticos aleatórios. Mesmo assim, existem novos picos na entropia magnética. Isso pode ser visto no comparativo entre (a), (b) e (b) ou (d), (e) e (f). Essa comparação evidencia que a escolha da distribuição de probabilidades associada aos campos magnéticos é importante. O ganho na entropia magnética é mais proeminente para distribuição trimodal de campos magnéticos aleatórios do que para

distribuição bimodal de campos magnéticos aleatórios. Para ambos os casos, o aumento na temperatura faz com que a entropia magnética aumente monotonicamente.

Figura 26 – Entropia magnética ($\mathcal{S}$) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$). Gráfico: distribuição bimodal (acima) e distribuição trimodal (abaixo). Valores de referência: $h_0/|\mathcal{J}| = 0,5$, $T/|\mathcal{J}| = 0,1$ (linha azul), $T/|\mathcal{J}| = 0,2$ (linha amarela), $T/|\mathcal{J}| = 0,3$ (linha verde), $T/|\mathcal{J}| = 0,5$ (linha laranja) e $|\mathcal{J}| = 1$.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

A ideia central é que o comportamento da entropia magnética mostra que a desordem via campos magnéticos aleatórios diminui a entropia máxima, mas o número de picos é maior. Isto pode ser utilizado para alterar os valores de campo uniforme nas quais ocorrem esses picos na entropia magnética. Assim, um modelo antiferromagneto com rede de geometria triangular com a desordem via campos magnéticos aleatórios poderia ser de interesse no efeito magnetocalórico. A partir da fragmentação do número de platôs na magnetização, podemos observar picos na entropia magnética para menores valores de campo magnético uniforme, algo de interesse do ponto de vista experimental como, por exemplo, sugerido por Liu et al. (2023).

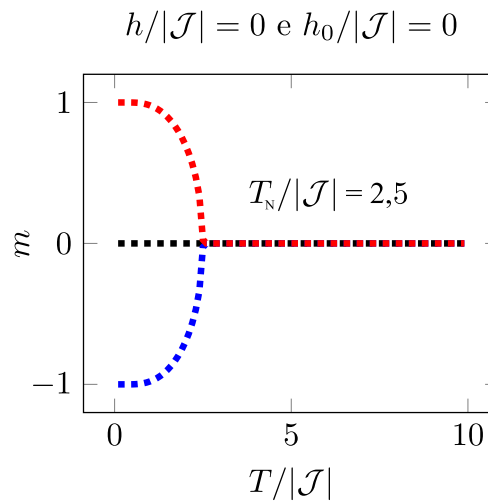
4.2 Método: aproximação de campo médio com *clusters*

Nesta seção, mostramos o comportamento da magnetização ($\mathcal{M}$), susceptibilidade magnética ($\mathcal{X}$) e entropia magnética ($\mathcal{S}$) considerando uma rede infinita via aproximação de campo médio com *clusters*. Isso significa que estamos analisando o sistema no limite termodinâmico e, portanto, podemos comparar a análise para a rede com um número finito de sítios. Um *cluster* de geometria triangular com três sítios é utilizado para realizar a aproximação de campo médio.

4.2.1 Magnetização

No gráfico da Figura 27 mostramos o gráfico da magnetização de cada sítio do *cluster* em função da temperatura para ausência de campos magnéticos. É observado que a magnetização decresce com a temperatura até se anular para a temperatura conhecida como temperatura de transição, dada por $T_N/|\mathcal{J}| = 2,6$. Para $T/|\mathcal{J}| \leq T_N/|\mathcal{J}|$, $m_1 = m_3 \neq 0$ com m_1 e m_3 apresentam os mesmos valores absolutos, mas com sinais opostos, e $m_2 = 0$, significando que o sistema se encontra em um ordenamento antiferromagnético. Para $T/|\mathcal{J}| > T_N/|\mathcal{J}|$, $m_1 = m_2 = m_3 = 0$, significando que o sistema apresenta uma ordem paramagnética, com a anulação dos parâmetros de ordem que ocorre quando todas as magnetizações de cada sítio se anulam. É válido notar que a magnetização total $m_1 + m_2 + m_3$ é zero ao longo do intervalo de temperatura apresentado. Esse comportamento mostra que o modelo está em concordância com aquilo que é visto na literatura científica do assunto (veja Yokota (2014)), sendo um resultado conhecido em sistemas do tipo Ising que são antiferromagnetos na ausência de campos magnéticos.

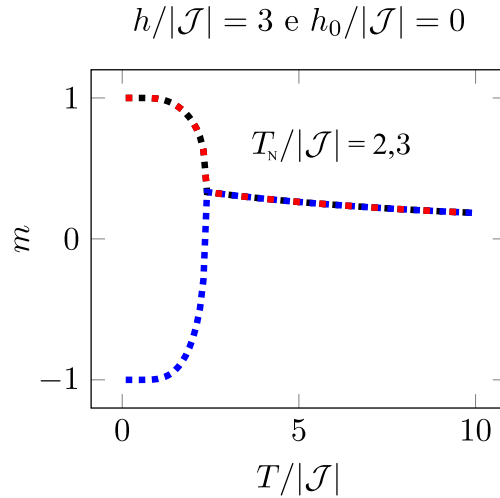
Figura 27 – Magnetizações locais (m) em função da temperatura ($T/|\mathcal{J}|$) para ausência de campos magnéticos. As linhas vermelhas, pretas e azuis representam as magnetizações m_1 , m_2 e m_3 respectivamente. Valor de referência: $|\mathcal{J}| = 1$.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

No gráfico da Figura 28, observamos o comportamento da magnetização de cada sítio do *cluster* em função da temperatura quando consideramos apenas o campo magnético uniforme. Para o intervalo de temperatura que consideramos, a magnetização total $\mathcal{M}$ não se anula. Em $T_N/|\mathcal{J}| = 2,5$, é observada uma mudança abrupta no comportamento das magnetizações locais. Para $T/|\mathcal{J}| < T_N/|\mathcal{J}|$, verifica-se que m_1 e m_3 não apresentam os mesmos valores absolutos, com exceção de seus valores próximos à $T/|\mathcal{J}| \approx 0$. Ademais, m_2 agora apresenta o mesmo valor absoluto de m_1 quando $T/|\mathcal{J}| < T_N/|\mathcal{J}|$. Particularmente, $m_1 = m_2 \rightarrow 1$ e $m_3 \rightarrow -1$ à medida que a temperatura é diminuída. Adicionalmente, as magnetizações locais $m_1 = m_2 = m_3$ são as mesmas para $T/|\mathcal{J}| > 2,5$, mas não são zero. Com base nestas informações, é observada a transição de uma fase parcialmente antiferromagnética para a fase paramagnética com magnetização induzida.

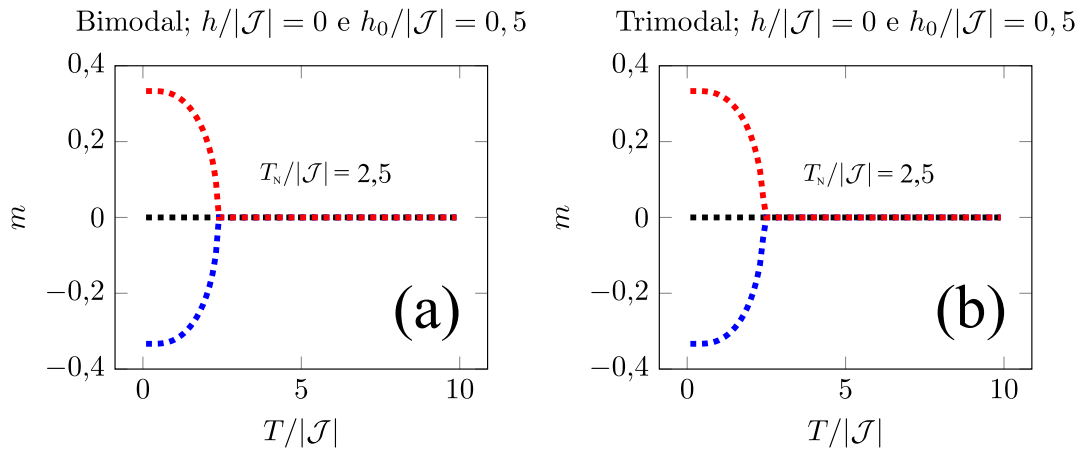
Figura 28 – Magnetizações locais (m) em função da temperatura ($T/|\mathcal{J}|$) com campo magnético uniforme. As linhas vermelhas, pretas e azuis representam as magnetizações m_1 , m_2 e m_3 respectivamente. Valor de referência: $|\mathcal{J}| = 1$.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

No gráficos (a) e (b) da Figura 29 mostramos como a magnetização de cada sítio do *cluster* em função da temperatura se comporta quando apenas os campos magnéticos aleatórios $h_0/|\mathcal{J}| = 0,5$ são considerados. No gráfico (a) os campos magnéticos aleatórios seguem a distribuição bimodal, com $T_N/|\mathcal{J}| = 2,5$. No gráfico (b) os campos magnéticos aleatórios seguem a distribuição trimodal, com $T_N/|\mathcal{J}| = 2,5$. Tenha em mente que os gráficos mostram que os campos magnéticos aleatórios alteram a temperatura de transição entre a fase antiferromagnética e paramagnética, mas sem magnetização induzida.

Figura 29 – Magnetizações locais (m) em função da temperatura ($T/|\mathcal{J}|$) com campos magnéticos aleatórios. Gráfico: distribuição bimodal (a esquerda) e distribuição trimodal (a direita). As linhas vermelhas, pretas e azuis representam as magnetizações m_1 , m_2 e m_3 respectivamente. Valor de referência: $|\mathcal{J}| = 1$.

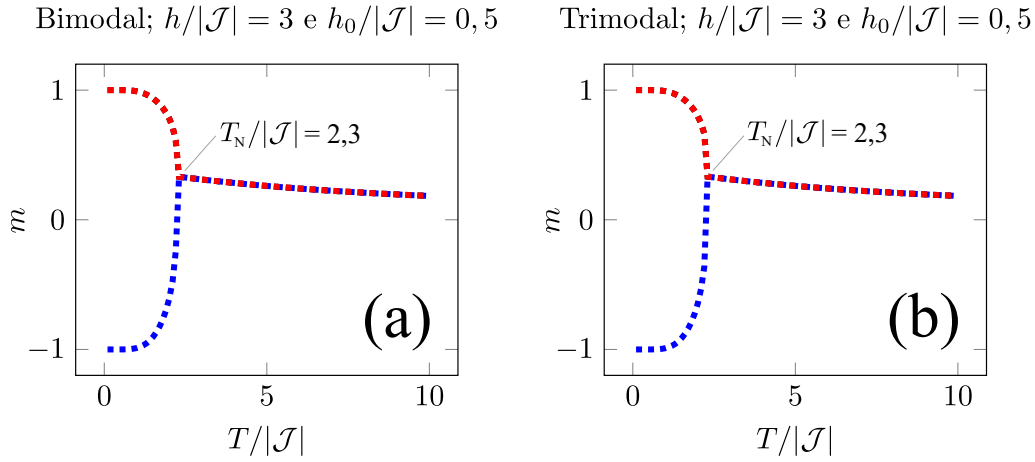


Fonte: elaborado pelo autor (2024).

A Figura 30 mostra como a magnetização de cada sítios do *cluster* em função da temperatura se comporta quando ambos, o campo magnético uniforme $h/|\mathcal{J}| = 3$ e os campos magnéticos aleatórios $h_0/|\mathcal{J}| = 0,5$, são considerados. No gráfico (a) os campos magnéticos aleatórios seguem a distribuição bimodal, com $T_N/|\mathcal{J}| = 2,3$. No gráfico (b) os campos magnéticos

aleatórios seguem a distribuição trimodal, com $T_N/|\mathcal{J}| = 2,3$. A diferença é que a transição é da fase antiferromagnética para fase paramagnética, mas com magnetização induzida.

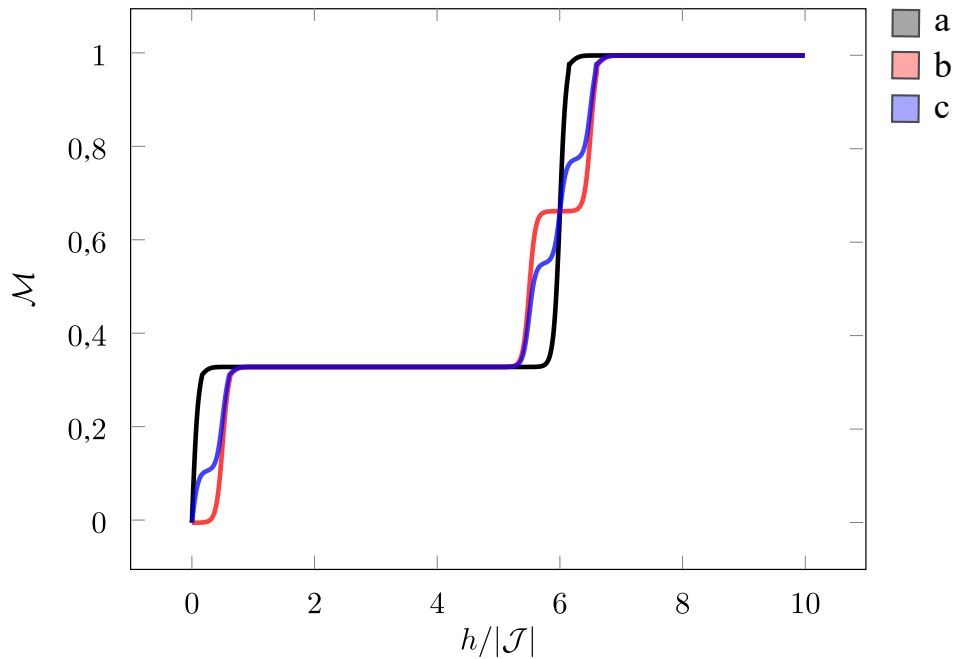
Figura 30 – Magnetizações locais (m) em função da temperatura ($T/|\mathcal{J}|$) quando ambos, o campo magnético uniforme e os campos magnéticos aleatórios, são considerados. Gráfico: distribuição bimodal (a) e distribuição trimodal (b). Valor de referência: $|\mathcal{J}| = 1$.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Na Figura 31 mostramos o comportamento da magnetização ($\mathcal{M}$) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) via aproximação de campo médio com *clusters*. Os gráficos correspondem a três cenários distintos: (a) ausência de campos magnéticos aleatórios; (b) presença de campos magnéticos aleatórios seguindo uma distribuição bimodal; e (c) campos magnéticos aleatórios que obedecem a uma distribuição trimodal. Essa análise é realizada para $T/|\mathcal{J}| = 0,1$.

Figura 31 – Magnetização ($\mathcal{M}$) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) via aproximação de campo médio com *clusters*. Gráfico: (a) ausência de campos magnéticos aleatórios, (b) campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição bimodal e (c) campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição trimodal. Valores de referência: $h_0/|\mathcal{J}| = 0,5$, $T/|\mathcal{J}| = 0,1$ e $|\mathcal{J}| = 1$.



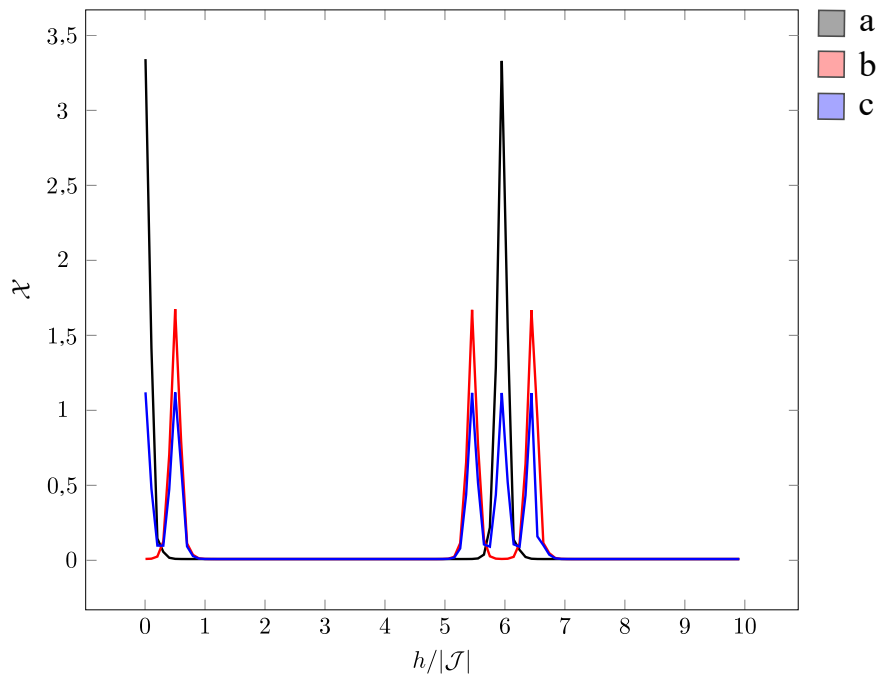
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Para o gráfico (a) da Figura 31 o modelo para ausência de campos magnéticos aleatórios via aproximação de campo médio com *cluster* é qualitativamente similar ao que Soldatov et al. (2019) alcançaram via método de Monte Carlo para ausência de diluição. Podemos observar em $\mathcal{M} = 0,33$ um platô intermediário à magnetização de saturação. A esse respeito, nos gráficos (b) e (c), observamos que a desordem local via campos magnéticos aleatórios acrescenta platôs na magnetização, são eles: três platôs intermediários à magnetização de saturação em $\mathcal{M} = 0,00$, $\mathcal{M} = 0,33$ e $\mathcal{M} = 0,66$ para distribuição bimodal de campos magnéticos aleatórios; quatro platôs intermediários à magnetização de saturação em $\mathcal{M} = 0,11$, $\mathcal{M} = 0,33$, $\mathcal{M} = 0,55$ e $\mathcal{M} = 0,77$ para distribuição trimodal de campos magnéticos aleatórios. Esses platôs na magnetização, vale pontuar, surgem ao custo do que consideramos como a fragmentação dos platôs na magnetização para ausência de campos magnéticos aleatórios.

4.2.2 Susceptibilidade magnética

Na Figura 32 mostramos o comportamento da susceptibilidade magnética (χ) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) via aproximação de campo médio com *clusters* nos cenários: (a) ausência de campos magnéticos aleatórios, (b) campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição bimodal e (c) campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição trimodal. Essa análise é realizada para $T/|\mathcal{J}| = 0,1$.

Figura 32 – Susceptibilidade magnética (χ) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) via aproximação de campo médio com *clusters*. Gráfico: (a) ausência de campos magnéticos aleatórios, (b) campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição bimodal e (c) campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição trimodal. Valores de referência: $h_0/|\mathcal{J}| = 0,0$, $h_0/|\mathcal{J}| = 0,5$, $T/|\mathcal{J}| = 0,1$ e $|\mathcal{J}| = 1$.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

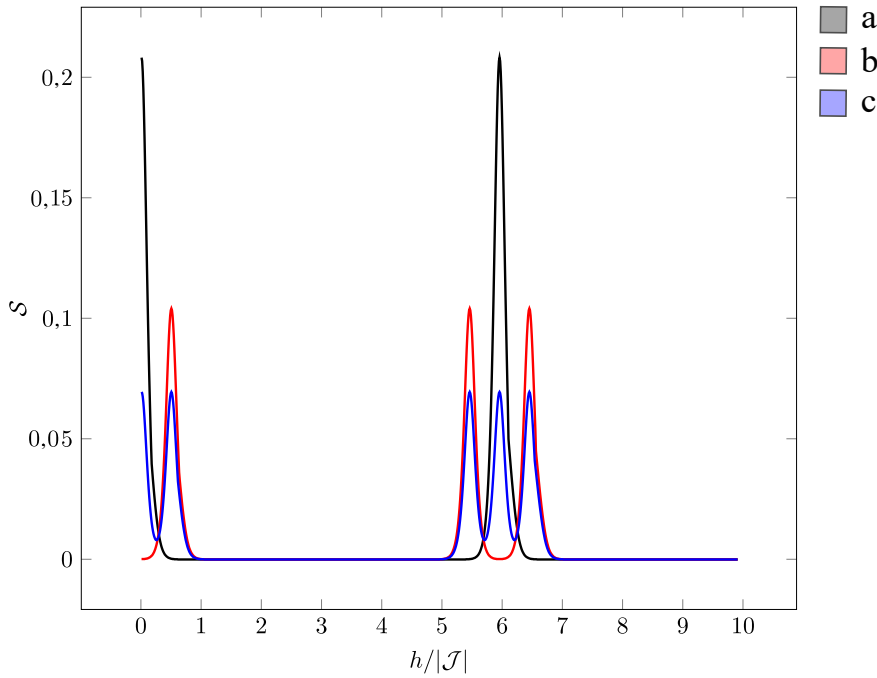
Percebe-se, a princípio, que no gráfico (a) da Figura 32 existe um pico na susceptibilidade magnética na região em que existe o platô na magnetização em $1/3$ da magnetização de saturação.

Uma consequência da desordem via campos magnéticos aleatórios em (b) e (c) é que surgem mais platôs intermediários à magnetização de saturação, o que faz a susceptibilidade magnética apresentar mais picos, mas com menor intensidade.

4.2.3 Entropia magnética

Na Figura 33 mostramos o comportamento da entropia magnética ($\mathcal{S}$) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) via aproximação de campo médio com *clusters* nos cenários: (a) ausência de campos magnéticos aleatórios, (b) campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição bimodal e (c) campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição trimodal. Essa análise é realizada para $T/|\mathcal{J}| = 0,1$.

Figura 33 – Entropia magnética ($\mathcal{S}$) em função do campo magnético uniforme ($h/|\mathcal{J}|$) via aproximação de campo médio com *clusters*. Gráfico: (a) ausência de campos magnéticos aleatórios, (b) campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição bimodal e (c) campos magnéticos aleatórios que seguem a distribuição trimodal. Valores de referência: $h_0/|\mathcal{J}| = 0,0$, $h_0/|\mathcal{J}| = 0,5$, $T/|\mathcal{J}| = 0,1$ e $|\mathcal{J}| = 1$.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

No gráfico (a) destaca-se uma entropia magnética residual para $h/|\mathcal{J}| = 0$, e um ganho na entropia magnética para $h/|\mathcal{J}| = 6$, ambos os valores correspondem ao intervalo de existência de um platô na magnetização. No mesmo sentido, nos gráficos (b) e (c) observamos que a desordem via campos magnéticos aleatórios causa a diminuição da entropia magnética máxima, mas em contrapartida adiciona novos picos de entropia. Vemos, também, uma redução da frustração geométrica, sendo causada pela aproximação de campo médio com *clusters*. Isso significa que a aproximação de campo médio com *clusters* estaria atenuando a degenerescência associada aos platôs na magnetização. Assim, não há uma entropia magnética diferente de zero nos valores $h/|\mathcal{J}|$ em que existem os platôs como, por exemplo, observado anteriormente para a rede com número finito de sítios.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho, investigamos a influência da desordem induzida por campos magnéticos aleatórios na fragmentação de platôs na magnetização em antiferromagnetos em *clusters* de geometria triangular, utilizando o modelo de Ising. O objetivo principal foi avaliar se, além da diluição com íons não magnéticos, a desordem via campos magnéticos aleatórios poderia também causar a fragmentação de platôs de magnetização. Para isso, combinamos efeitos de frustração geométrica inerentes à rede de geometria triangular com desordem local, introduzida pelos campos magnéticos aleatórios.

Utilizamos duas metodologias complementares para atingir nossos objetivos: o método da enumeração exata aplicado a redes finitas com 3, 6, 9 e 15 sítios, e a aproximação de campo médio com *clusters* para redes infinitas. Analisamos as propriedades magnéticas fundamentais, tais como magnetização ($\mathcal{M}$), susceptibilidade magnética ($\mathcal{X}$) e entropia magnética ($\mathcal{S}$), sob a influência de campos magnéticos aleatórios com distribuições bimodal e trimodal, além do campo magnético uniforme.

Os resultados obtidos a partir da enumeração exata mostraram que, mesmo em *clusters*, a presença de campos magnéticos aleatórios leva ao surgimento de novos platôs na magnetização. Observamos que o número e a posição desses platôs dependem tanto da distribuição de probabilidades dos campos aleatórios quanto da intensidade $h_0/|\mathcal{J}|$. Em particular, a distribuição trimodal, por possuir um maior número de configurações possíveis, resultou em um número maior de platôs em comparação com a distribuição bimodal. Além disso, verificamos que o aumento da intensidade dos campos magnéticos aleatórios desloca os platôs para valores mais altos de campo magnético uniforme, indicando que a desordem pode ser utilizada como um mecanismo de controle sobre a estrutura de platôs na magnetização.

A análise da susceptibilidade magnética corroborou esses achados, mostrando variações abruptas nos pontos de transição entre os platôs, cujo número aumentou com a introdução de campos magnéticos aleatórios. Esse comportamento é consistente com a existência de múltiplos platôs na magnetização e evidencia a sensibilidade do sistema a pequenas variações nos campos aplicados.

A aproximação de campo médio com *clusters* permitiu estender a análise para o limite termodinâmico. Os resultados confirmaram as tendências observadas nas redes finitas, evidenciando que a desordem induzida por campos magnéticos aleatórios fragmenta os platôs de magnetização também em sistemas infinitos. Notavelmente, identificamos a presença de novos platôs intermediários, bem como o deslocamento dos pontos de saturação da magnetização, reforçando a robustez dos efeitos da desordem via campos magnéticos aleatórios na fragmentação de platôs de magnetização.

As implicações desse estudo são duplas: do ponto de vista fundamental, contribui para o entendimento dos efeitos da desordem em sistemas magnéticos frustrados; do ponto de vista experimental, pode direcionar à investigação de materiais magnetocalóricos em contexto de

diluição, uma vez que o controle sobre a estrutura de platôs pode ser de relevância para a otimização do desempenho desses materiais em dispositivos de refrigeração magnética.

Concluimos, portanto, que a desordem introduzida por campos magnéticos aleatórios é capaz de fragmentar platôs de magnetização em antiferromagnetos com geometria de rede triangular, de maneira análoga ao efeito da diluição com íons não magnéticos. Esse resultado estabelece uma conexão significativa entre os fenômenos de frustração magnética e desordem, ampliando a compreensão dos mecanismos que governam a formação de platôs magnéticos. Esperamos que esses resultados incentivem novas pesquisas na área e contribuam para o avanço do conhecimento em física da matéria condensada e em aplicações tecnológicas na refrigeração magnética.

Como perspectivas para trabalhos futuros, sugerimos a investigação de outras formas de desordem, como distribuições contínuas de campos magnéticos aleatórios, e a análise de sistemas em três dimensões ou com outras geometrias de rede.

REFERÊNCIAS

- AKRAM, W. et al. **Evolution of the inverse magnetocaloric effect for random-field to spin-glass crossover in $\text{SmCaCoMnO}_6\text{-SmMnO}_3$ nanocomposite.** Physical Review B, American Physical Society, v. 107, p. 224403, 2023. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.107.224403>>.
- ANTONIO, G. A. et al. **Magnetocaloric effect in Cu_3 -type compounds using the Heisenberg antiferromagnetic model in a triangular ring.** Physical Review B, v. 108, p. 134415, 2023. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.108.134415>>.
- ATKINS, P.; JONES, L.; LAVERMAN, L.
Princípios de Química: Questionando a Vida Moderna e o Meio Ambiente. 7. ed. Porto Alegre: Bookman, 2018. 1094 p.
- BLAVZKOVA, M. et al. **Adiabatic Demagnetization and Magnetocaloric Effect of TbAl_2 .** Czech Journal of Physics, v. 54, p. 331–334, 2004. Disponível em: <<https://link.springer.com/article/10.1007/s10582-004-0094-3>>.
- BLUNDELL, S. Magnetism in Condensed Matter. 1. ed. New York: Oxford University Press, 2001.
- BRADLEY, O. et al. **Robustness of entropy plateaus: A case study of triangular Ising antiferromagnets.** Physical Review B, v. 100, n. 6, p. 064414, 2019. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.100.064414>>.
- BRUSH, S. G. **History of the Lenz-Ising model.** Reviews of Modern Physics, v. 39, p. 883, 1967. Disponível em: <<https://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.39.883>>.
- CALLISTER WILLIAM D., J. Materials Science and Engineering: An Introduction. 7. ed. New York: John Wiley & Sons, 2007.
- CAPELLADES, G.; BONSU, J. O.; MYERSON, A. S. **Impurity incorporation in solution crystallization: diagnosis, prevention, and control.** CrystEngComm, Royal Society of Chemistry, v. 24, p. 1989, 2022. Disponível em: <<https://pubs.rsc.org/en/content/articlehtml/2022/ce/d1ce01721g>>.
- DUIJN, J. van et al. **Random Fields and the Partially Paramagnetic State of $\text{CsCo}_{0.83}\text{Mg}_{0.17}\text{Br}_3$: Critical Scattering Study.** Physical Review Letters, American Physical Society, v. 92, n. 7, p. 077202, 2004. Disponível em: <<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/14995878/>>.
- GROSSKLAGS, M.
Diagrama de fases de sistema magnéticos com interação de Dzyaloshinskii-Moriya. Dissertação (Dissertação (Mestrado em Física)) — Universidade Federal de Florianópolis, Florianópolis, 2020. Disponível em: <<https://repositorio.ufsc.br/handle/123456789/216042>>.
- GUTFLEISCH, O. et al. **Magnetic Materials and Devices for the 21st Century: Stronger, Lighter, and More Energy Efficient.** Advanced Materials, Wiley, v. 23, n. 7, p. 821–842, 2011. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/adma.201002180>>.

HADJIAGAPIOU, I. A. **The random-field Ising model with asymmetric bimodal probability distribution.** *Physica A*, v. 389, p. 3945–3955, 2010. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0378437110004632>>.

HONECKER, A. **A comparative study of the magnetization process of two-dimensional antiferromagnets.** *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 24, p. 4697–4713, 1999. Disponível em: <<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-8984/11/24/311/pdf>>.

IMRY, Y.; MA, S.-k. **Random-Field Instability of the Ordered State of Continuous Symmetry.** *Physical Review Letters*, v. 35, n. 21, p. 1399–1401, 1975. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.35.1399>>.

JIN, S. et al. **Phase transitions in the frustrated Ising model on the square lattice.** *Physical Review B*, v. 87, p. 144406, 2013. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.87.144406>>.

JURCISINOVA, E.; JURCISIN, M. **Applicability of effective field theory cluster approximations for investigation of geometrically frustrated magnetic systems: Antiferromagnetic model on kagome lattice.** *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 514, p. 644–657, 2019. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0378437118312925>>.

KITTEL, C. *Introduction to Solid State Physics*. 8. ed. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, 2004.

KUZEMSKY, A. L. **Variational principle of Bogoliubov and generalized mean fields in many-particle interacting systems.** *International Journal of Modern Physics B*, World Scientific Pub Co Pte Ltd, v. 29, n. 18, p. 1530010, 2015. Disponível em: <<https://www.worldscientific.com/doi/10.1142/S0217979215300108?srsId=AfmBOoqK1y4fOIIE3YS45U7PAaQKUpmtzkaIhsW8jYXXxc-erHzwUm7Z>>.

LACROIX, C.; MENDELS, P.; MILA, F. **Introduction to frustrated magnetism**. 1. ed. Berlin: Springer, 2011.

LEE, J. S. Thermodynamic analysis on a magnetic refrigeration system. *International Journal of Air-Conditioning and Refrigeration*, v. 31, 2023. Disponível em: <<https://link.springer.com/article/10.1007/s44189-023-00040-w#citeas>>.

LIU, P. et al. **Ultralow-field magnetocaloric materials for compact magnetic refrigeration.** *NPG Asia Materials*, v. 15, n. 41, 2023. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/s41427-023-00488-7>>.

MAGALHÃES, S. G.; MORAIS, C. V.; NOBRE, F. D. **One-step replica-symmetry-breaking solution of the Sherrington–Kirkpatrick model under a Gaussian random field.** *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, IOP Publishing, v. 2011, p. P07014, 2011. Disponível em: <<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-5468/2011/07/P07014>>.

MORAIS, C. V. et al. **Spin-glass phase transition and behavior of nonlinear susceptibility in the Sherrington-Kirkpatrick model with random fields.** *Physical Review B*, v. 93, p. 224206, 2016. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.93.224206>>.

MURTAZAEV, A. K. et al. **Magnetic and thermodynamic properties of the antiferromagnetic Ising model on a layered triangular lattice in a magnetic field.** *Physica*

E: *Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 142, p. 115320, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.physe.2022.115320>>.

NAIR, H. S.; EL-GENDY, A. A. **Magnetic Nanostructured Materials**. 1. ed. [S.l.]: Elsevier, 2018. 245-268 p.

NAKASHIMA, A. T. et al. **A magnetic wine cooler prototype**. *International Journal of Refrigeration*, Elsevier, v. 122, p. 110–121, 2021. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S014070072030476X>>.

NIRMALA, R.; MOROZKIN, A. V.; MALIK, S. K. **Magnetocaloric effect in rare-earth intermetallics: recent trends**. *Pramana*, v. 84, p. 977–985, 2015. Disponível em: <<https://link.springer.com/article/10.1007/s12043-015-1000-1>>.

NISHIMORI, H. **Elements of phase transitions and critical phenomena**. 1. ed. [S.l.]: Oxford University, 2001.

NISHIMORI, H.; ORTIZ, G. **Elements of phase transitions and critical phenomena**. 1. ed. New York: Oxford University, 2011.

RAMIREZ, A. P. **Strongly Geometrically Frustrated Magnets**. *Annual Review of Materials Science*, v. 24, p. 453–480, 1994. Disponível em: <<https://www.annualreviews.org/content/journals/10.1146/annurev.ms.24.080194.002321>>.

RAMOS, L. R. M. **Platôs de magnetização em sistemas magnéticos frustrados**. Dissertação (Trabalho de conclusão de curso (Bacharel em Física)) — Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Campo Grande, 2020. 59p.

ROOS, M.; SCHMIDT, M. **The frustrated bilayer Ising model: A cluster mean-field approach**. *Physica A*, Elsevier, v. 651, p. 129979, 2024.

SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. **Modern Quantum Mechanics**. 2. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2017.

SALINAS, R. A. **Introdução à Estatística**. 2. ed. 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*, The Royal Swedish Academy of Sciences, v. 90, n. 2, p. 025809, 2015. Disponível em: <<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0031-8949/90/2/025809>>.

SHANGGUAN, Y. et al. **A one-third magnetization plateau phase as evidence for the Kitaev interaction in a honeycomb-lattice antiferromagnet**. *Nature Physics*, Springer Science, v. 19, n. 12, p. 1883–1889, 2023. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/s41567-023-02212-2>>.

SMIRNOV, A. I. et al. **Competition between dynamic and structural disorder in a doped triangular antiferromagnet $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$** . *IOP Publishing*, v. 969, p. 012115, 2018. Disponível em: <<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/969/1/012115>>.

SMIRNOV, A. I. et al. **Triangular lattice antiferromagnet $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ in high magnetic fields**. *Physical Review B*, v. 75, n. 13, p. 134412, 2007. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.75.134412>>.

SOLDATOV, K. et al. **Comparison of diluted antiferromagnetic Ising models on frustrated lattices in a magnetic field.** Elsevier, v. 383, p. 1229–1234, 2019. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S037596011930057X>>.

STRECKA, J.; KARLOVA, K.; MADARAS, T. **Giant magnetocaloric effect, magnetization plateaux and jumps of the regular Ising polyhedra.** *Physica B*, v. 466-467, p. 76–85, 2015. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0921452615300028>>.

TAGUCHI, Y.; SAKAI, H.; CHOUDHURY, D. **Magnetocaloric materials with multiple instabilities.** *Advanced Materials*, v. 29, n. 20, p. 1606144, 2017. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/adma.201606144>>.

WANG, G. F.; ZHAO, Z. R.; ZHANG, X. F. **Influence of demagnetizing field on the magnetocaloric effect and critical behavior in $\text{Mn}_{39}\text{Co}_{26}\text{Ge}_{35}$.** *Journal of Alloys and Compounds*, Elsevier, v. 651, p. 72–77, 2015. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0925838815307283>>.

YAMAMOTO, D. **Correlated cluster mean-field theory for spin systems.** *Phys. Rev. B*, v. 79, p. 144427, 2009. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.79.144427>>.

YAO, X. **Dilute modulation of spin frustration in triangular Ising antiferromagnetic model: Wang–Landau simulation.** *Solid State Communications*, v. 150, p. 160–163, 2010. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0038109809006395>>.

YOKOTA, T. **Effects of geometrical frustration on the spin-glass transition.** *Physical Review E*, v. 89, p. 012128, 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.89.012128>>.

ZHANG, Y. et al. **Solutions to obstacles in the commercialization of room-temperature magnetic refrigeration.** *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Elsevier, v. 143, p. 110933, 2021. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S1364032121002252>>.

ZHAO, S. et al. **Magnetic field technology in improving the quality of food refrigeration and freezing: Mechanisms, applications, and challenges.** *Journal of Stored Products Research*, Elsevier, v. 106, p. 102254, 2024. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022474X24000110>>.

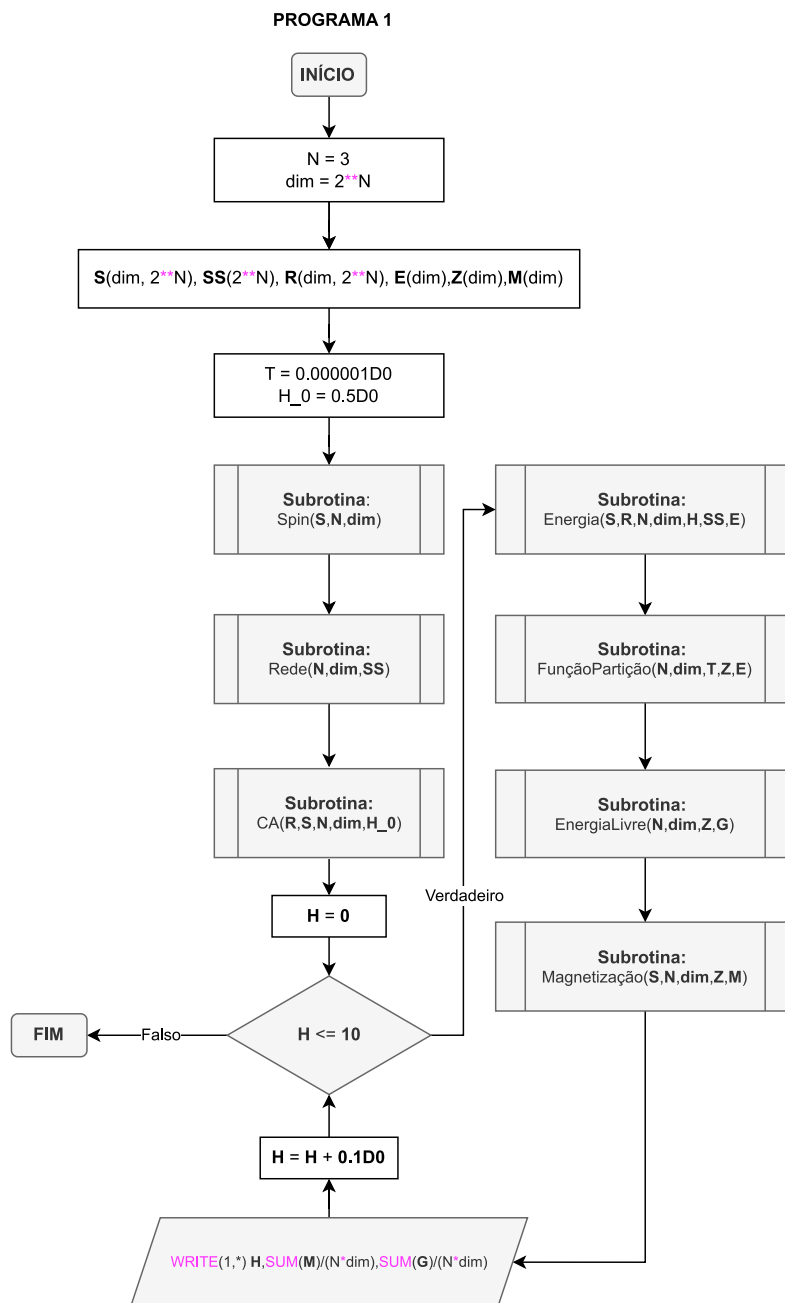
ZUKOVIC, M. **Thermodynamic and magnetocaloric properties of geometrically frustrated Ising nanoclusters.** *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 374, p. 22–35, 2015. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0304885314007057>>.

APÊNDICES

APÊNDICE A – FLUXOGRAMAS

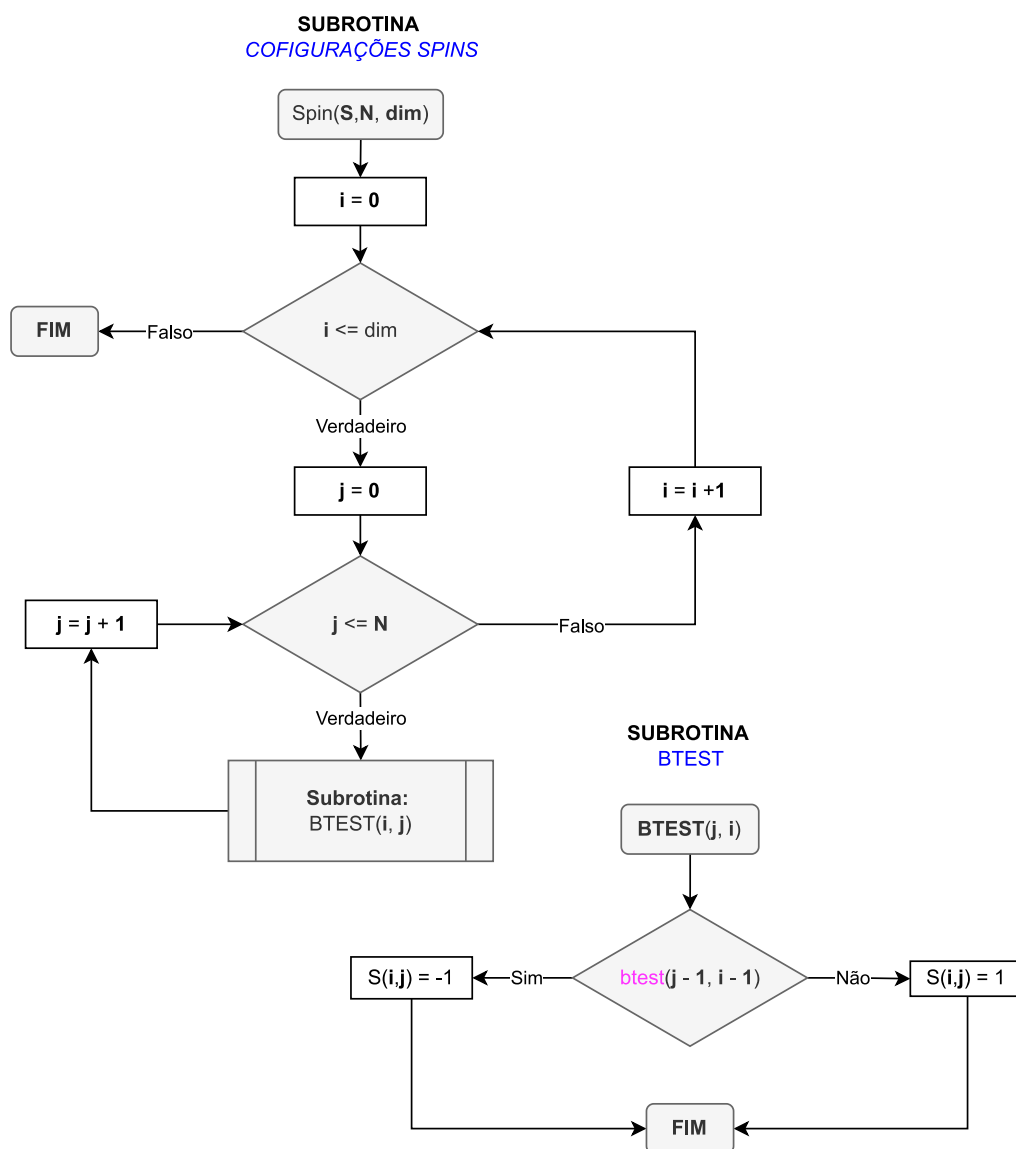
A.1 Fluxogramas: enumeração exata

Figura 34 – Fluxograma para o Programa 1 que faz o cálculo da energia livre e magnetização por sítio e por desordem.



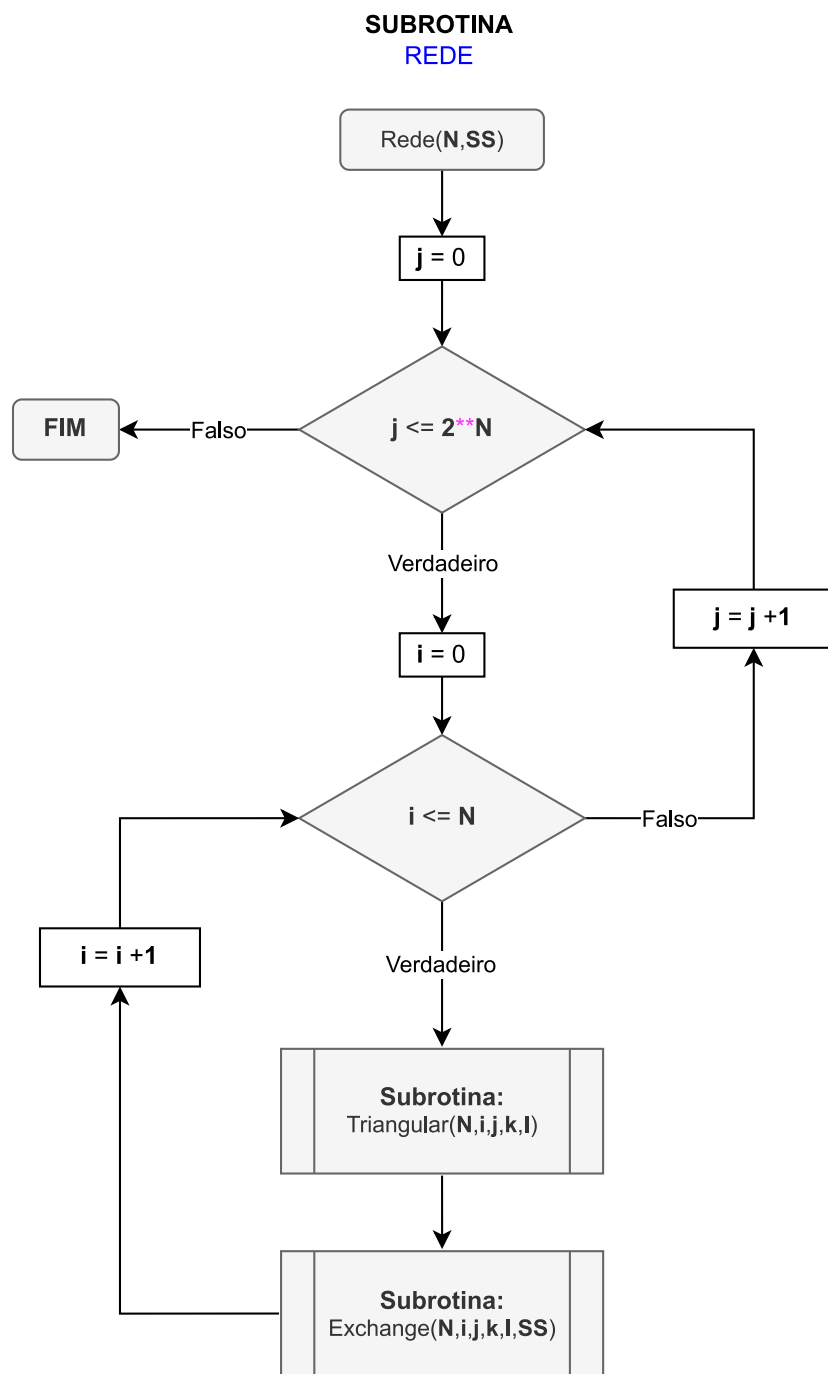
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 35 – Fluxograma da subrotina que armazena as possíveis configurações de *spins* na rede.



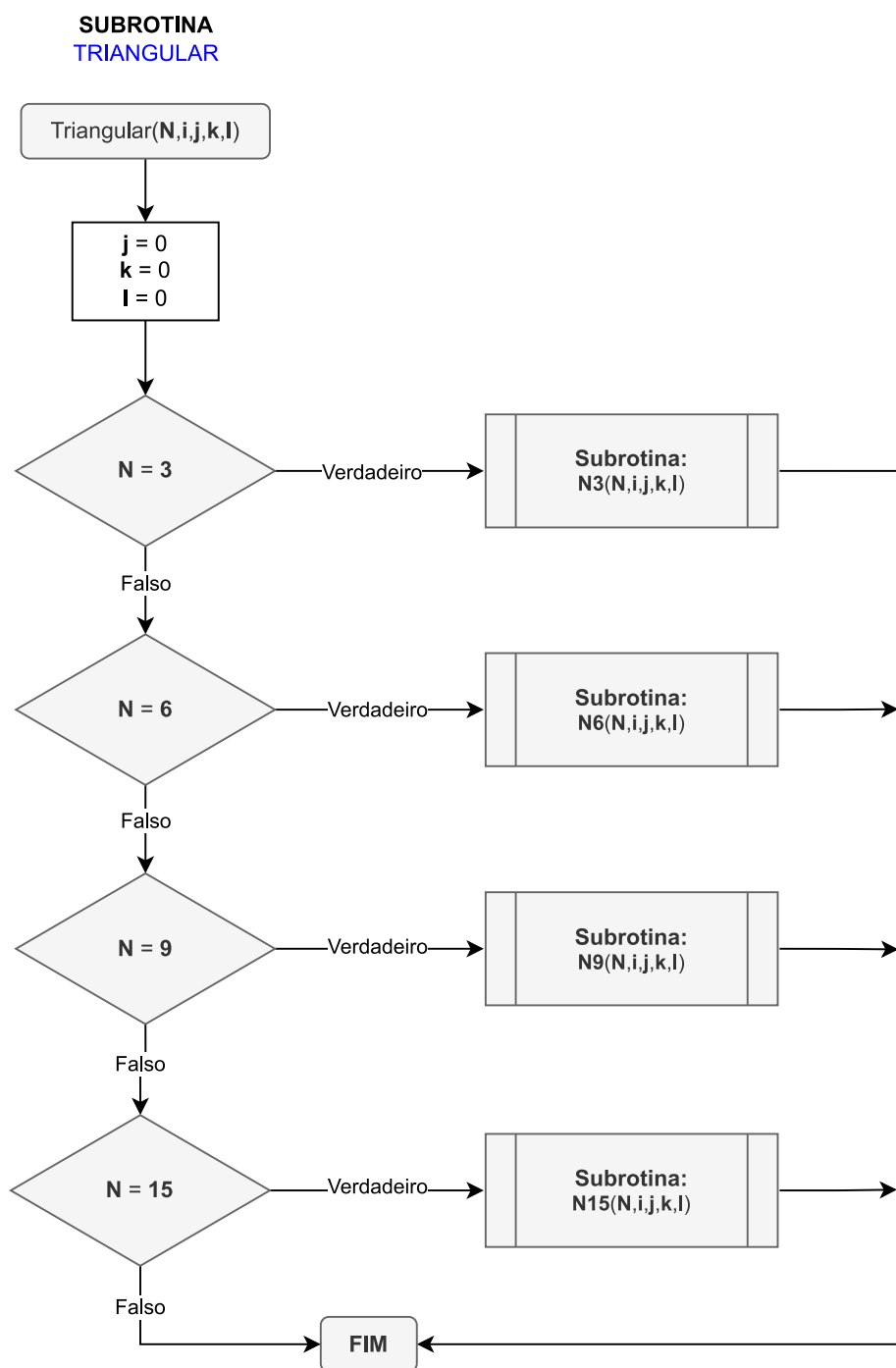
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 36 – Fluxograma da subrotina que contabiliza todas as interações entre *spins* na rede



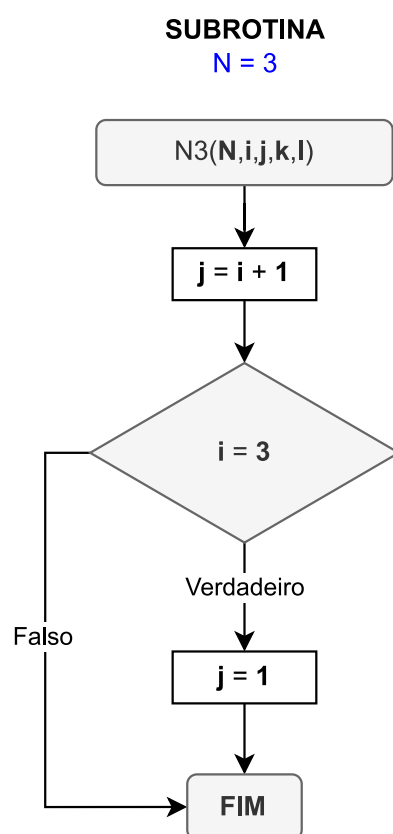
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 37 – Fluxograma da subrotina que armazena os *spins* vizinhos para rede triangular.



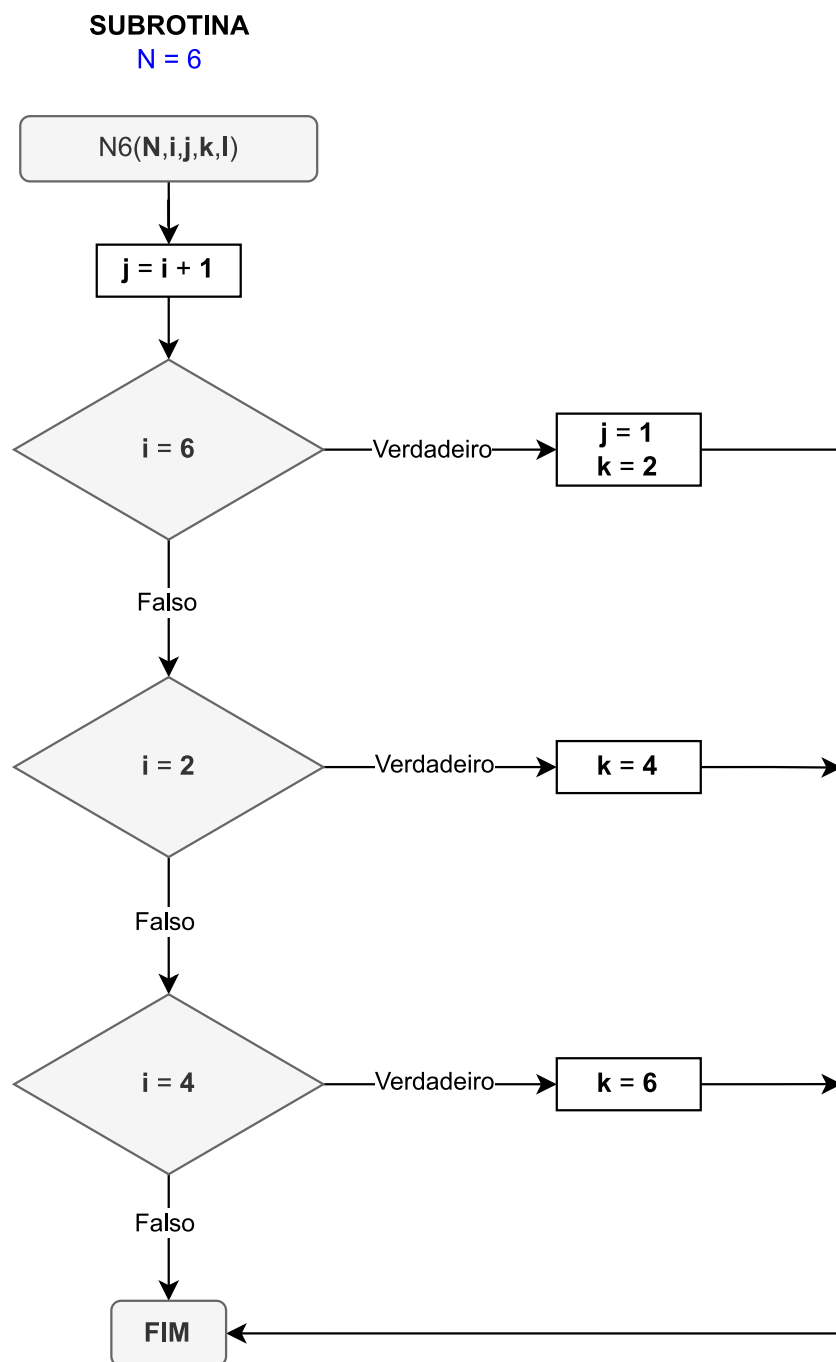
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 38 – Fluxograma da subrotina que armazena os *spins* vizinhos para rede triangular com três sítios.



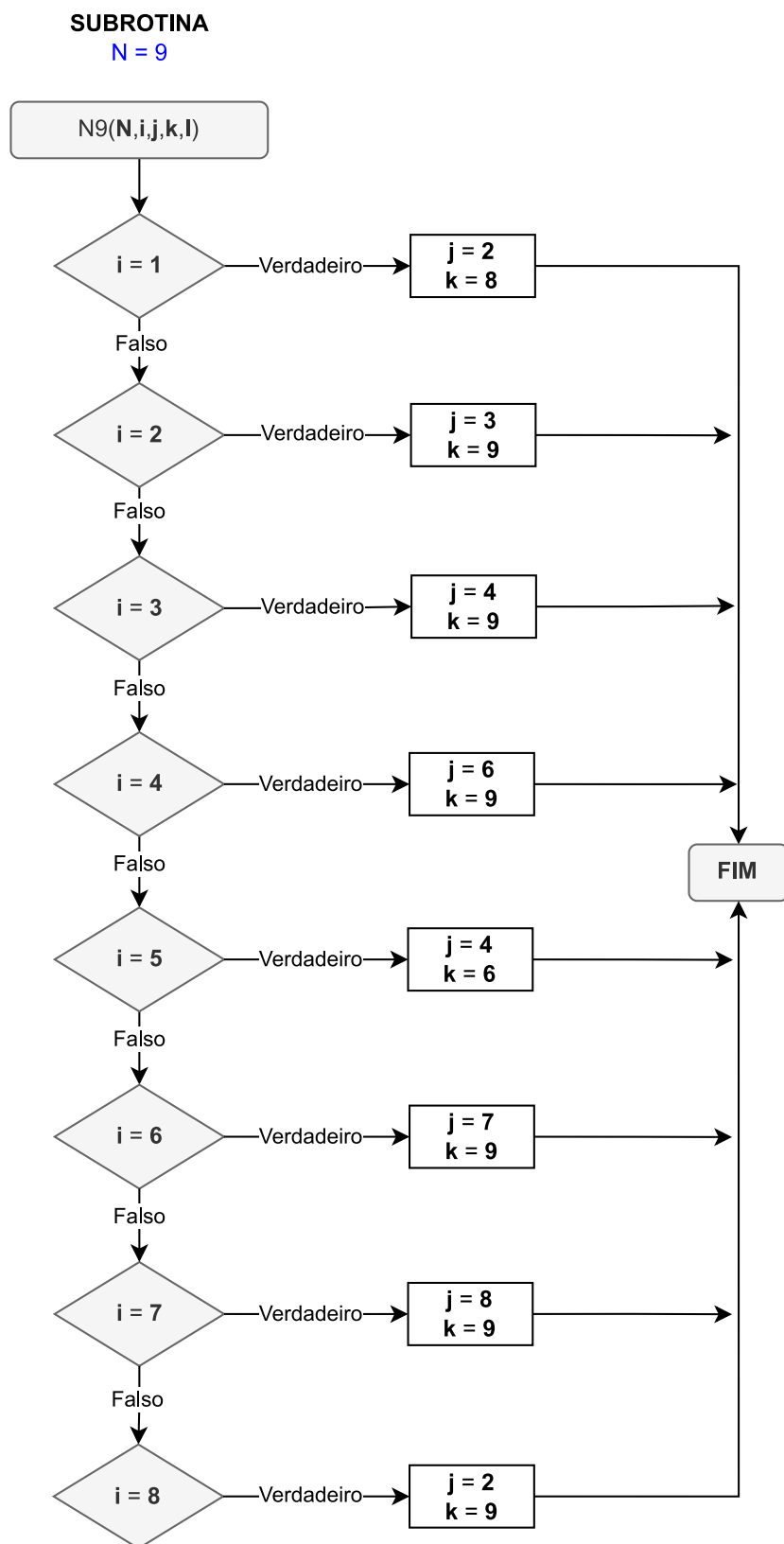
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 39 – Fluxograma da subrotina que armazena os *spins* vizinhos para rede triangular com seis sítios.



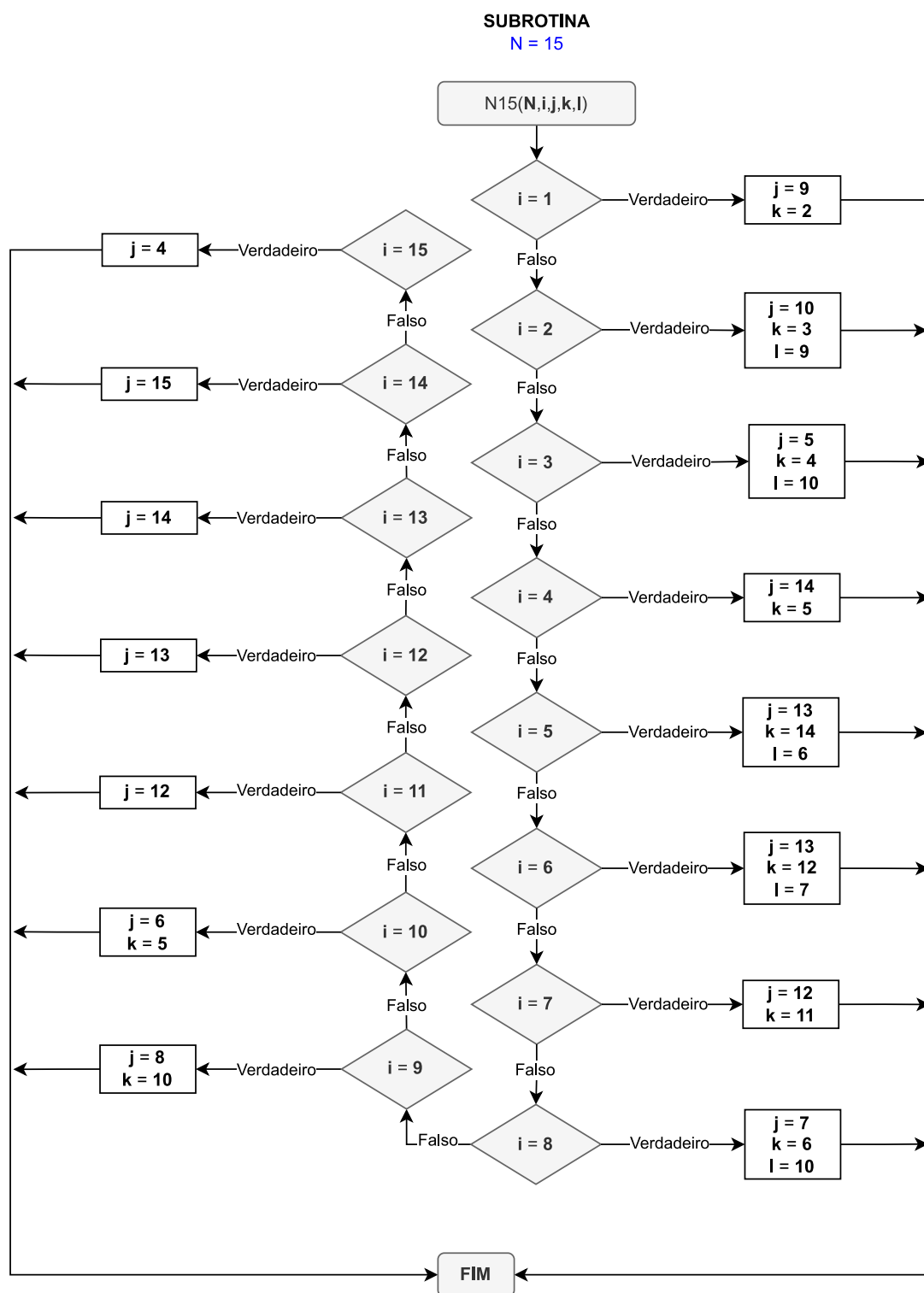
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 40 – Fluxograma da subrotina que armazena os *spins* vizinhos para rede triangular com nove sítios.



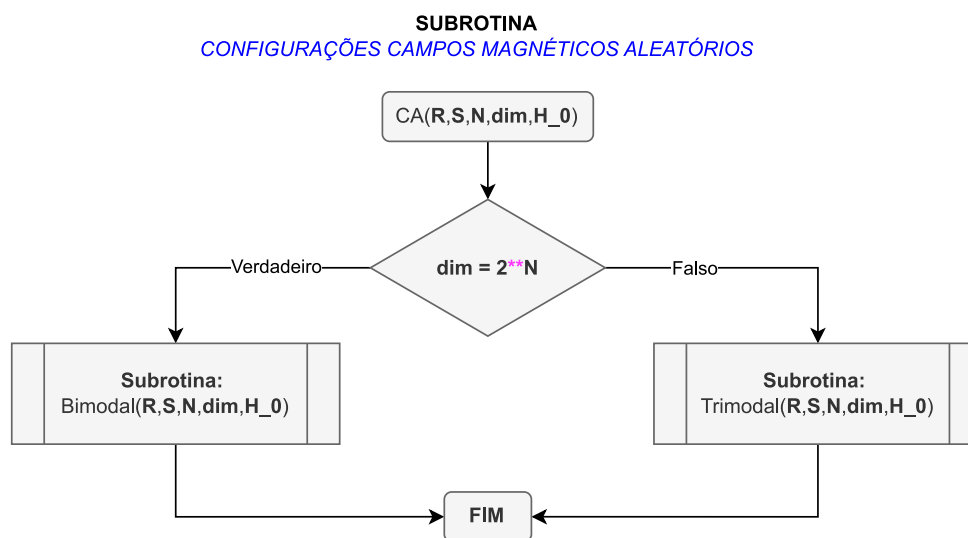
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 41 – Fluxograma da subrotina que armazena os *spins* vizinhos para rede triangular com quinze sítios.



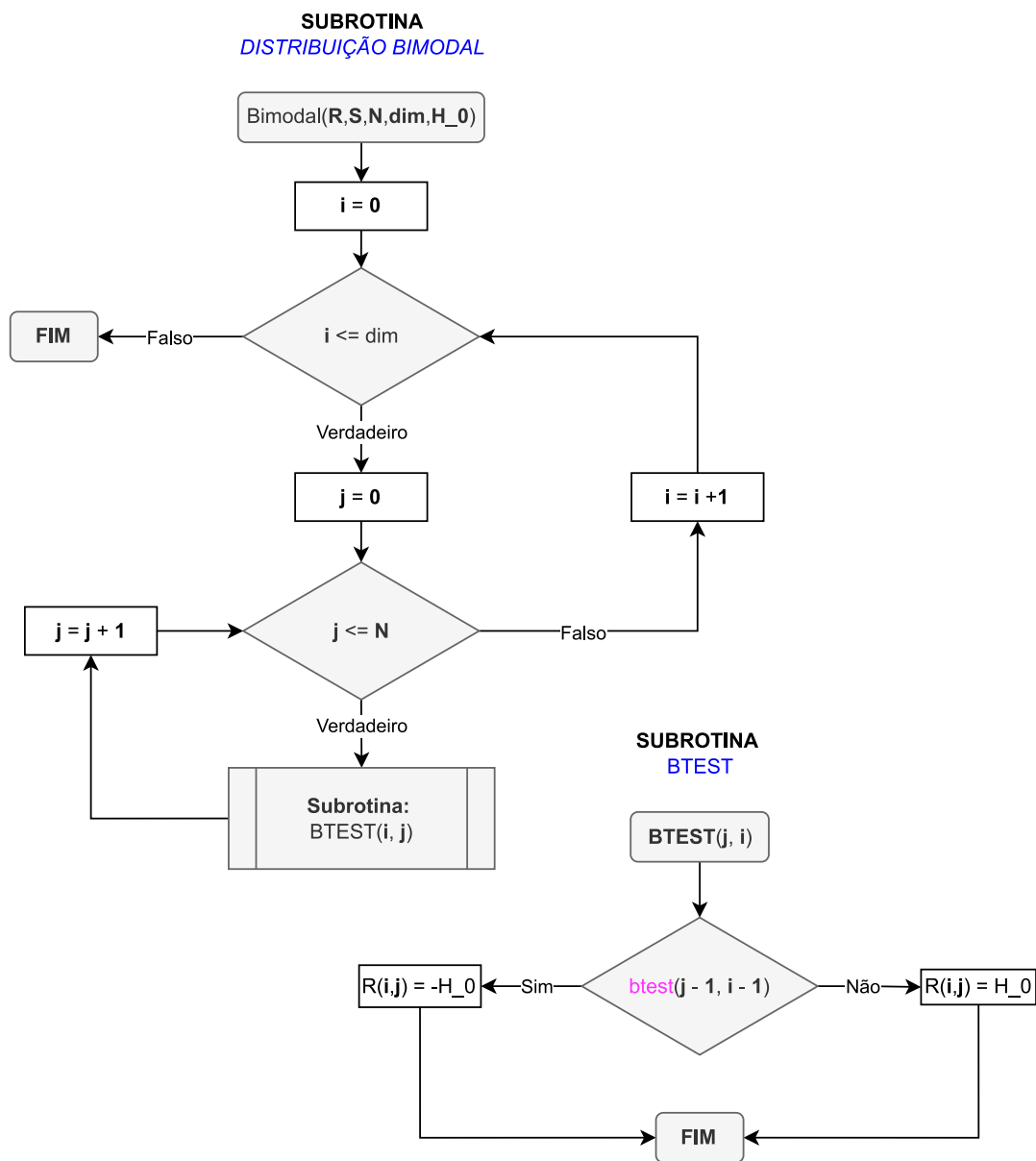
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 42 – Fluxograma subrotina para armazenar as possíveis configurações de campos magnéticos aleatórios.



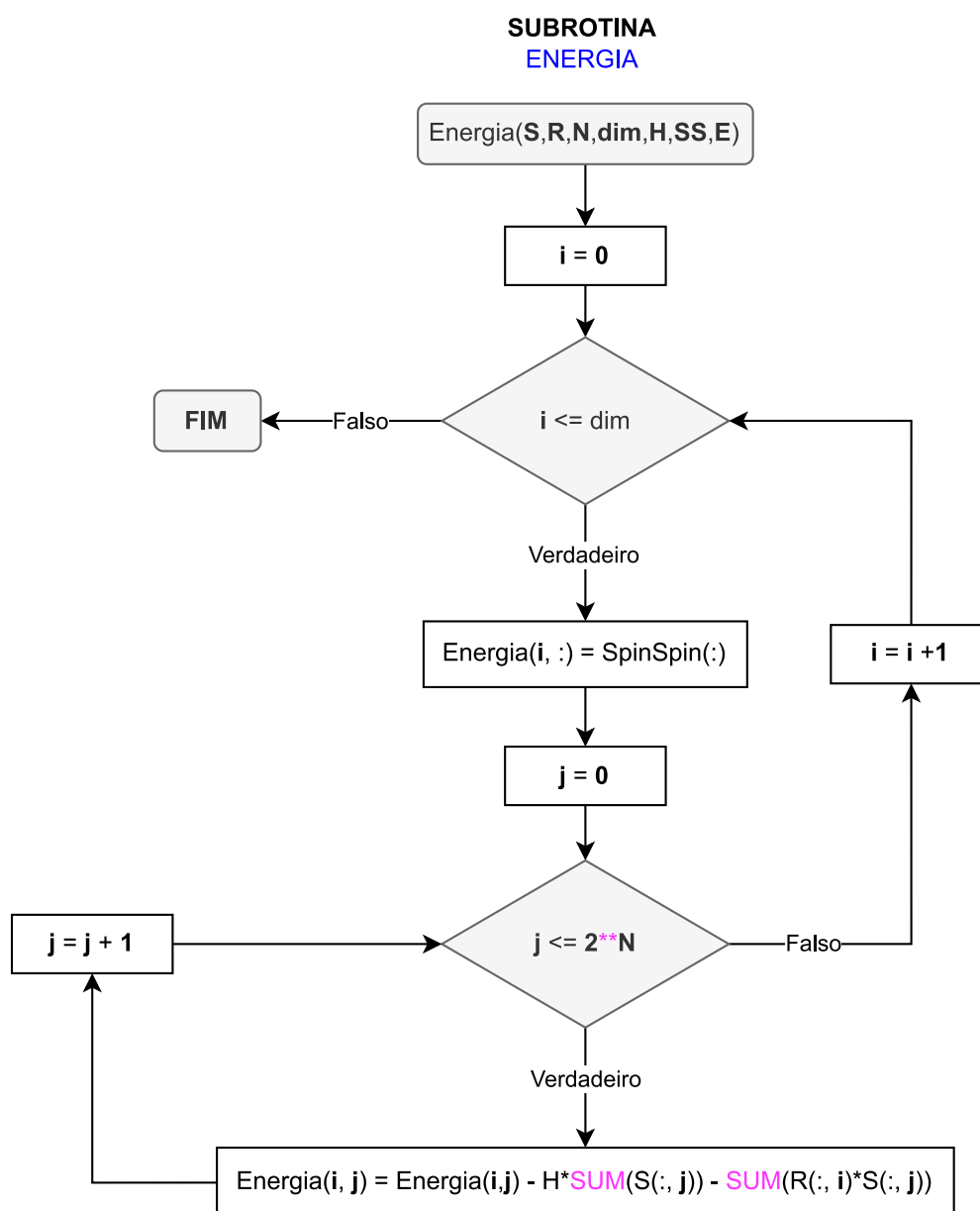
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 43 – Fluxograma subrotina para armazenar as possíveis configurações de campos magnéticos aleatórios para distribuição bimodal.



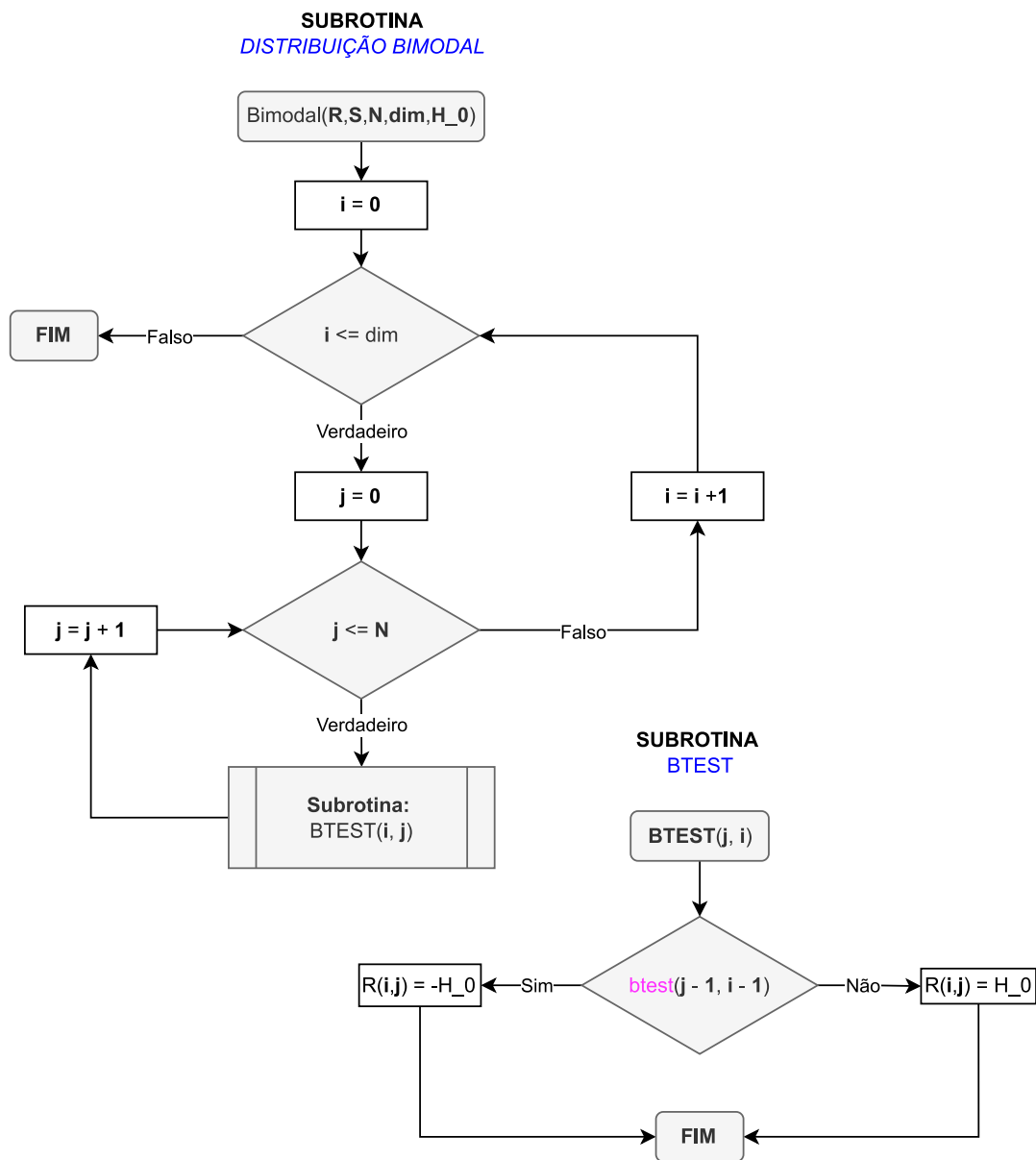
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 44 – Fluxograma subrotina para calcular a energia por sítio e por desordem.



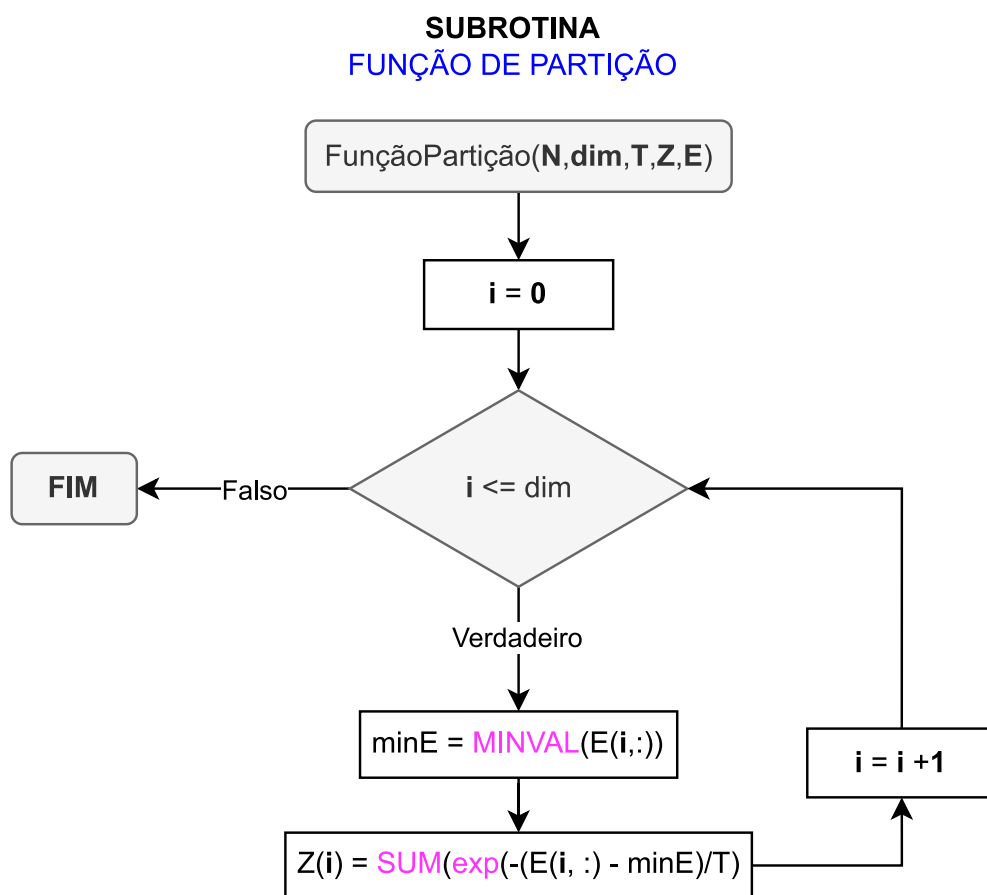
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 45 – Fluxograma subrotina para para calcular a energia livre por sítio e por desordem.



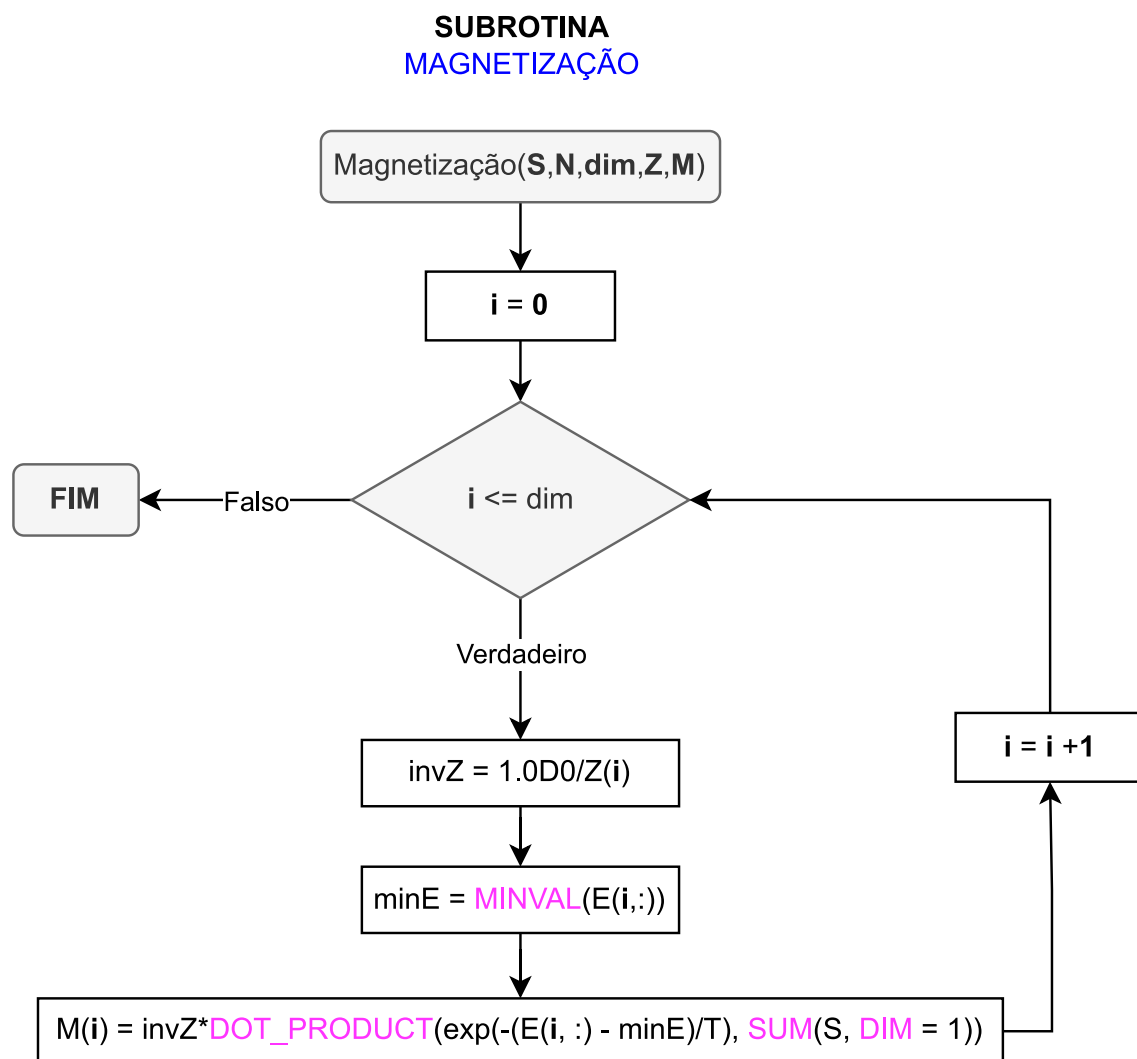
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 46 – Fluxograma subrotina para calcular a função de partição por desordem.



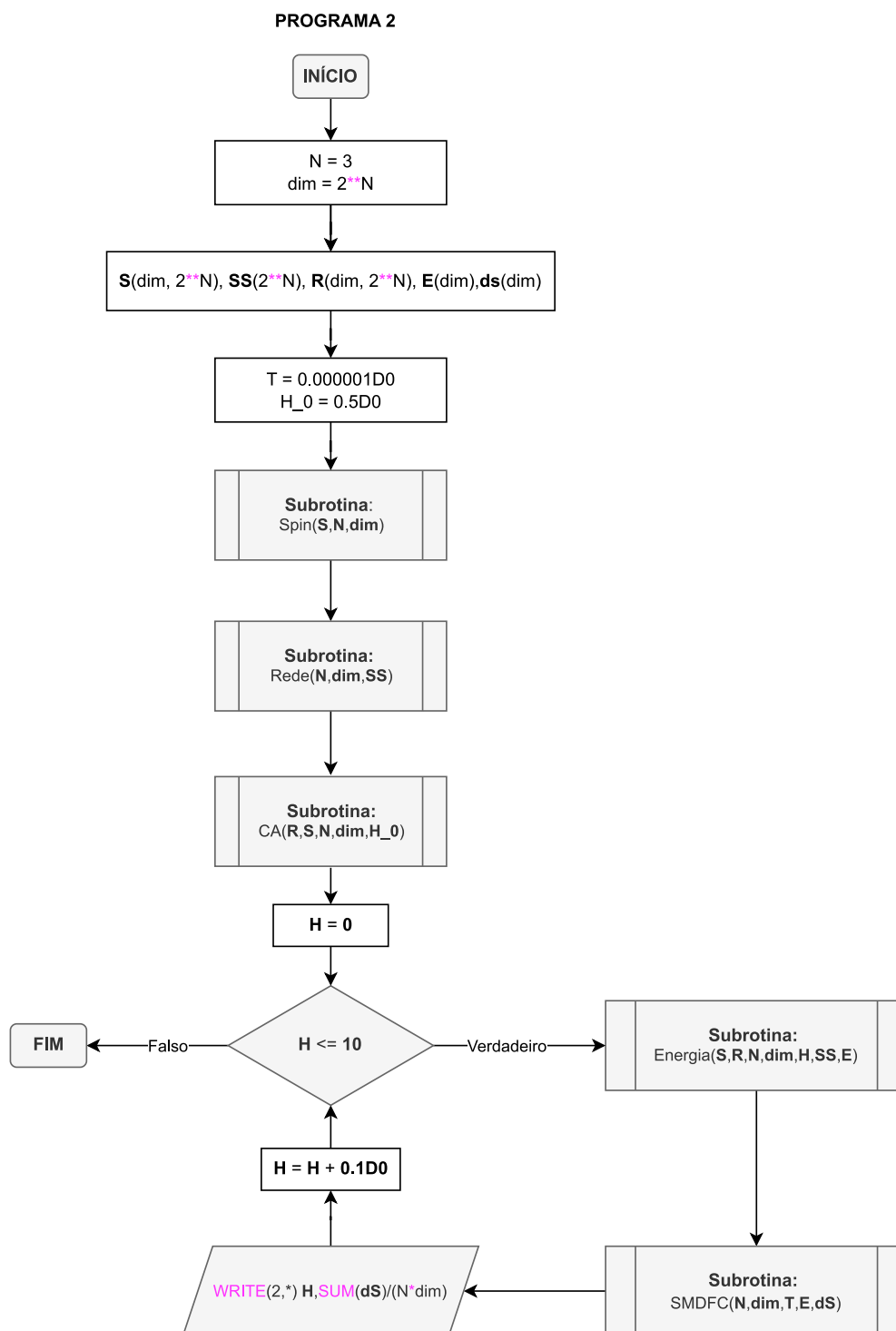
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 47 – Fluxograma subrotina para calcular a magnetização por sítio e por desordem de campos magnéticos aleatórios.



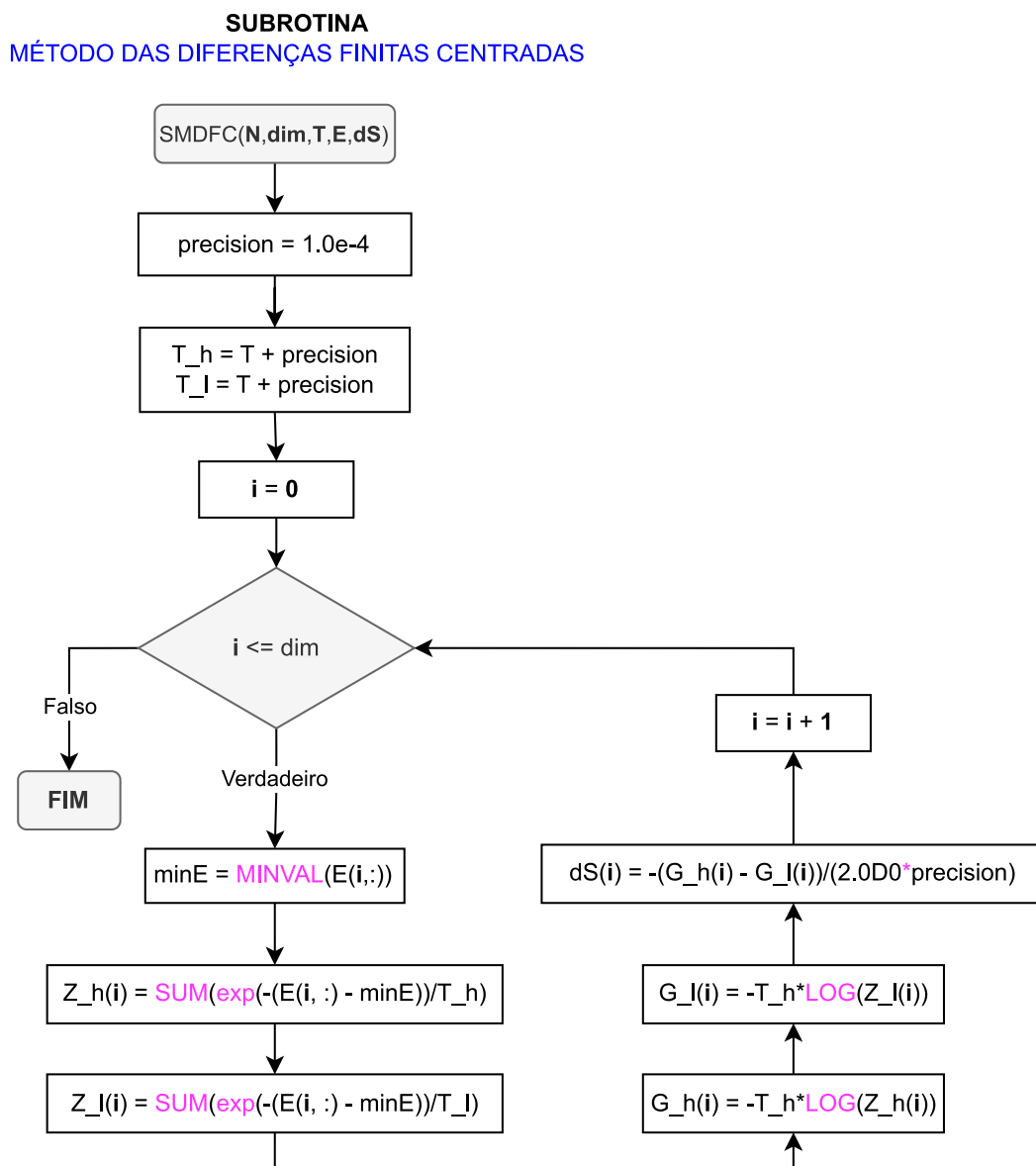
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 48 – Fluxograma para o Programa 2 que faz o cálculo da entropia magnética por sítio e por desordem de campos magnéticos aleatórios.



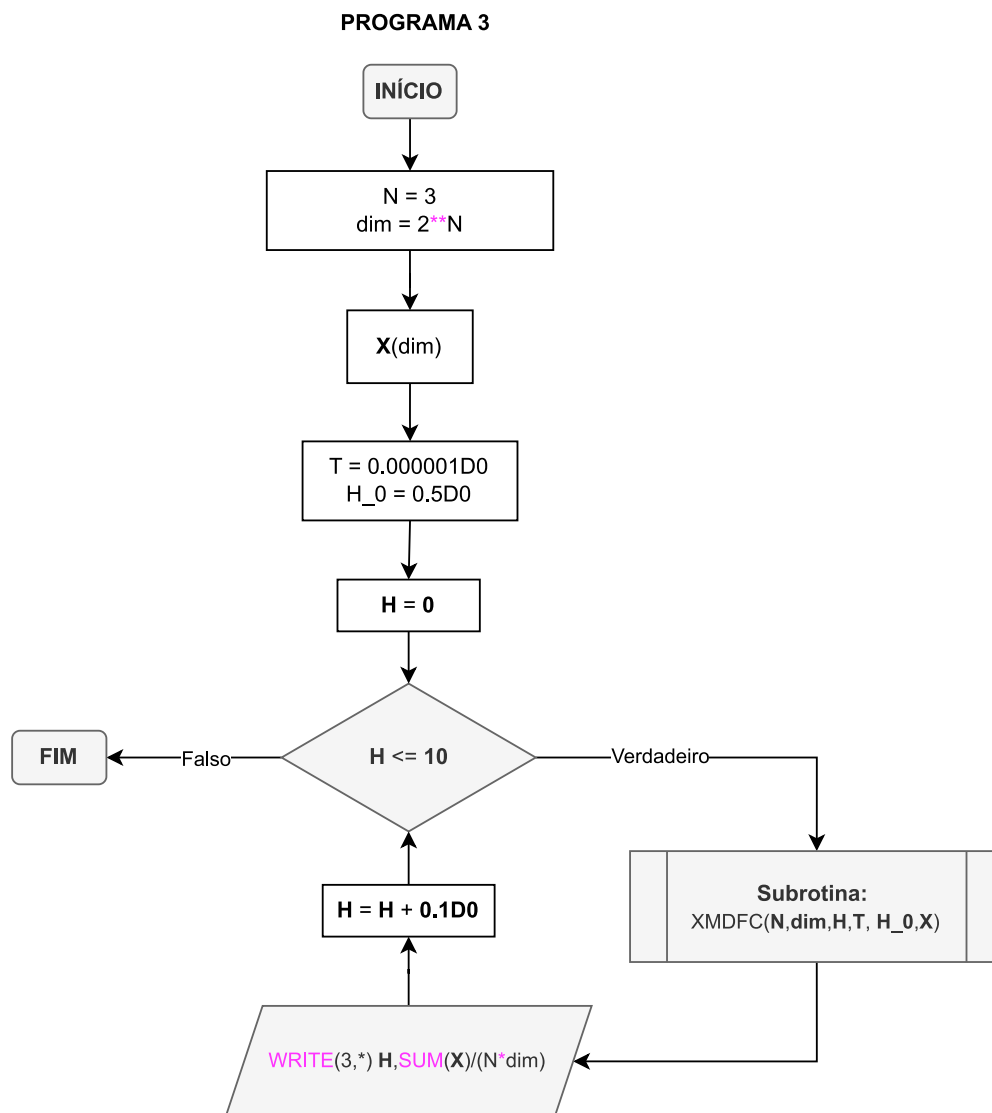
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 49 – Fluxograma subrotina para calcular a entropia magnética por sítio e por desordem de campos magnéticos aleatórios via método das diferenças finitas centradas.



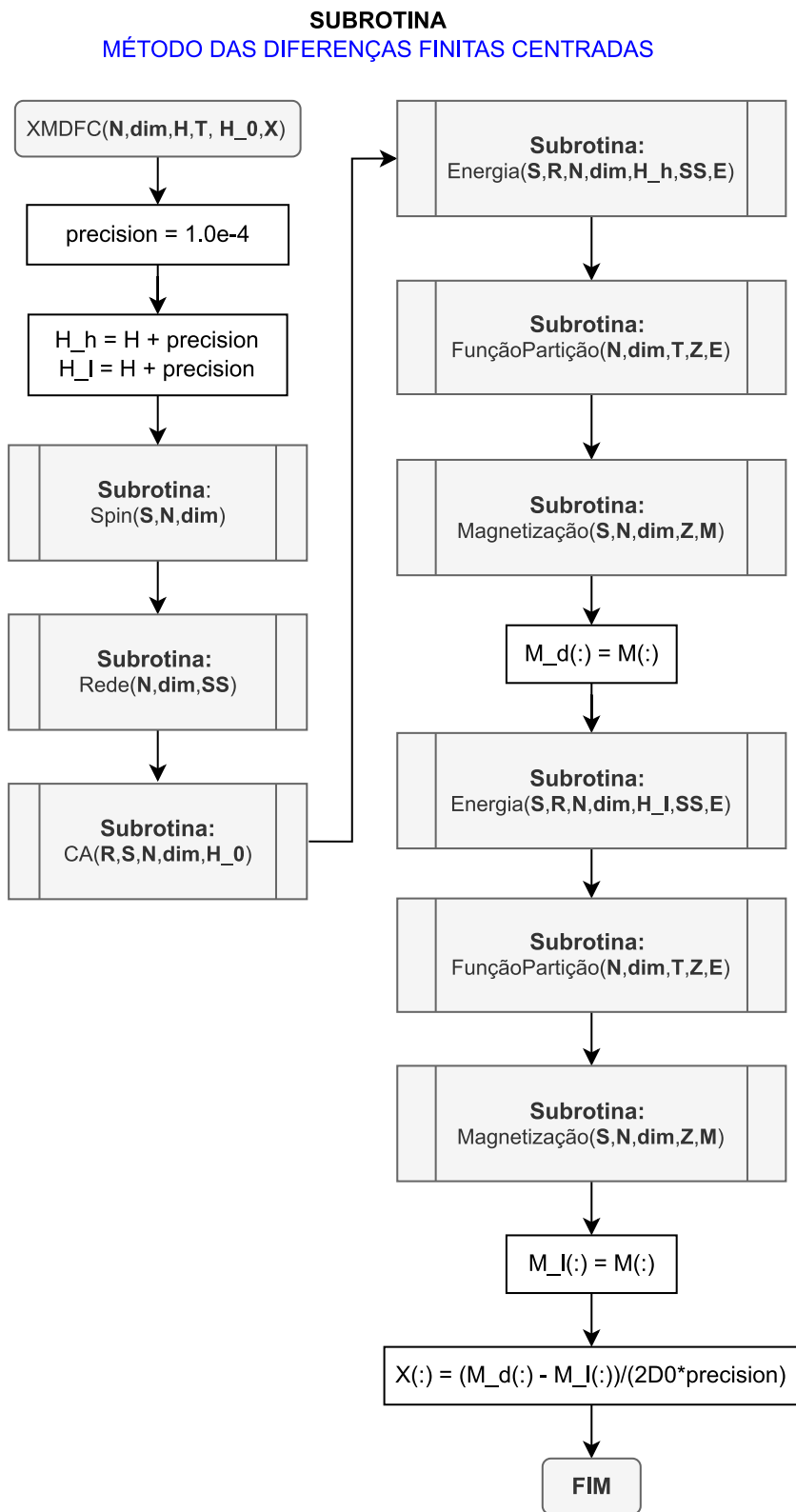
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 50 – Fluxograma para o Programa 3 que faz o cálculo da susceptibilidade magnética por sítio e por desordem de campos magnéticos.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

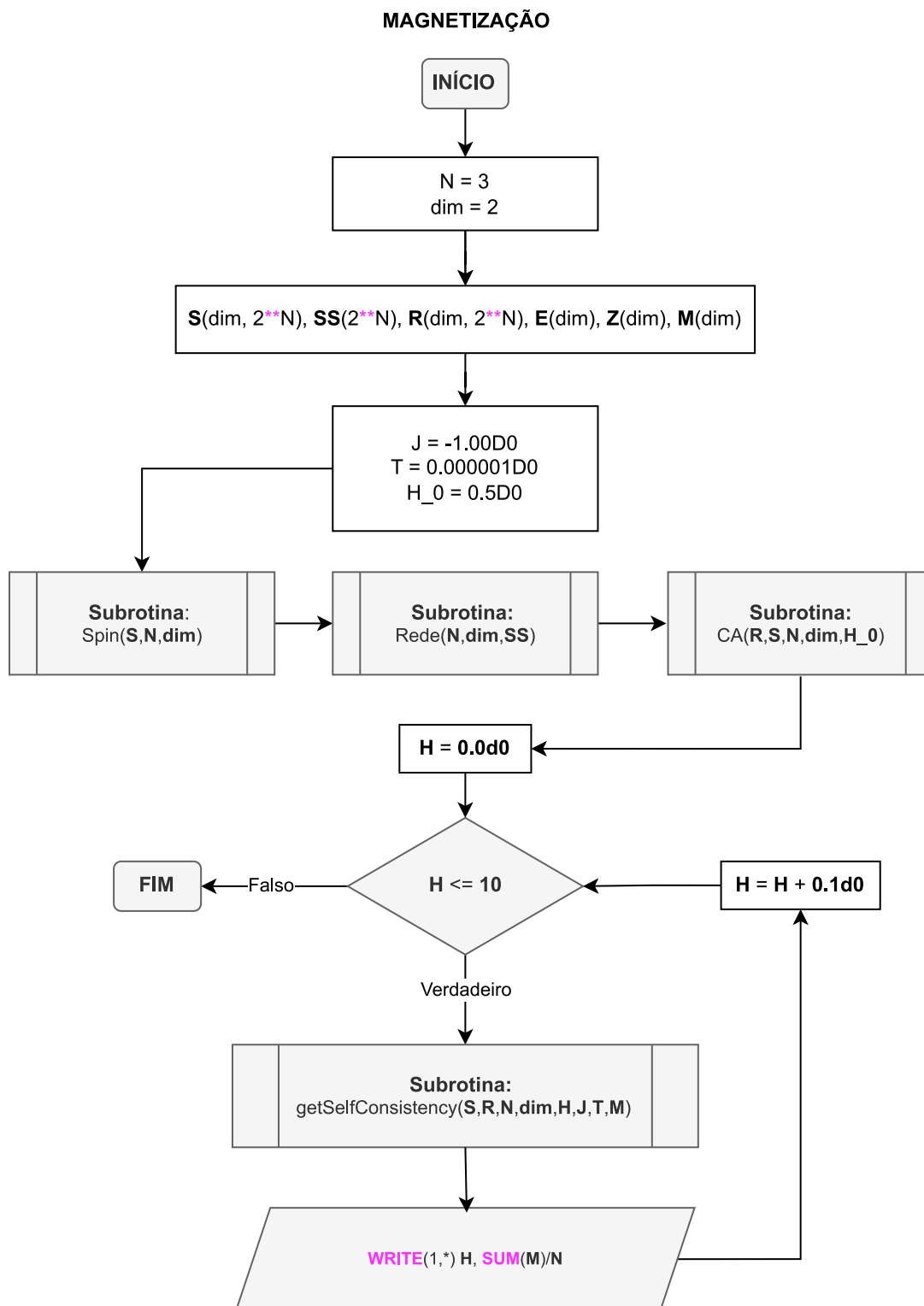
Figura 51 – Fluxograma subrotina para calcular a susceptibilidade magnética por sítio e por desordem via método das diferenças finitas centradas.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

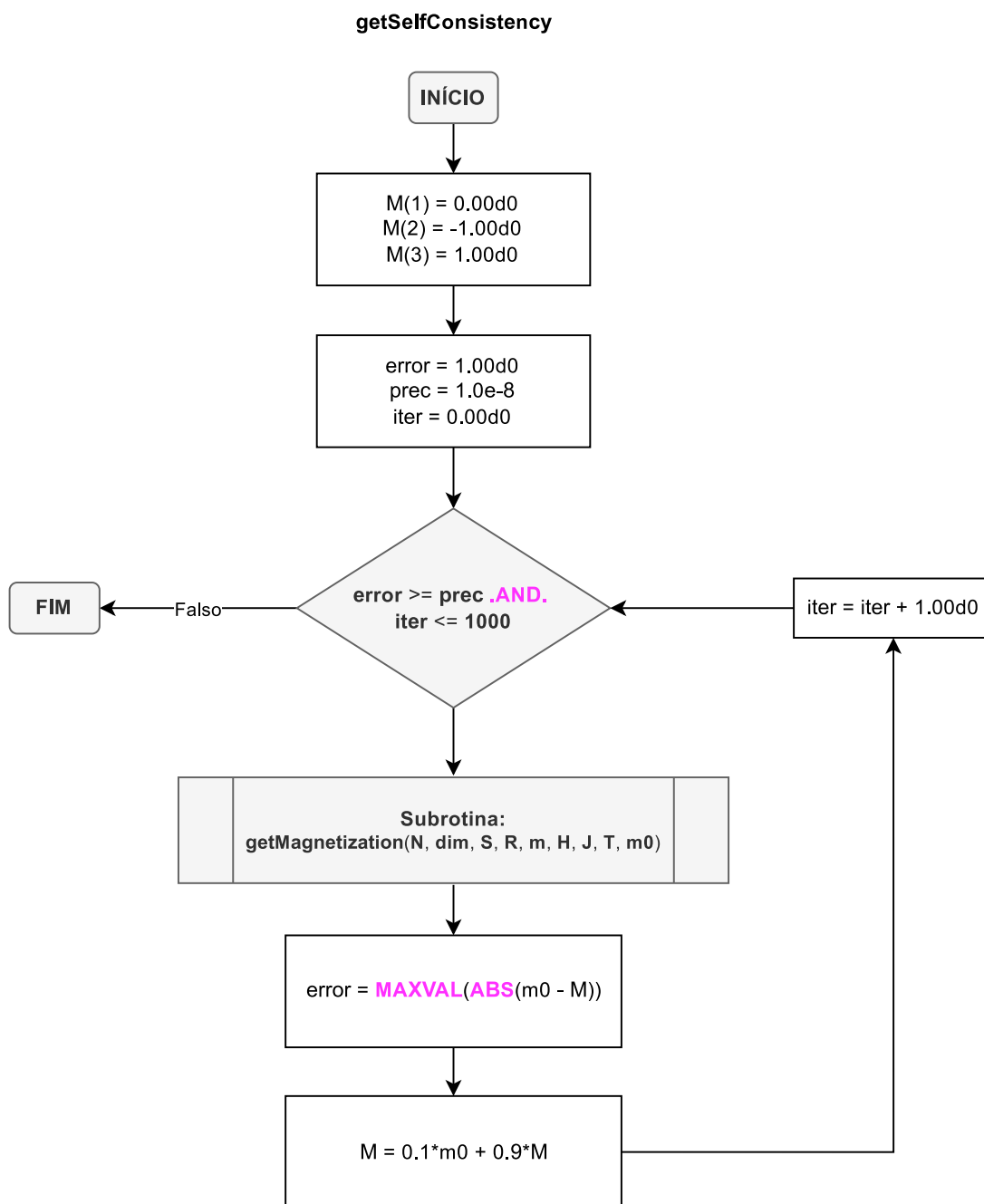
A.2 Fluxogramas: aproximação de campo médio com *clusters*

Figura 52 – Fluxograma do programa para o cálculo da magnetização por sítio e por desordem de campos magnéticos aleatórios via aproximação de campo médio.



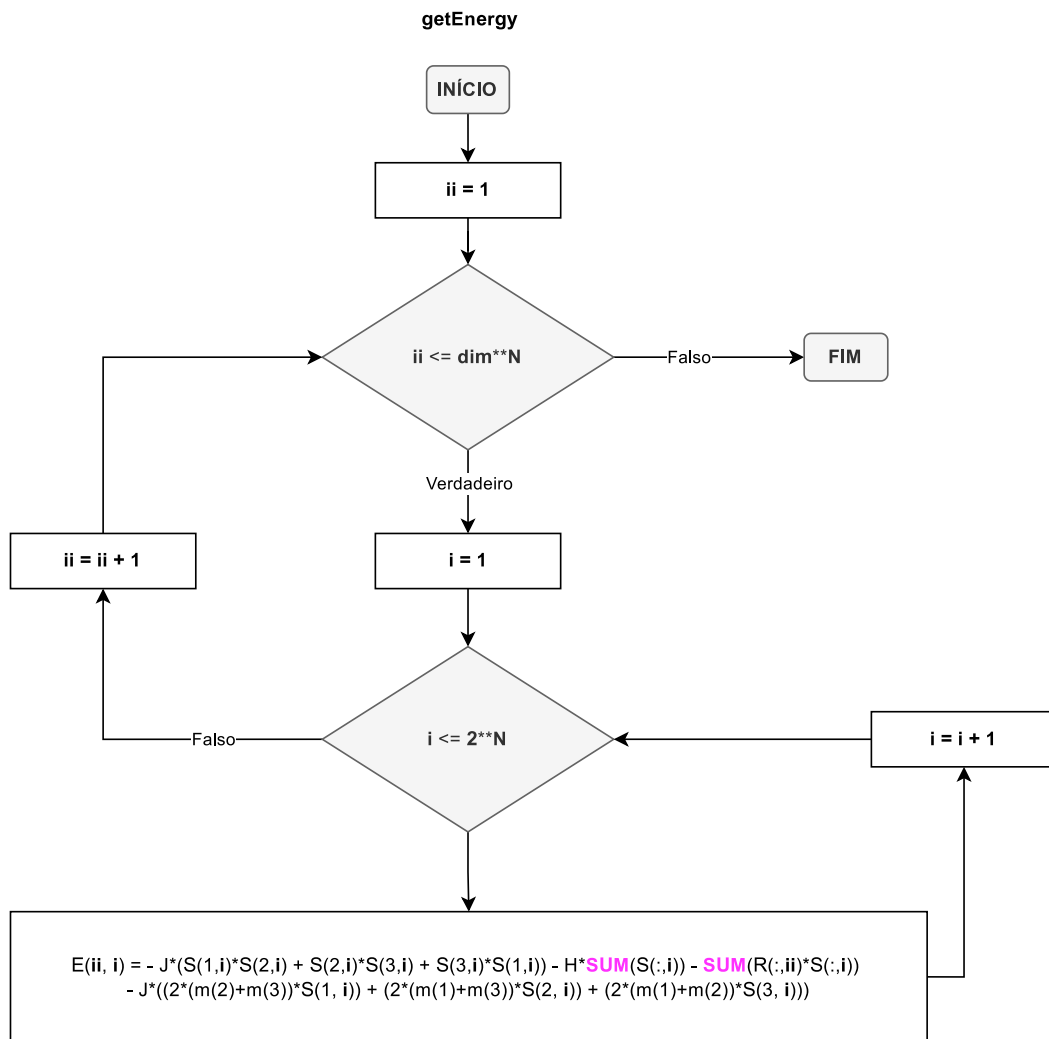
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 53 – Fluxograma da subrotina getSelfConsistency.



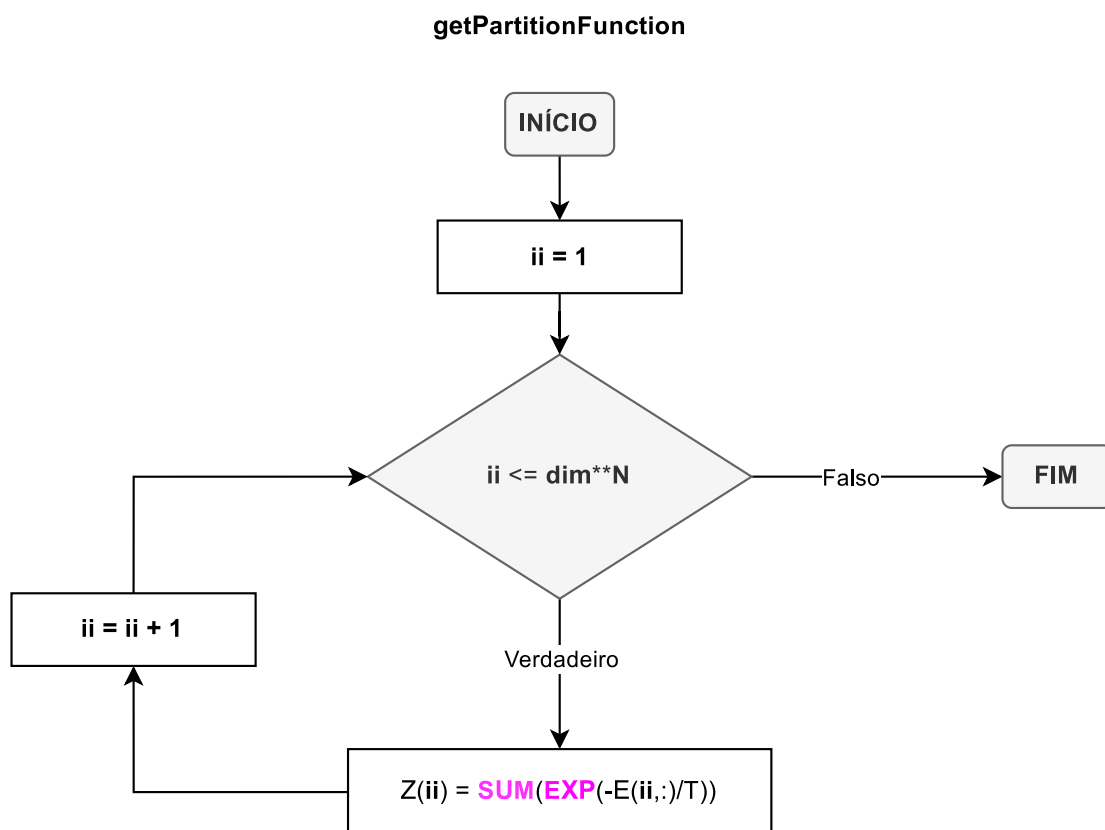
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 54 – Fluxograma da subrotina getEnergy.



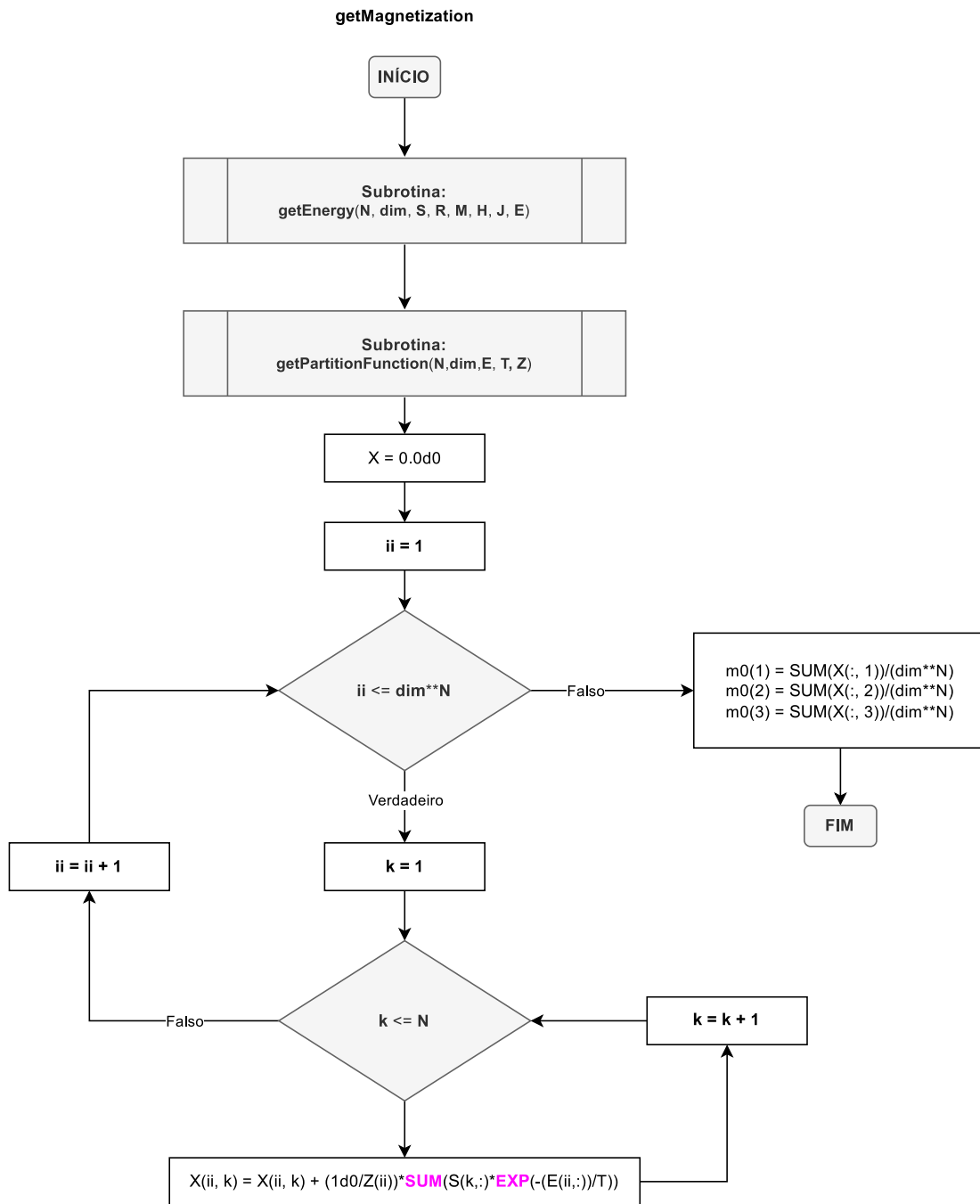
Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 55 – Fluxograma da subrotina getPartitionFunction.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

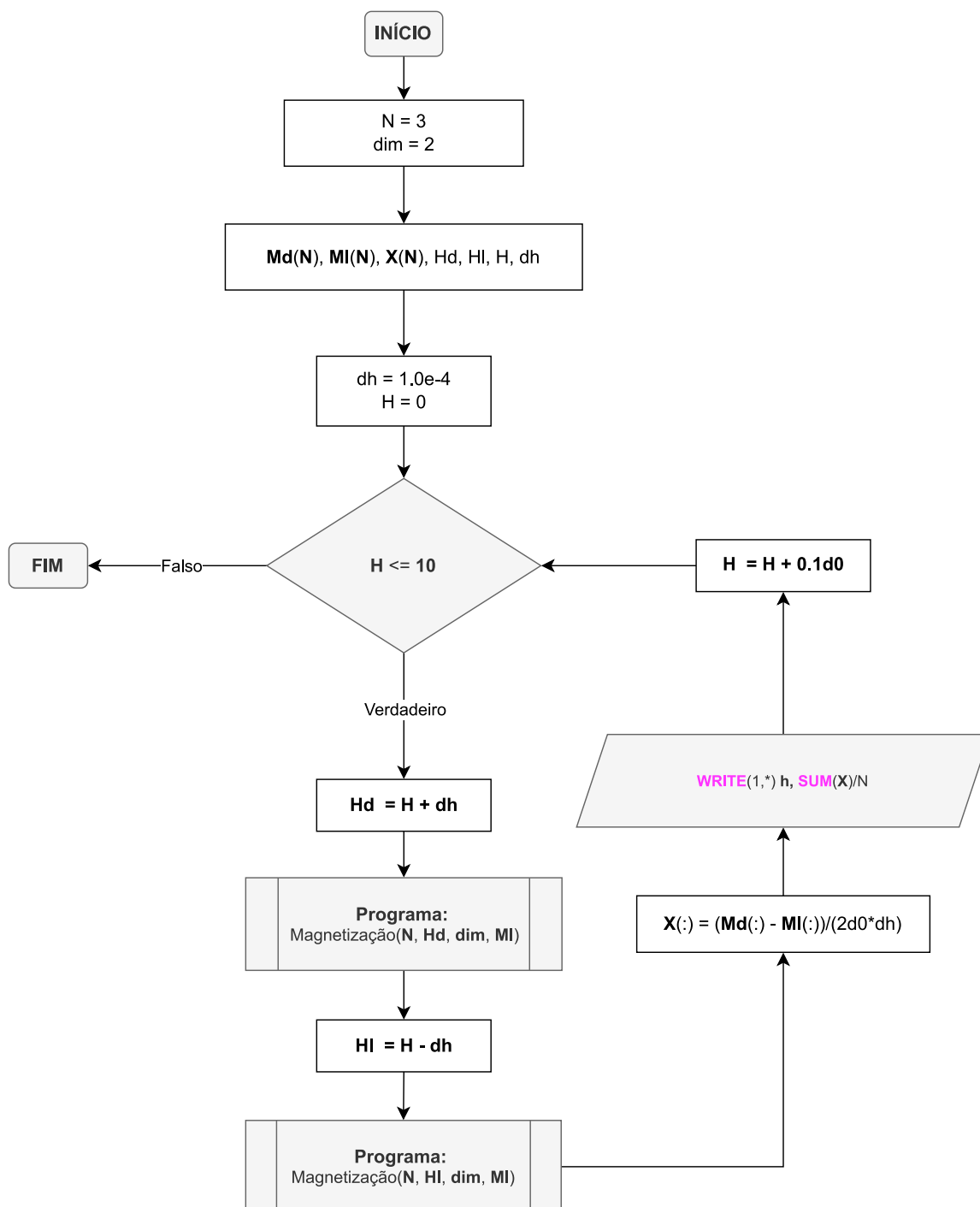
Figura 56 – Fluxograma da subrotina getMagnetization.



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 57 – Fluxograma do programa para o cálculo da susceptibilidade magnética por sítio e por desordem de campos magnéticos aleatórios via aproximação de campo médio.

SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA



Fonte: elaborado pelo autor (2024).

Figura 58 – Fluxograma do programa para o cálculo da entropia magnética por sítio e por desordem de campos magnéticos aleatórios via aproximação de campo médio.

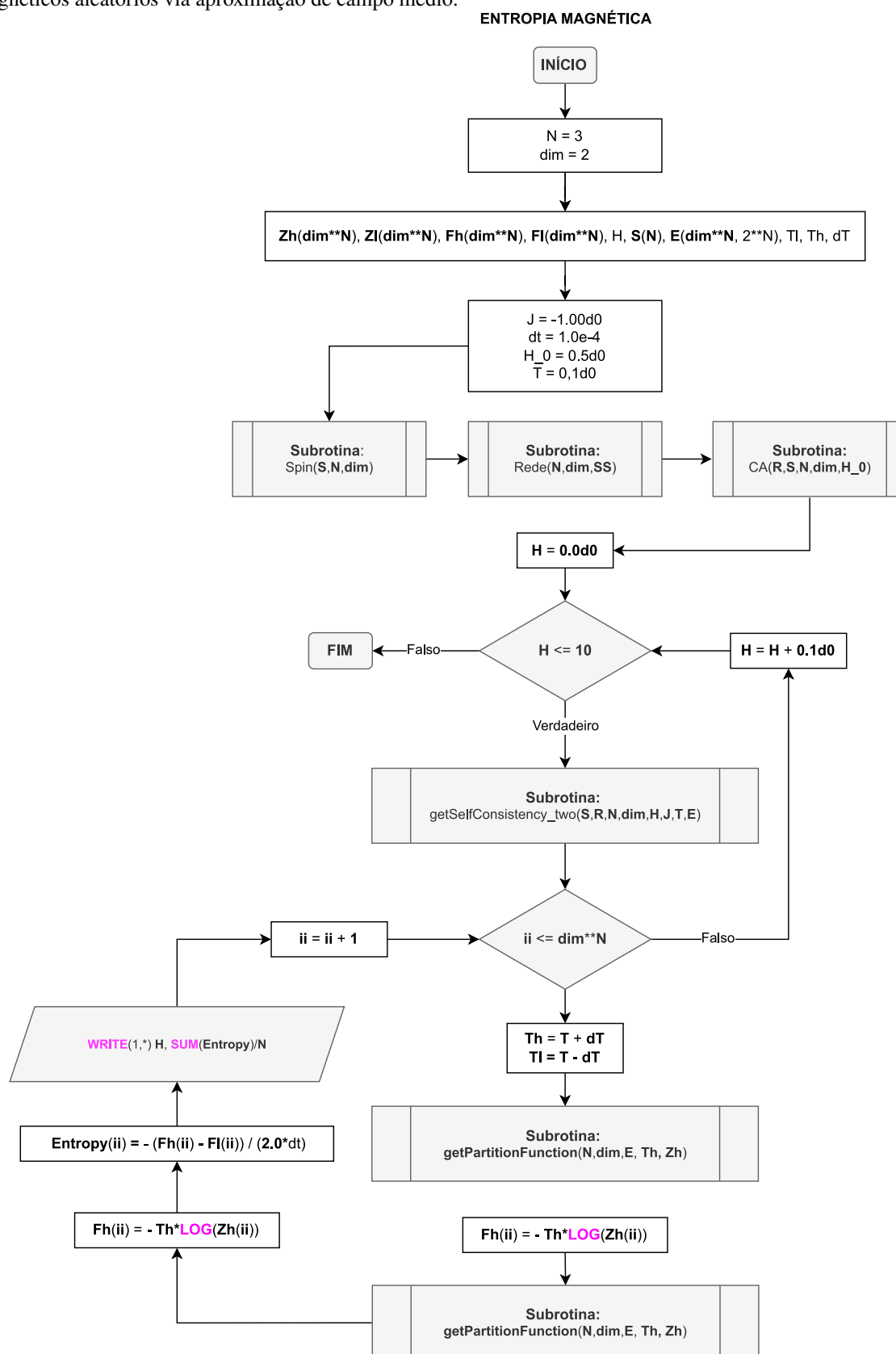
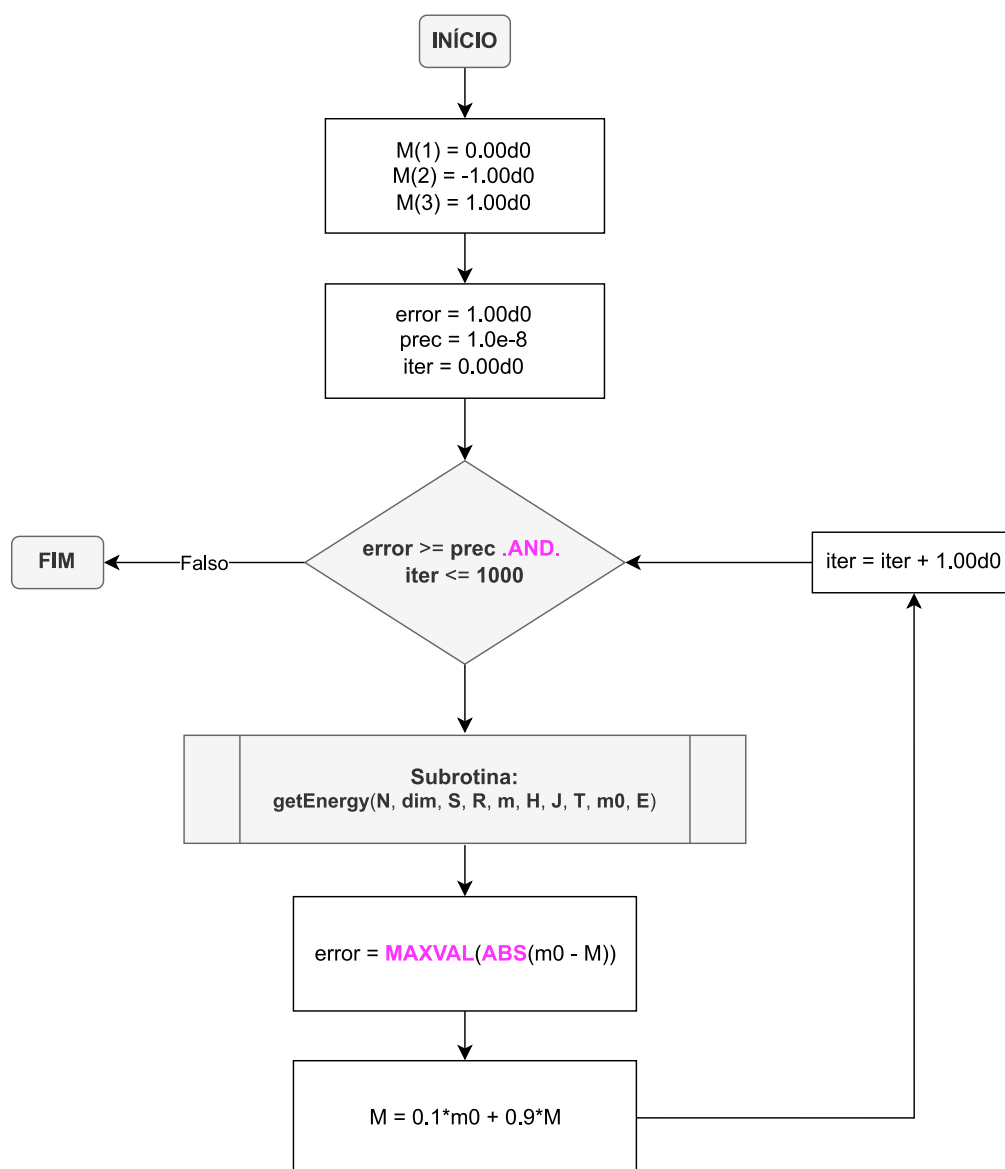


Figura 59 – Fluxograma do programa para o cálculo da entropia magnética por sítio e por desordem de campos magnéticos aleatórios via aproximação de campo médio.

getSelfConsistency_two



Fonte: elaborado pelo autor (2024).