



FELIPE DA CRUZ RODRIGUES

**CADEIA CAIRO PENTAGONAL
GEOMETRICAMENTE FRUSTRADO COM
ACOPLAMENTO ISING-HEISENBERG**

LAVRAS-MG

2016

FELIPE DA CRUZ RODRIGUES

**CADEIA CAIRO PENTAGONAL GEOMETRICAMENTE FRUSTRADO
COM ACOPLAMENTO ISING-HEISENBERG**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, área de concentração em Física da Matéria Condensada, para obtenção do título de Mestre.

Orientador

Dr. Onofre Rojas Santos

Coorientador

Dr. Sérgio Martins de Souza

LAVRAS - MG

2016

**Ficha Catalográfica Elaborada pelo Sistema de Geração de Ficha
Catalográfica da Biblioteca Universitária da UFLA, com dados informados
pelo próprio(a) autor(a).**

Rodrigues, Felipe da Cruz.

Cadeia Cairo Pentagonal Geometricamente Frustrado com
Acoplamentos Ising-Heisenberg / Felipe da Cruz Rodrigues.

– Lavras: UFLA, 2016.

60 p.: il.

Dissertação (mestrado acadêmico) - Universidade Federal de
Lavras, 2016.

Orientador: Onofre Rojas Santos.

Bibliografia.

1. Cairo pentagonal. 2. Acoplamento Ising-Heisenberg. 3
Frustração geométrica. I. Universidade Federal de Lavras. II. Título

FELIPE DA CRUZ RODRIGUES

**CADEIA CAIRO PENTAGONAL
GEOMETRICAMENTE FRUSTRADO COM
ACOPLAMENTO ISING-HEISENBERG**

Dissertação de mestrado apresentada à
Universidade Federal de Lavras, como
parte das exigências do Programa de Pós-
Graduação em Física, área de concentra-
ção em Física da Matéria Condensada,
para a obtenção do título de Mestre.

APROVADA em 16 de Setembro de 2016.

Dr. Cleverson Filgueiras	UFLA
Dr. Marcelo Leite Lyra	UFAL
Dr. Moisés Porfírio Rojas Leyva	UFLA

Dr. Onofre Rojas Santos
Orientador

LAVRAS - MG

2016

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais por acreditarem em mim, a minha irmã Jéssica por sempre estar ao meu lado. À minha namorada Thamiris pelo apoio incondicional. Ao grupo de estudo em física estatística: Prof. Onofre, Prof. Sérgio, Prof. Moisés, ao colega e amigo Felipe Fortes e à colega Jordana Torrico. Por fim, a todos os meus amigos discentes e docentes que trouxeram alegria à minha pós-graduação.

RESUMO

Recentemente, foram descobertos alguns compostos, tais como $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ e $\text{Bi}_4\text{Fe}_5\text{O}_{13}\text{F}$, que se cristalizam em uma cadeia Cairo pentagonal. Com esta motivação, este trabalho dedica-se ao estudo de uma cadeia quase bidimensional de estrutura Cairo pentagonal com acoplamento Ising-Heisenberg. Um dos lados do pentágono tem interação tipo Heisenberg, enquanto que todos os outros lados têm interações tipo Ising. A primeira análise do modelo foi feita a temperatura zero, onde são encontradas cinco fases distintas: uma fase ferromagnética (FM), uma fase dímero antiferromagnético (DAF), uma fase plaqueta antiferromagnética (PAF), uma fase típica antiferromagnética (AFM) e uma fase peculiar de dois tipos de frustração degenerada (FRU). Em uma rede pentagonal bidimensional, a fase DAF será transformada em uma fase ferrimagnética, isto devido ao compartilhamento de spins entre células unitárias. No entanto, as fases AFM e PAF não existirão na rede bidimensional, isto porque os spins compartilhados entre as células unitárias não serão compatíveis. A seguir, com o objetivo de estudar a termodinâmica, é obtida a função de partição do modelo, usando a abordagem de matriz de transferência e a notação do modelo de 8-vértices. Com isso, foi discutido o calor específico e a entropia em função da temperatura. Foi observado um comportamento inesperado no limite de baixa temperatura, além de entropia residual. Foram encontrados dois picos anômalos de calor específico em uma região de três fases ocorrendo bem próximas umas das outras (FM, PAF e FRU). Conseqüentemente, a excitação térmica de baixa amplitude gera os dois picos anômalos. Também será discutida a energia interna no limite de baixas temperaturas, na região onde ocorrem os picos para o calor específico.

Palavras-chave: Cairo pentagonal, acoplamento Ising-Heisenberg, frus-

tração geométrica.

ABSTRACT

Motivated by the recent discoveries of some compounds such as the $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ which crystallizes in an orthorhombic crystal structure with the Fe^{3+} ions forming a Cairo pentagonal tiling, and iron-based oxyfluoride $\text{Bi}_4\text{Fe}_5\text{O}_{13}\text{F}$ compounds with Cairo pentagonal structure, among some others. We propose a model for one stripe of the Cairo pentagonal Ising-Heisenberg lattice, one of the edges of a pentagon is different, and this edge will be associated with a Heisenberg exchange interaction, while an Ising exchange interaction will associate the other edges. We study the phase transition at zero temperature, illustrating five phases, one ferromagnetic phase (FM), one dimer antiferromagnetic (DAF), one plaquette antiferromagnetic (PAF), one typical antiferromagnetic (AFM) and a peculiar two coexisting frustrated phase (FRU). In the two-dimensional pentagonal lattice, the DAF phase will be transformed in a ferrimagnetic phase, due to the sharing spins between unit cell. However, AFM and PAF phase will be forbidden in the two-dimensional lattice, because the sharing spins will not be compatible. To obtain the partition function of this model, we can use the direct decoration transformation, as well as transfer matrix approach and following the eight vertex model notation. Using this result we discuss the specific heat and the entropy as a dependence of temperature, and we observe an unexpected behavior in the low-temperature limit, besides residual entropy. Such as anomalous double peak due the existence of three phase transition occurring in a very close region to each other (FM, PAF e FRU). Consequently, the thermal excitation of low-lying energy generates this anomalous double peak, and we also discuss the internal energy in the low-temperature limit, where occurred this double peak curves.

Key words: Cairo pentagonal, Ising-Heisenberg coupling, geometrical

frustration.

Lista de Símbolos

Z	Função de Partição
p_i	Probabilidade de se encontrar um microestado
κ_B	Constante de Boltzmann
T	Temperatura
E_i	Energia de cada microestado
W	Fator de Boltzmann
S	Entropia do sistema
S	Entropia por sítio
Q	Quantidade de calor
Ω	Possíveis configurações dos microestados
F	Energia livre de Helmholtz
C	Calor específico
M	Magnetização de um sistema
μ_i	Momento magnético da i -ésima partícula
H	Campo magnético externo
\mathcal{H}	Hamiltoniana do sistema
J_0	Interação de acoplamento Ising
s	Spins Ising
σ	Spins Heisenberg

- J Interação de acoplamento Heisenberg nos eixos xy
- Δ Interação anisotrópica Heisenberg no eixo z
- ω_i Fator de Boltzmann da célula elementar ab usando modelo de 8-vértices
- $\tilde{\omega}_i$ Fator de Boltzmann da célula elementar cd usando modelo de 8-vértices
- T** Matriz de transferência

Lista de Figuras

- 1 Esquemas sobre os tipos de magnetização em um material no estado fundamental. Em (a) tem-se a orientação paralela dos spins de uma rede (acoplamento ferromagnético). Em (b) tem-se a orientação antiparalela dos spins de um material, conhecido como acoplamento antiferromagnético. Na figura (c) é representado um material com acoplamentos antiparalelos, porém com módulos distintos (ferrimagnetismo). Em (d) vê-se que os spins do material paramagnético são distribuídos de forma aleatória, tendo assim uma magnetização praticamente nula. 26
- 2 Configurações dos spins para o estado fundamental da equação (16). Em (a) tem-se uma interação ferromagnética, assim o acoplamento é $J_0 > 0$. Em (b) tem-se um esquema de frustração quando $J_0 < 0$, portanto a interação é antiferromagnética. Em (c) tem-se um outro exemplo de frustração geométrica. 29
- 3 Cadeia Cairo pentagonal com acoplamento Ising. A parte sublinhada destaca a formação de uma célula que será denominada célula unitária. 32
- 4 Diagrama de Fase de $\Delta \times J_0$ 34
- 5 Esquema de uma cadeia Cairo pentagonal quase-unidimensional com acoplamento Ising-Heisenberg, sendo destacada em uma rede bidimensional. 38
- 6 Transformação decoração direta (DDT) para o dímero ab em um diamante, o dímero cd pode ser obtido rodando ab em $\pi/2$ 39

- 7 Tira pentagonal que pode ser mapeada para uma cadeia de diamante com acoplamento de segundos vizinhos, que por sua vez se torna uma cadeia de Ising simples com spin-1. 40
- 8 Diagrama de Fase para o estado fundamental. (a) Variando $\Delta \times J_0$, fixando $J = 1.0$. (b) Variando $\Delta \times J$, fixando $J_0 = 1.0$ 47
- 9 Gráficos da densidade da entropia para uma temperatura fixa $T = 0.01$. (a) A entropia como função de J_0 e Δ , fixando $J = 1.0$. Em (b) tem-se a entropia em função dos acoplamentos J e Δ , fixando $J_0 = 1.0$ 54
- 10 (a) Entropia em função da temperatura para os parâmetros fixos $\Delta = -1.5$, $J_0 = 1$ e $J = \{0.45, 0.48, 0.5, 0.53, 0.55\}$. A temperatura está em escala logarítmica. (b) Calor específico em função da temperatura para os mesmos parâmetros fixados em (a). (c) Energia interna em função da temperatura, também para os mesmos parâmetros fixados em (a), porém a temperatura está disposta em escala linear. 56

Sumário

1	Introdução	15
2	Estudos Recentes	17
3	Referencial teórico	21
3.1	A função de partição	22
3.2	Energia livre de Helmholtz	23
3.3	Entropia	23
3.4	Calor específico	24
3.5	Susceptibilidade magnética	25
3.6	Propriedades magnéticas	25
3.6.1	Ferromagnetismo	26
3.6.2	Antiferromagnetismo	27
3.6.3	Ferrimagnetismo	27
3.6.4	Paramagnetismo	27
3.7	Frustração	28
3.8	Entropia residual	30
3.9	Diagrama de fase	31
4	O modelo Cairo pentagonal de Ising	32
4.1	Diagrama de fase	33
4.2	Estado frustrado do modelo Ising	35
5	O modelo Cairo pentagonal Ising-Heisenberg	38
5.1	Equivalência entre os modelos	39
5.2	Diagrama de fase	41
5.3	A termodinâmica do modelo	48

5.4	Quantidades físicas	53
6	Conclusão	58
	REFERÊNCIAS	59

1 Introdução

Há poucos anos atrás, a investigação de cadeias Cairo pentagonal atraiu muita atenção em pesquisas de física da matéria condensada. A proposta em utilizar este tipo de rede, além de se estudar suas propriedades magnéticas, é a característica de frustração geométrica do sistema no limite de baixa temperatura. Para tanto, variadas pesquisas se aprofundaram em diversificadas redes com parâmetros de acoplamentos distintos, com ou sem campo externo, rede finitas ou infinitas, com temperaturas fixas ou variadas entre outros. Tudo isto para uma maior compreensão da rede Cairo pentagonal. Este também é o intuito deste trabalho, fazer uma pesquisa inédita da rede Cairo pentagonal unidimensional com acoplamentos Ising-Heisenberg de spins-1/2, onde se pretende estudar suas características físicas e magnéticas bem como seus estados fundamentais pelo diagrama de estado fundamental.

Desta forma, no próximo capítulo denominado estudos recentes, tem-se uma explanação sobre as pesquisas que foram feitas tendo como objeto de estudo estruturas Cairo pentagonais. O leitor encontrará referências teóricas e práticas do modelo Cairo pentagonal e desta forma, utilizando das pesquisas anteriores, uma introdução para o tema proposto por esta dissertação.

No capítulo de referencial teórico estão organizados os temas de física estatística que, de certa forma, ajudarão o leitor a uma melhor compreensão dos capítulos subsequentes. São discutidas como subseções a função partição, a energia livre de Helmholtz, entropia, calor específico, susceptibilidade magnética, propriedades magnéticas tais como: ferromagnetismo, antiferromagnetismo, ferrimagnetismo e paramagnetismo. Também estão como subseção no capítulo de referencial teórico a frustração geométrica, entropia residual e diagrama de fase.

No próximo capítulo, denominado o modelo Cairo pentagonal de Ising,

está sendo discutido o modelo proposto por este trabalho, que é uma rede quase-unidimensional Cairo pentagonal, porém com interação de spins somente Ising. Acredita-se que a abordagem deste modelo com acoplamentos menos elaborados podem ajudar na melhor compreensão da rede. Neste capítulo são discutidos como subseção o diagrama de fase e por último o estado frustrado do modelo Ising.

Seguindo uma ordenação que se acredita ser mais didática, no próximo capítulo é apresentado o modelo Cairo pentagonal Ising-Heisenberg, que é a proposta deste trabalho. Estão dispostos como temas de subseção a equivalência entre os modelos (onde é verificada a solução da função partição pelo método de transformação decoração direta), diagrama de fase, a termodinâmica do modelo e por fim, quantidades físicas.

No capítulo de conclusão, serão debatidos os pontos de maior relevância deste trabalho bem como suas interpretações físicas.

2 Estudos Recentes

O estudo sobre cadeias pentagonais vem sendo difundido relativamente há poucos anos atrás. Pode-se dizer que a pesquisa em que foram desencadeadas várias outras abordagens teóricas e práticas da rede Cairo pentagonal bidimensional foi por Urumov (2002), lá propunha a solução exata de um arranjo pentagonal de redes em duas dimensões usando a técnica de transformação decoração.

Pela ordem cronológica (RESSOUCHE et al., 2009) apresenta o composto $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ que se cristaliza em uma estrutura ortorrômbica cristalina com íons de Fe^{3+} . Este estudo é a primeira analogia experimental de uma rede pentagonal magnética. Usando medidas magnéticas macroscópicas e difração de neutron foram investigadas as propriedades magnéticas do composto.

Ralko em 2011 estudou o diagrama de fase Cairo pentagonal XXZ com spin-1/2 sobre um campo magnético externo, além de algumas propriedades para temperatura finita e temperatura zero usando expansão em séries estocásticas do método de Monte Carlo quântico e a teoria de aproximação de campo médio. Foram estudados três tipos distintos de fases isolantes onde foram discutidos casos ferro e antiferromagnéticos assim como a presença de um superfluido ferrimagnético e sua fusão térmica.

Percebendo a importância de se encontrar uma possível generalização do modelo Cairo pentagonal de Ising bidimensional (ROJAS; ROJAS; SOUZA, 2012) utilizam a técnica de transformação decoração direta (ROJAS; SOUZA, 2011). Desta forma encontram a solução exata do modelo, como também identificam o diagrama de estado fundamental onde são encontradas as fases: ferromagnética, ferrimagnética e um estado frustrado. É discutido no diagrama de fase para temperatura finita a transição de fase entre o estado ferrimagnético com o estado ferromagnético. São estudadas ainda propriedades do modelo como magnetização,

entropia e calor específico para temperatura finita e muito baixa para um limite assintótico.

Em Rousochatzakis, Läuchli e Moessner (2012) os autores fazem extenso estudo analítico e numérico do modelo Cairo pentagonal de spins Heisenberg com acoplamento antiferromagnético. Investigam a configuração do diagrama de fase para spins clássicos e depois trocam algumas interações por spins quânticos, desta forma são avaliadas várias formas de modelos Cairo pentagonal com acoplamentos clássicos e quânticos.

Com a pesquisa de Pchelkina e Streltsov (2013) tem-se o *ab initio* do composto $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$. Neste trabalho encontram-se a investigação da estrutura eletrônica e as propriedades magnéticas do composto. Mostra-se evidente a formação da cadeia Cairo pentagonal com uma forte frustração geométrica, onde se tem uma discussão sobre a frustração da rede.

Em Abakumov et al. (2013) encontra-se uma nova estrutura cristalina e magnética em oxifluoreto com base de ferro sendo o composto $\text{Bi}_4\text{Fe}_5\text{O}_{13}\text{F}$. Este material também apresenta uma estrutura Cairo pentagonal que é investigada por microscópio eletrônico de transmissão em baixa temperatura. São estudados os tipos de frustração geométrica e entropia do composto para valores distintos de temperatura.

Com Isoda, Nakano e Sakai (2014) tem-se a investigação de uma rede bidimensional Cairo pentagonal de spin-1/2 Heisenberg com acoplamento antiferromagnético. Sua solução foi calculada por diagonalização numérica e com clusters finitos utilizando trinta e seis sítios. Foram encontrados a magnetização, diagrama de fase, calor específico e susceptibilidade magnética. No mesmo ano (NAKANO; ISODA; SAKAI, 2014) aprimoraram suas pesquisas estudando uma mesma rede bidimensional Cairo pentagonal de spin-1/2 Heisenberg com acopla-

mento antiferromagnético, porém com outros valores de sítios para clusters finitos. Utilizando a mesma técnica de diagonalização numérica os autores investigam outras propriedades da rede antiferromagnética tais como platôs magnéticos para vários ajustes de $\eta = J'/J$, onde J' e J são constantes de acoplamento entre os spins.

Outra investigação teórica foi realizada por Chainani e Sheshadri (2014) para a rede bidimensional Cairo pentagonal antiferromagnética de primeiros vizinhos para o modelo de Ising. Os parâmetros de acoplamentos tiveram dopagem virtual de $x = 0, 1/6, 1/3$ com interação de primeiros vizinhos antiferromagnética. Os resultados analíticos foram comparados com os resultados dos compostos $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ e um composto de valência mista $\text{BiFe}_2\text{O}_{4.63}$.

É válido acrescentar uma nova descoberta experimental, de um pentágrafeno, estudado por Zhang et al. (2015). Este material não é magnético, mas segue o padrão do arranjo Cairo pentagonal e os autores consideram sua aplicação na área de nanomecânica e nanoeletrônicos.

Já neste ano Rozova et al. (2016) apresentam um novo composto $\text{Bi}_2\text{Fe}_{4-x}\text{Cr}_x\text{O}_9$ (onde $x = 0.5, 1, 1.2$) que foi sintetizado usando uma técnica química seguida de uma reação em estado sólido em Argônio, que é um sólido altamente homogêneo de material mulita. Este material tem como representação esquemática uma rede Cairo pentagonal, em que sua estrutura eletrônica foi comparada com outros compostos da literatura que tinham característica de frustração geométrica como a rede Cairo pentagonal. Há ainda novos estudos experimentais de compostos de mesma estrutura pentagonal, tais como cristais em duas dimensões SnX_2 ($X = \text{S}, \text{Se}$ ou Te), investigados por Ma et al. (2016).

Em Shastry e Sutherland (1981) tem-se como motivação a cadeia Cairo pentagonal sendo uma rede dual, e a proposta de Ivanov e Richter (1997) para

uma cadeia unidimensional chamada de plaqueta de dímero ortogonal. Assim, a cadeia Cairo pentagonal pode ser vista como uma cadeia unidimensional decorada dímero ortogonal como em Paulinelli, Souza e Rojas (2013) ou bidimensional como em Verkholyak e Streka (2013). Nestes trabalhos, o modelo para spin Ising pode ser considerado como spins decorados.

Deve-se estar atento sobre não usar a técnica de transformação decoração de Fisher (1959) para mapear a cadeia Cairo pentagonal para uma cadeia de dímero ortogonal. Isto porque existirão, para o modelo deste trabalho, acoplamentos entre spins quânticos e spins quânticos com spins clássicos. Desta forma, existe uma técnica de transformação decoração quântica (BRAZ et al., 2016). Para que este tipo de transformação seja exata, deve-se aplicar para o modelo da rede um mapeamento de aproximação.

3 Referencial teórico

Em física estatística, sistemas termodinâmicos podem ser estudados de diversas formas. Para estudá-los, deve-se primeiro entender quais são os parâmetros que constituem o conjunto microscópico, também conhecido como *ensemble estatístico* (REIF, 2009).

Ensemble microcanônico: Para um sistema completamente isolado (onde não há troca de partículas e energia praticamente constante entre E e $E + \delta$), dá-se o nome de *ensemble microcanônico*. Desta forma, estuda-se os possíveis microestados deste sistema para energia fixa (SALINAS, 2013).

Como a probabilidade é uma função do número de microestados de um *ensemble microcanônico*, é razoável entender também a entropia como uma função do número de microestados. Assim, a entropia postulada por Ludwig Boltzmann e gravada em sua epígrafe é definida como (SALINAS, 2013)

$$S = \kappa_B \ln(\Omega), \quad (1)$$

onde Ω são as configurações dos microestados de um sistema. Assim como a entropia, a temperatura pode ser entendida como o arranjo dos microestados do sistema. Desta forma, tem-se uma conexão entre a física estatística (tratamento probabilístico) com a consolidada termodinâmica (SALINAS, 2013).

Ensemble canônico: Um *ensemble canônico*, assim como o *ensemble microcanônico*, é um *ensemble estatístico* onde não há troca de partículas com o meio externo, porém o sistema está em banho térmico (contato com um reservatório térmico a uma dada temperatura).

Ensemble grande canônico: Para o *ensemble grande canônico* tem-se, além de um sistema em contato com um reservatório térmico (troca de energia entre reservatório e sistema), a troca de partículas (entre sistema-reservatório). Este sistema é muito útil para cálculos quânticos de um gás de partículas (SALINAS, 2013).

3.1 A função de partição

Em física estatística, dado um sistema em contato e em equilíbrio térmico com um reservatório onde tenham o mesmo valor macroscópico, qualquer estudante se depara com a seguinte pergunta: Quais os arranjos atômicos possíveis que deverão existir para este sistema fechado? O grande interesse de entender este fenômeno é escrever sua Hamiltoniana e assim encontrar todos os seus possíveis microestados.

Desta forma, pelo *ensemble canônico*, tem-se que a probabilidade de se encontrar cada microestado p_i do sistema é:

$$p_i = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta E_i}, \quad (2)$$

onde $\beta = \frac{1}{\kappa_B T}$, sendo κ_B a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta do sistema, E_i a energia do microestado. A constante \mathcal{Z} é chamada de função de partição. Neste caso ela é utilizada para normalizar a probabilidade p_i . Assim a função de partição é uma soma sobre todos os possíveis estados, portanto:

$$\mathcal{Z} = \sum_i e^{-\beta E_i}. \quad (3)$$

Ademais, pode-se estender este conceito para a mecânica quântica, a função de partição pode ser dada como Baxter (1982):

$$\mathcal{Z} = \text{tr} \left(e^{-\beta \mathcal{H}} \right), \quad (4)$$

onde \mathcal{H} é a Hamiltoniana do sistema. Uma vez que o operador Hamiltoniano de um sistema é diagonalizado, torna-se mais fácil seu manuseio.

3.2 Energia livre de Helmholtz

Em física estatística, a energia livre é proporcional ao logaritmo da função de partição (REIF, 2009), assim:

$$F = -\kappa_B T \ln(\mathcal{Z}), \quad (5)$$

provida da primeira lei da termodinâmica, tem-se a energia livre de Helmholtz:

$$F = U - TS. \quad (6)$$

Deve-se ter o cuidado de entender que a energia livre tratada aqui como F representa a energia de todo o sistema. Provida desta interpretação estatística, pode-se estudar outras grandezas físicas, como por exemplo a entropia.

3.3 Entropia

Já definida na equação (1) pela mecânica estatística, a entropia também é escrita como:

$$\mathcal{S} = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right), \quad (7)$$

Pela segunda lei da termodinâmica, a entropia é o fenômeno de irreversibilidade de um sistema isolado (REIF, 2009). Pela entropia se firma uma conexão do

ensemble canônico com a termodinâmica (SALINAS, 2013). Pensada em ciclos de energia, a variação da entropia pode ser equacionada como:

$$\Delta S = \int \frac{dQ}{T}, \quad (8)$$

onde Q é a quantidade de calor cedida ou absorvida pelo sistema e T a temperatura do sistema. Vê-se que $\Delta S \geq 0$, sendo zero para sistemas reversíveis e para sistemas irreversíveis ela é sempre positiva.

3.4 Calor específico

O calor específico pode ser entendido como a razão positiva entre a quantidade de calor adquirido pelo sistema com a variação da temperatura (SALINAS, 2013).

Existem duas formas de se encontrar o calor específico. Pode-se obtê-lo à pressão constante C_P ou à volume constante:

$$C_x = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_x, \quad (9)$$

onde $x = P, V$, pressão e volume respectivamente. Pela equação (7), encontra-se:

$$C_x = T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_x. \quad (10)$$

Para materiais magnéticos, o calor específico pode estar variando com relação à temperatura ou campo magnético. Picos de calor específico em amostras de material magnético evidenciam possíveis transições de fases magnéticas.

3.5 Susceptibilidade magnética

Assim como no calor específico, pode-se encontrar a razão entre uma quantidade bem estabelecida do sistema, como no caso a magnetização total, pela variação do campo magnético externo. A proporção encontrada é comumente conhecida como susceptibilidade magnética:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H}, \quad (11)$$

em termos da energia livre, tem-se:

$$\chi = -\frac{\partial^2 F}{\partial H^2}. \quad (12)$$

3.6 Propriedades magnéticas

De forma geral, a magnetização de um sistema (M) é encontrada pela orientação magnética de cada átomo da rede, também conhecida como momento magnético μ_i . Desta forma,

$$M = \sum_i \mu_i, \quad (13)$$

a qual também pode ser encontrada usando os conceitos termodinâmicos (REIF, 2009):

$$M = -\left(\frac{\partial F}{\partial H}\right), \quad (14)$$

onde H é o campo magnético externo.

Para um sistema menos complexo, onde o espaço de estados do spin de cada átomo pode ser orientado para cima \uparrow ou para baixo \downarrow , conhecidos como

spins de Ising-1/2, a Hamiltoniana fica (SALINAS, 2013):

$$\mathcal{H} = - \sum_i \mu_i H, \quad (15)$$

onde \mathcal{H} é o operador Hamiltoniano do sistema. Desta forma a energia do sistema é encontrada pelos possíveis autoestados dos spins da rede (SALINAS, 2013).

3.6.1 Ferromagnetismo

É dito que um material possui propriedade ferromagnética quando seus spins se alinham de forma paralela (mesma direção e sentido). Este tipo de acoplamento gera uma magnetização parcial ou em blocos (clusters, figura 1a) na rede (KITTEL, 2005).

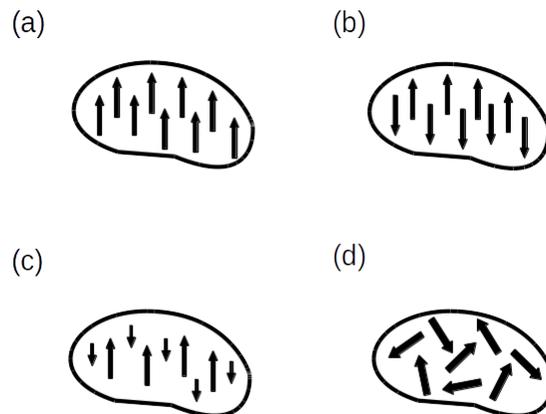


Figura 1 Esquemas sobre os tipos de magnetização em um material no estado fundamental. Em (a) tem-se a orientação paralela dos spins de uma rede (acoplamento ferromagnético). Em (b) tem-se a orientação antiparalela dos spins de um material, conhecido como acoplamento antiferromagnético. Na figura (c) é representado um material com acoplamentos antiparalelos, porém com módulos distintos (ferrimagnetismo). Em (d) vê-se que os spins do material paramagnético são distribuídos de forma aleatória, tendo assim uma magnetização praticamente nula.

3.6.2 Antiferromagnetismo

Neste caso, os spins da rede tendem a se alinhar de forma antiparalela (mesma direção mas sentidos opostos) com seus vizinhos (ver figura 1b). Desta forma, a magnetização total do sistema tende a ser nula no estado fundamental ou quando a temperatura é baixa o suficiente ($T < T_c$) (KITTEL, 2005).

Aplicando-se um campo externo H e temperatura pequenos o suficiente, os spins ainda tendem a se alinhar de forma antiparalela.

3.6.3 Ferrimagnetismo

Assim como no caso de antiferromagnetismo, os spins tendem a se alinhar de forma antiparalela. Porém, o módulo de alguns momentos magnéticos da rede são maiores que outros ocasionando, no estado fundamental ou para $T < T_c$, uma magnetização efetiva, porém com menor intensidade comparada ao material ferromagnético em 1a. Assim dá-se o nome de ferrimagnético a este material (ver figura 1c) (KITTEL, 2005).

É importante perceber que a magnetização total do sistema ferrimagnético é menor que a magnetização total para um material ferromagnético, já que seus spins tendem a se alinhar antiparalelamente.

3.6.4 Paramagnetismo

Materiais paramagnéticos se comportam como um sistema de momentos magnéticos desordenados. A determinadas temperaturas (quanto maior energia maior a desordem entre os spins) os momentos magnéticos de cada átomo não se alinham, ou seja, não existe uma orientação bem definida para os spins da rede. Desta forma, a magnetização total do sistema tende a ser nula (KITTEL, 2005; SALINAS, 2013).

Aplicando um campo magnético externo, pequeno o suficiente, os spins da rede se orientam na mesma direção e sentido do campo H , porém com menor intensidade comparado ao caso ferromagnético.

Com o limite da temperatura indo a zero, os spins do material paramagnético se orientam de forma aleatória (ver figura 1d). Assim, sua magnetização é nula.

3.7 Frustração

Na mecânica estatística do equilíbrio térmico, a ordenação dos estados de um sistema pode ser crucial. A palavra frustração é usada para designar estados, ou configurações de um sistema onde um ou mais spins não conseguem ter uma orientação (referente aos spins vizinhos) que satisfaça completamente a característica da rede (DIEP, 2004). Redes cristalinas triangulares como a rede cúbica de face centrada (fcc), ou a rede hexagonal (hcp) carregam estados frustrados quando a interação entre seus spins é antiferromagnética (DIEP, 2004).

Por exemplo, um arranjo pentagonal de spins Ising 1/2 pode ter sua energia dada pela seguinte relação:

$$\mathcal{H} = -J_0 \sum_{i=1}^5 s_i s_{i+1}, \quad (16)$$

onde \mathcal{H} é a Hamiltoniana do sistema, J_0 o acoplamento com a componente no eixo z entre os primeiros vizinhos de spin-1/2 (s_i e s_{i+1}). Devido à condição periódica tem-se que $s_6 = s_1$. Forma-se assim um modelo Ising com estrutura pentagonal (FISHER, 1959). Quando $J_0 > 0$ (interação ferromagnética), o estado fundamental do sistema, ou seja o estado onde a energia da rede é mínima, será $E = -5J_0$. É fácil perceber que todos os spins se orientam paralelamente, portanto tem o mesmo sinal (ver figura 2a)

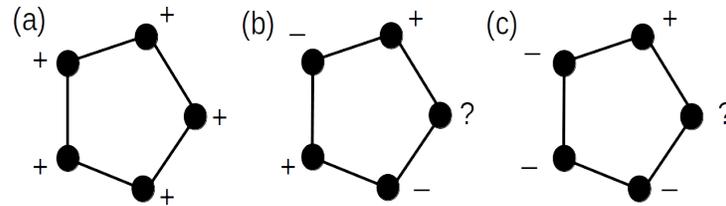


Figura 2 Configurações dos spins para o estado fundamental da equação (16). Em (a) tem-se uma interação ferromagnética, assim o acoplamento é $J_0 > 0$. Em (b) tem-se um esquema de frustração quando $J_0 < 0$, portanto a interação é antiferromagnética. Em (c) tem-se um outro exemplo de frustração geométrica.

Quando o acoplamento é antiferromagnético, o estado que anteriormente era fundamental (estado ferromagnético) se torna agora um estado de maior energia. Um material com propriedade antiferromagnética tem sua energia fundamental quando cada spin se alinha de forma antiparalela com seus vizinhos (como comentado no item 3.6.2) (KITTEL, 2005).

Vendo a figura 2b, o spin marcado com um ponto de interrogação tem este sinal pois de acordo com a interação de seu vizinho de baixo ele deve se alinhar de forma oposta (ou seja com sinal positivo). Porém, a interação com o vizinho de cima deve levá-lo para um estado contrário ao que ele deveria ter (sinal negativo). Logo, este spin não consegue encontrar um estado que satisfaça de forma igualitária os seus dois primeiros vizinhos. Desta forma, calculando a Hamiltoniana deste pentágono frustrado (equação (16)), sua energia será sempre $E = -3J_0$.

A figura 2c é um outro exemplo de frustração geométrica. Onde para qualquer orientação do spin marcado com o símbolo de interrogação, a energia do pentágono (para $J_0 > 0$) será $E = -J_0$. Para este pentágono isolado, sua energia

fundamental nunca terá esta configuração, porém disposto em uma cadeia, pode ser que este tipo de configuração seja um bom exemplo de estado fundamental com frustração geométrica (esta configuração aparece quando são estudados os estados frustrados da cadeia Cairo pentagonal de acoplamento Ising).

É importante perceber que para spins de acoplamento Heisenberg existe uma peculiaridade. Enquanto spins de Ising se alinham verticalmente, em somente um eixo de simetria (comumente estudado como eixo z), deve-se lembrar que um spin de Heisenberg pode se ordenar nos três eixos de coordenadas (x, y, z) . Desta forma, mesmo quando dois spins de Heisenberg tiverem acoplamento ferromagnético em um de seus eixos (por exemplo no eixo z) os outros eixos podem se alinhar de forma antiparalela. Portanto, para a mesma configuração no eixo z , haverá duas possíveis configurações nos outros eixos de acoplamento entre os spins quânticos. Assim, existirá uma degenerescência nos acoplamentos mesmo que suas ligações fossem ferromagnéticas.

3.8 Entropia residual

Existem materiais que quando submetidos a uma temperatura perto do zero absoluto tem uma propriedade peculiar. A entropia do sistema, mesmo com baixa energia, é diferente de zero. Isto quer dizer que a rede estudada não tem somente uma única configuração quando se é esperado o estado fundamental do sistema. Para este fenômeno, deu-se o nome de entropia residual (DIEP, 2004)

O primeiro exemplo de entropia residual surgiu com a descoberta de sistemas frustrados em uma rede chamada de gelo cristalino. Assim, investigando a origem da frustração geométrica da estrutura cristalina "spin ice", Linus Pauling chegou à seguinte conclusão: existe uma desordem no sistema, mesmo a uma temperatura perto do zero absoluto. Ou seja, o pesquisador mostra que o es-

tado fundamental da estrutura era macroscopicamente degenerada (BRAMWELL; GINGRAS, 2001; PAULING, 1935).

Encontra-se, portanto, uma correlação entre estruturas com frustração geométrica e fenômeno físico denominado entropia residual.

3.9 Diagrama de fase

Na termodinâmica, o diagrama de fase tem como objetivo elucidar os possíveis estados da matéria. Mas para o estado fundamental, as fases encontradas no diagrama de fase mostram quais são os estados de menor energia do sistema. Assim, para alguns parâmetros, tais como acoplamentos de característica Ising ou Heisenberg, encontra-se um diagrama da rede para temperatura tendendo ao zero absoluto.

4 O modelo Cairo pentagonal de Ising

Antes de se propor o estudo de um acoplamento mais completo, convém entender um modelo mais simples. O modelo de cadeia quase-unidimensional Cairo pentagonal pode ser tratado unicamente com acoplamentos Ising de spin-1/2 no eixo z , como representado na figura 3.

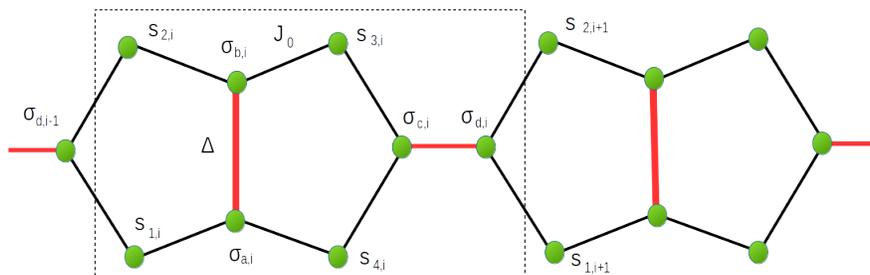


Figura 3 Cadeia Cairo pentagonal com acoplamento Ising. A parte sublinhada destaca a formação de uma célula que será denominada célula unitária.

Pela figura 3, pode-se escrever a Hamiltoniana do modelo como:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left(\mathcal{H}_i^{ab} + \mathcal{H}_{i,i+1}^{cd} \right), \quad (17)$$

onde as Hamiltonianas \mathcal{H}_i^{ab} e $\mathcal{H}_{i,i+1}^{cd}$ são:

$$\mathcal{H}_i^{ab} = -\Delta \sigma_{a,i} \sigma_{b,i} - J_0 [(s_{1,i} + s_{4,i}) \sigma_{a,i} + (s_{2,i} + s_{3,i}) \sigma_{b,i}], \quad (18)$$

$$\mathcal{H}_{i,i+1}^{cd} = -\Delta \sigma_{c,i} \sigma_{d,i} - J_0 [(s_{3,i} + s_{4,i}) \sigma_{c,i} + (s_{1,i+1} + s_{2,i+1}) \sigma_{d,i}]. \quad (19)$$

As Hamiltonianas (18) e (19) serão definidas neste trabalho como células elementares. Portanto, observa-se que para a formação de uma célula unitária é necessário ter duas "células elementares". Por célula elementar é definido o

dímero ab ou cd acoplados com spins- s_i . Assumindo que a cadeia satisfaz a condição periódica $s_{N+1} = s_1$ e $\sigma_{N+1} = \sigma_1$.

Entende-se por célula unitária a descrição de conjuntos de átomos, que dispostos de forma consecutiva, reproduzem a cadeia estudada. Um exemplo de célula unitária é o esquema de átomos destacados pelo quadro sublinhado na figura 3.

Usando as configurações com energias mais baixas para cada célula unitária, encontra-se o diagrama de fase do modelo à temperatura zero.

4.1 Diagrama de fase

Usando todas as possíveis energias de estado fundamental para cada célula unitária, encontra-se o diagrama de fase do modelo à temperatura zero. O modelo com acoplamento Ising se torna menos complicado e mais intuitivo. Portanto, nesta seção será analisada somente o diagrama de fase para uma cadeia quase-unidimensional Cairo pentagonal com acoplamento Ising. O diagrama de fase do modelo de Ising está representado na figura 4. Sobre a energia do estado fundamental da rede, foram encontrados cinco valores de energia,

$$E_{FM} = -\frac{\Delta}{2} - 2J_0, \quad (20)$$

$$E_{DAF} = -\frac{\Delta}{2} + 2J_0, \quad (21)$$

$$E_{PAF} = -2J_0, \quad (22)$$

$$E_{AFM} = 2J_0, \quad (23)$$

$$E_{FRU} = \frac{\Delta}{2} - J_0. \quad (24)$$

A fase ferromagnética (FM) representa todos os spins alinhados parale-

lamente, dada pelo autovalor (20). Os autovalores (21, 22, 23) representam três tipos de fase antiferromagnética: dímero antiferromagnético (DAF), plaqueta antiferromagnética (PAF) e uma configuração clássica antiferromagnética (AFM), mais detalhes sobre estas fases serão dadas mais adiante. A fase com frustração geométrica (FRU) escrita pelo autovalor (24) evidencia três configurações distintas para a mesma energia, onde tais configurações não se misturam, como será discutido na próxima seção.

Para melhor compreensão dos estados representados no diagrama de fases da figura 4, será considerado o seguinte esquema para os estados fundamentais do modelo: $|s_1^{s_2}\rangle \otimes |\sigma_a^b\rangle \otimes |s_3^{s_4}\rangle \otimes |\sigma_c \sigma_d\rangle \otimes |s_5^{s_6}\rangle$ que representa todos os possíveis estados de uma célula unitária. Percebe-se que a primeira célula elementar é representada pelo produto direto $|s_1^{s_2}\rangle \otimes |\sigma_a^b\rangle \otimes |s_3^{s_4}\rangle$, para a segunda célula elementar tem-se $|s_3^{s_4}\rangle \otimes |\sigma_c, \sigma_d\rangle \otimes |s_5^{s_6}\rangle$.

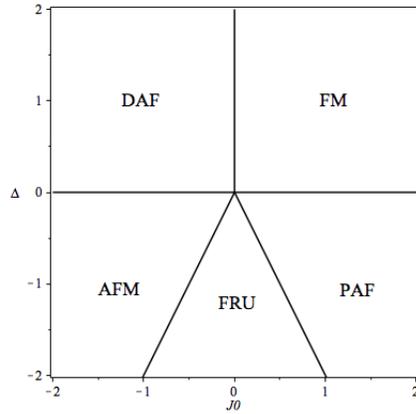


Figura 4 Diagrama de Fase de $\Delta \times J_0$.

Desta forma, é possível escrever esquematicamente os estados do diagrama como sendo:

$$|FM\rangle = \prod_{i=1}^N \{|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle|+\rangle|\uparrow\rangle\}_i, \quad (25)$$

$$|DAF\rangle = \prod_{i=1}^N \{|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle|-\rangle|\uparrow\rangle\}_i, \quad (26)$$

$$|PAF\rangle = \prod_{i=1}^{N/2} \{|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle|+\rangle|\downarrow\rangle|\downarrow\rangle|-\rangle|\uparrow\rangle\}_i, \quad (27)$$

$$|AFM\rangle = \prod_{i=1}^{N/2} \{|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle|-\rangle|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle|+\rangle|\uparrow\rangle\}_i. \quad (28)$$

É observado que os estados PAF e AFM precisam de duas células unitárias para representá-los. O estado FRU também necessita de duas células, mas além disso convém estudar com mais profundidade este estado do modelo Ising. Para tanto, serão tratados e expostos todos os estados frustrados da cadeia na seguinte subseção.

4.2 Estado frustrado do modelo Ising

O estado frustrado da cadeia Cairo pentagonal de acoplamento Ising está presente no diagrama de fase do estado fundamental (figura 4) com autovalor dado em (24). A curiosidade de estudar este estado frustrado é porque sua entropia residual é dada por $S = 4\kappa_B \ln(2)$. Isto quer dizer que devem existir vários estados degenerados no sistema, assim sendo interessante estudar este estado frustrado.

Para se encontrar as possíveis configurações da fase frustrada é necessária a utilização de duas células unitárias (como comentado anteriormente). Desta forma são encontrados os seguinte estados frustrados:

$$|FRU\rangle = \begin{cases} \prod_{i=1}^{N/2} \{ |s_1^{s_1}\rangle |_{+}^{-} |_{s_2}^{-} | - + \rangle |_{s_3}^{s_3} |_{+}^{+} |_{s_4}^{+} | + - \rangle |_{-s_1}^{s_1} \rangle \}_i, & (29) \\ \prod_{i=1}^N \{ (|s\rangle |_{+}^{-} |_{-s}^{-s} |s-s\rangle |_{s}^s) , (|s\rangle |_{+}^{-} |_{s}^s |s-s\rangle |_{-s}^{-s}) \}_i, & (30) \\ \prod_{i=1}^N \{ (|^{-s}\rangle |_{+}^{-} |_{s}^{-s} |s-s\rangle |_{-s}^s) , (|^{-s}\rangle |_{+}^{-} |_{s}^{-s} |s-s\rangle |_{s}^{-s}) \}_i. & (31) \end{cases}$$

Convém entender aqui a peculiaridade destes três estados distintos, que não se misturam e que carregam a mesma informação macroscópica. O primeiro estado frustrado dado por (29) é escrito por quatro parâmetros (s_1, s_2, s_3 e s_4) que representam os spins-1/2 de Ising da cadeia Cairo pentagonal. Percebendo o grau de liberdade de cada spin, vê-se que o primeiro autovalor de frustração geométrica contém 2^4 estados degenerados (para duas células). Pensando em uma cadeia de N células, o número de possíveis estados degenerados para o primeiro autovetor será 2^{4N} .

Já os dois últimos estados de (30) e (31) carregam uma outra forma de degenerescência. Estes estados representam configurações que por cada célula unitária já correspondem ao estado frustrado. A degenerescência ocorrerá quando a rede pentagonal de N células permutar entre os dois possíveis estados. Assim, o número de possíveis estados degenerados são 2^N . Vale ressaltar que para o modelo Cairo pentagonal de acoplamento Ising-Heisenberg (que será vista na próxima seção), somente estas duas últimas equações serão encontradas no diagrama de fases.

Encontrados os possíveis estados degenerados da frustração geométrica do modelo Cairo pentagonal de acoplamento Ising, deve-se verificar para o limite de N células unitárias muito grande, como fica a entropia residual por célula unitária.

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{N} \kappa_B \ln(2^{4N} + 2^N + 2^N), \\ S &= \frac{1}{N} \kappa_B \ln(2^{4N}(1 + 2^{-3N})), \\ S &= \frac{1}{N} \kappa_B (\ln(2^{4N}) + \ln(1 + 2^{-3N})). \end{aligned} \quad (32)$$

Assim, encontra-se a seguinte entropia residual

$$S = 4\kappa_B \ln(2). \quad (33)$$

Desta forma, pode-se concluir que o primeiro estado frustrado (29) é predominante na rede de acoplamento Ising.

5 O modelo Cairo pentagonal Ising-Heisenberg

Usando como motivação os comentários na seção de introdução, será considerada aqui uma tira quase-unidimensional da rede Cairo pentagonal com plaqueta de dímero ortogonal com acoplamento Ising-Heisenberg, a qual se vê representada esquematicamente na figura 5.

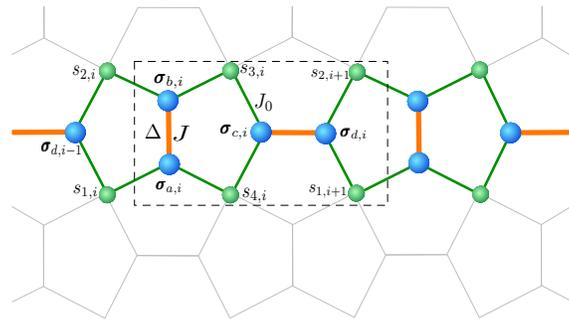


Figura 5 Esquema de uma cadeia Cairo pentagonal quase-unidimensional com acoplamento Ising-Heisenberg, sendo destacada em uma rede bidimensional.

A Hamiltoniana do sistema é dado por:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left(\mathcal{H}_i^{ab} + \mathcal{H}_{i,i+1}^{cd} \right), \quad (34)$$

onde:

$$\mathcal{H}_i^{ab} = -J(\sigma_{a,i}, \sigma_{b,i})_{\Delta} - J_0(s_{1,i} + s_{4,i})\sigma_{a,i}^z - J_0(s_{2,i} + s_{3,i})\sigma_{b,i}^z, \quad (35)$$

é a Hamiltoniana associada ao dímero ab , e

$$\mathcal{H}_{i,i+1}^{cd} = -J'(\sigma_{c,i}, \sigma_{d,i})_{\Delta'} - J_0(s_{3,i} + s_{4,i})\sigma_{c,i}^z - J_0(s_{1,i+1} + s_{2,i+1})\sigma_{d,i}^z, \quad (36)$$

é a Hamiltoniana associada ao dímero cd . Além disso:

$$J(\sigma_{a,i}, \sigma_{a,i})_{\Delta} \equiv J \left(\sigma_{a,i}^x \sigma_{b,i}^x + \sigma_{a,i}^y \sigma_{b,i}^y \right) + \Delta \left(\sigma_{a,i}^z \sigma_{b,i}^z \right), \quad (37)$$

$\sigma_{\gamma,i}^{\alpha}$ é o operador de spin (com $\alpha = x, y, z$) para partícula no sítio i e $\gamma = a, b, c, d$. Para detalhes, ver figura 5. O parâmetro de interação de acoplamento Ising é J_0 , J representa a interação de acoplamento Heisenberg e Δ é um termo anisotrópico para o acoplamento Heisenberg.

5.1 Equivalência entre os modelos

Usando a transformação decoração direta (ROJAS; SOUZA, 2011) para uma célula elementar ilustrada na figura 6 (lado esquerdo), pode-se mapear o dímero original ab ou cd em um diamante de spins-1/2 Ising misturados, envolvendo também um acoplamento de segundos vizinhos. Este diamante de sistema transformado está esquematicamente representado na figura 7.

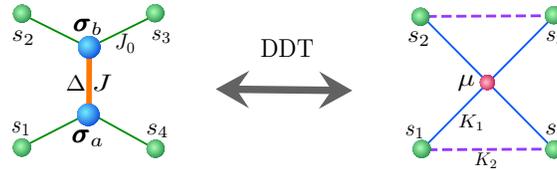


Figura 6 Transformação decoração direta (DDT) para o dímero ab em um diamante, o dímero cd pode ser obtido rodando ab em $\pi/2$.

O fator de Boltzmann para o modelo de rede transformada pode ser escrito como:

$$\tilde{w}(s_{1,i}, s_{2,i}, s_{3,i}, s_{4,i}) = \sum_{\mu} \left(e^{-\beta \tilde{H}_{i,i}^{ab}(\mu)} \right), \quad (38)$$

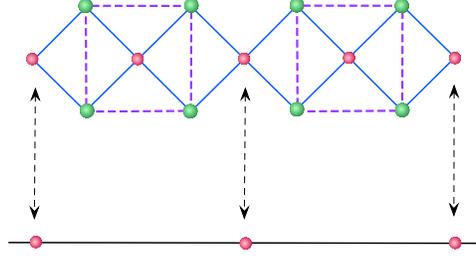


Figura 7 Tira pentagonal que pode ser mapeada para uma cadeia de diamante com acoplamento de segundos vizinhos, que por sua vez se torna uma cadeia de Ising simples com spin-1.

$$\tilde{w}(s_{1,i+1}, s_{4,i}, s_{3,i}, s_{2,i+1}) = \sum_{\bar{\mu}} \left(e^{-\beta \tilde{H}_{i,i+1}^{cd}(\bar{\mu})} \right), \quad (39)$$

onde $\beta = 1/\kappa_B T$, com κ_B sendo a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta, $\tilde{H}_{i,i}^{ab}$ e $\tilde{H}_{i,i+1}^{cd}$ são as Hamiltonianas dos diamantes associados aos dímeros ab e cd .

As Hamiltonianas (35) e (36) podem ser mapeadas em Hamiltonianas de Ising com spin $s = 1/2$ e $\mu(\bar{\mu}) = 1$ como ilustrado na figura 7. Essas Hamiltonianas podem ser escritas respectivamente como:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{i,i}^{ab}(\mu) &= K_0 + K_1 \mu (s_{1,i} + s_{2,i} + s_{3,i} + s_{4,i}) + \\ &+ K_2 (s_{1,i} s_{4,i} + s_{2,i} s_{3,i}) + K_3 \mu^2, \end{aligned} \quad (40)$$

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{i,i+1}^{cd}(\bar{\mu}) &= K_0 + K_1 \bar{\mu} (s_{1,i+1} + s_{2,i+1} + s_{3,i} + s_{4,i}) + \\ &+ K_2 (s_{1,i+1} s_{2,i+1} + s_{3,i} s_{4,i}) + K_3 \bar{\mu}^2, \end{aligned} \quad (41)$$

onde K_0, K_1, K_2 e K_3 são parâmetros para serem determinados como função dos parâmetros da Hamiltoniana da cadeia Cairo pentagonal, ou seja J_0, J e Δ .

Então, pode-se resolver este modelo efetivo para encontrar a função de

partição da rede Cairo pentagonal. Portanto, deve-se unicamente resolver uma matriz de transferência 3×3 (uma vez que $\mu(\bar{\mu}) = 1$).

5.2 Diagrama de fase

O diagrama de fase será estudado para temperatura zero. Desta forma, pretende-se entender quais são os tipos de estados fundamentais da cadeia Cairo-Pentagonal Ising-Heisenberg. Para tanto, serão introduzidas neste trabalho, algumas notações apropriadas ao modelo.

O estado fundamental para cada célula elementar pode ser escrita esquematicamente usando a simbólica notação:

$$\text{para o dímero } ab \quad \left| \begin{smallmatrix} s_2 \\ s_1 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} \curvearrowright \\ \curvearrowleft \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} s_3 \\ s_4 \end{smallmatrix} \right\rangle, \quad (42)$$

$$\text{para o dímero } cd \quad \left| \begin{smallmatrix} s_3 \\ s_4 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} \curvearrowright \\ \curvearrowleft \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} s_5 \\ s_6 \end{smallmatrix} \right\rangle, \quad (43)$$

onde s_i corresponde aos spins de configuração Ising, enquanto que os símbolos \curvearrowright e \curvearrowleft denotam quatro estados possíveis em função de s_i . Esta notação é usada por conveniência, com o objetivo de não confundir com a notação de spins das Hamiltonianas (35, 36). Então convenientemente, os autoestados para o dímero $\left| \begin{smallmatrix} s_2 \\ s_1 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} \curvearrowright \\ \curvearrowleft \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} s_3 \\ s_4 \end{smallmatrix} \right\rangle$ são expressos usando quatro representações simbólicas:

$$|\curvearrowright\rangle \equiv |+\rangle, \quad (44)$$

$$|\curvearrowleft\rangle \equiv \left(-\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)|\underline{+}\rangle + \cos\left(\frac{\phi}{2}\right)|\underline{-}\rangle \right), \quad (45)$$

$$|\curvearrowright\rangle \equiv \left(\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)|\underline{+}\rangle + \sin\left(\frac{\phi}{2}\right)|\underline{-}\rangle \right), \quad (46)$$

$$|\curvearrowleft\rangle \equiv |\underline{-}\rangle, \quad (47)$$

onde $\phi = \arctan\left(\frac{J}{J_0(s_1 - s_2 - s_3 + s_4)}\right)$, indo de $-\frac{\pi}{2} < \phi < \frac{\pi}{2}$.

O primeiro autoestado do dímero (44) é indicado por $|\varkappa\rangle$ correspondendo a $|\uparrow\rangle$ que é associado aos spins $\{s_1, s_2, s_3, s_4\}$. Similarmente, o autoestado (47) é denotado por $|\varkappa\rangle$, que representa o estado $|\downarrow\rangle$. Para a notação $|\varkappa\rangle$ (45), denota um tipo de estado "antissimétrico" para $\phi > 0$, e $|\varkappa\rangle$ representado em (46) denota um tipo de estado "simétrico" quando $\phi > 0$. Para $\phi < 0$, $|\varkappa\rangle$ é simétrico e $|\varkappa\rangle$ será antissimétrico

É importante mencionar que os vetores dos estados $|\varkappa\rangle$ e $|\varkappa\rangle$ não dependem dos spins Ising $\{s_1, s_2, s_3, s_4\}$, enquanto que os vetores dos estados $|\varkappa\rangle$ e $|\varkappa\rangle$ dependem de ϕ e conseqüentemente dos spins Ising $\{s_1, s_2, s_3, s_4\}$.

Para os correspondentes autovalores do dímero ab , tem-se:

$$\varkappa \mapsto \epsilon_1 = -\frac{\Delta}{4} + \frac{J_0}{2}(s_1 + s_4 + s_2 + s_3), \quad (48)$$

$$\varkappa \mapsto \epsilon_2 = \frac{\Delta}{4} + \frac{1}{2}\sqrt{J_0^2(s_1 + s_4 - s_2 - s_3)^2 + J^2}, \quad (49)$$

$$\varkappa \mapsto \epsilon_3 = \frac{\Delta}{4} - \frac{1}{2}\sqrt{J_0^2(s_1 + s_4 - s_2 - s_3)^2 + J^2}, \quad (50)$$

$$\varkappa \mapsto \epsilon_4 = -\frac{\Delta}{4} - \frac{J_0}{2}(s_1 + s_4 + s_2 + s_3). \quad (51)$$

Usando a notação do modelo de 8-vértices, encontrada nas referências (BAXTER, 1982; ROJAS; ROJAS; SOUZA, 2012; URUMOV, 2002), e a notação (simbólica) introduzida para os dímeros ab e cd , são definidos seis estados distintos, ligados explicitamente pelos spins Ising:

$$|u_1\rangle = |\uparrow\varkappa\uparrow\rangle, \quad |u_2\rangle = |\uparrow\varkappa\downarrow\rangle, \quad |u_3\rangle = |\downarrow\varkappa\downarrow\rangle, \quad (52)$$

$$|u_4\rangle = |\uparrow\varkappa\downarrow\rangle, \quad |u_5\rangle = |\downarrow\varkappa\uparrow\rangle, \quad |u_7\rangle = |\downarrow\varkappa\uparrow\rangle. \quad (53)$$

A razão da escolha desta notação simbólica pode ser mais evidente quando forem expostos os autoestados das energias do diagrama de fase para a cadeia Cairo pentagonal Ising-Heisenberg.

Usando a simetria vertical e a simetria de inversão de spins, é possível escrever todos os 16 possíveis estados. Interpretando ε_i como sendo os possíveis valores dos autovetores das células elementares (52) e (53), foram verificadas as seguintes propriedades $\varepsilon_2 = \varepsilon_4$ e $\varepsilon_5 = \varepsilon_6 = \varepsilon_7 = \varepsilon_8$. Deve-se perceber que cada autovetor $|u_i\rangle$ representa simbolicamente os quatro estados escritos em (44-47).

Analogamente, pode-se obter o estado correspondente rotacionado $|_{s_4' \sim s_6'}^{s_3 \sim s_5}\rangle$, pela mesma relação das equações (48-51), os autovalores são expressos substituindo apenas $J \rightarrow J'$, $\Delta \rightarrow \Delta'$ e $\{s_1, s_2, s_3, s_4\} \rightarrow \{s_6, s_4, s_3, s_5\}$. Então, os autovalores serão:

$$|\times\rangle \mapsto \epsilon'_1 = -\frac{\Delta'}{4} + \frac{J_0}{2}(s_6 + s_5 + s_4 + s_3), \quad (54)$$

$$|\times\rangle \mapsto \epsilon'_2 = \frac{\Delta'}{4} + \frac{1}{2}\sqrt{J_0^2(s_6 + s_5 - s_4 - s_3)^2 + J'^2}, \quad (55)$$

$$|\times\rangle \mapsto \epsilon'_3 = \frac{\Delta'}{4} - \frac{1}{2}\sqrt{J_0^2(s_6 + s_5 - s_4 - s_3)^2 + J'^2}, \quad (56)$$

$$|\times\rangle \mapsto \epsilon'_4 = -\frac{\Delta'}{4} - \frac{J_0}{2}(s_6 + s_5 + s_4 + s_3). \quad (57)$$

Substituindo $\phi \rightarrow \phi'$, os autoestados correspondentes são escritos como:

$$|\times\rangle = |++\rangle, \quad (58)$$

$$|\times\rangle = (-\sin(\frac{\phi'}{2})|+-\rangle + \cos(\frac{\phi'}{2})|-+\rangle), \quad (59)$$

$$|\times\rangle = (\cos(\frac{\phi'}{2})|+-\rangle + \sin(\frac{\phi'}{2})|-+\rangle), \quad (60)$$

$$|\times\rangle = |--\rangle, \quad (61)$$

onde $\phi' = \arctan\left(\frac{J'}{J_0(s_6+s_5-s_4-s_3)}\right)$, com $-\frac{\pi}{2} < \phi' < \frac{\pi}{2}$. Similarmente, o estado elementar correspondente $|u_j\rangle \rightarrow |\bar{u}_j\rangle$ pode gerar todos os 16 estados. Então, o primeiro estado rotacionado será $|\bar{u}_1\rangle = |+\rangle\langle+\rangle$, desta mesma forma os outros estados serão obtidos.

Em adição a cada célula elementar que foi definida, agora serão construídos os estados da célula unitária como $|u_j\rangle \otimes |\bar{u}_k\rangle$. Mais uma vez, será usada a notação do modelo de 8-vértices (BAXTER, 1982; ROJAS; ROJAS; SOUZA, 2012; URUMOV, 2002) para simplificar os autoestados da célula unitária,

$$|v_i\rangle = |_{s_1}^{s_2} \text{---} s_3 \text{---} s_4 \text{---} s_1' \rangle. \quad (62)$$

Torna-se útil aqui a notação simbólica, pois relata com fidelidade a estrutura de uma célula unitária do modelo. O estados da célula unitária $|v_i\rangle$ estão intimamente relacionados com a notação do modelo de 8-vértices para os spins Ising $\{s_1, s_2, s_2', s_1'\}$, onde novamente os spins Ising s_1' e s_2' são escritos por conveniência. Então, a equação (62) pode ser denotada como:

$$\begin{aligned} |v_1\rangle &= |_{+}^{+} \text{---} s_3 \text{---} \langle+\rangle, & |v_2\rangle &= |_{+}^{-} \text{---} s_3 \text{---} \langle-\rangle, \\ |v_3\rangle &= |_{+}^{-} \text{---} s_3 \text{---} \langle+\rangle, & |v_4\rangle &= |_{+}^{+} \text{---} s_3 \text{---} \langle-\rangle, \\ |v_5\rangle &= |_{+}^{-} \text{---} s_3 \text{---} \langle+\rangle, & |v_6\rangle &= |_{+}^{+} \text{---} s_3 \text{---} \langle-\rangle. \end{aligned} \quad (63)$$

Convém mencionar que a convenção feita para a célula unitária permite expressar os autoestados da energia. Isto significa que a borda de uma célula unitária sempre estará conectada com o spin equivalente da célula unitária vizinha mais próxima. Assim, para satisfazer as partículas de spin de cada célula unitária, os spins de Ising mais a esquerda com os spins Ising da direita são compartilha-

dos por duas células unitárias. Então, estas partículas contribuem com a metade de "partículas" para cada célula unitária, conforme é representado pela notação simbólica.

Certamente, cada estado $|v_i\rangle$ denota simbolicamente $4 \times 4 \times 4 = 64$ possíveis estados de (63). Todas as outras configurações podem ser obtidas usando a simetria horizontal e a simetria de inversão de spins. No entanto, deve-se ter cuidado sobre a simetria de rotação e a simetria de vertical pois elas não são permitidas para a cadeia estudada, pois $|\uparrow \uparrow\rangle \neq |\uparrow \downarrow\rangle$. Isto significa que a simetria quiral local quebra a estrutura da célula unitária, enquanto que a simetria quiral global é invariante. Usando os resultados anteriores pode-se estudar o diagrama de fase para a energia de estado fundamental da cadeia Cairo pentagonal por célula unitária. Assim, tem-se:

$$E_{FM} = -2J_0 - \frac{\Delta}{2}, \quad (64)$$

$$E_{AFM} = J_0 - \frac{1}{2}\sqrt{J^2 + 4J_0^2}, \quad (65)$$

$$E_{PAF} = -J_0 - \frac{1}{2}\sqrt{J^2 + 4J_0^2}, \quad (66)$$

$$E_{DAF} = 2J_0 - \frac{\Delta}{2}, \quad (67)$$

$$E_{FRU} = \frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{2}|J| - \frac{1}{2}\sqrt{J^2 + 4J_0^2}. \quad (68)$$

Agora serão expressos os correspondentes autovetores associados aos autovalores (64-68) de energia fundamental. Por simplicidade, serão considerados $J' = J$ e $\Delta' = \Delta$. Então, o sistema exibirá cinco estados, que são dados por:

$\Delta = -2J_0 + \sqrt{4J_0^2 + 1}$, analogamente a interface entre PAF e FRU é descrita por $\Delta = 1 - 2J_0$, similarmente a fronteira entre DAF e AFM é limitada pela curva $\Delta = 2J_0 + \sqrt{4J_0^2 + 1}$, enquanto que a fronteira entre AFM e FRU é descrita por $\Delta = 1 + 2J_0$. Na figura 8b é retratado o diagrama de fase Δ por J , onde o parâmetro fixado desta vez é $J_0 = 1$. São ilustradas mais uma vez, as fases apresentadas anteriormente na figura 8a, sendo que a fronteira entre FM e PAF(AF) é descrita pela curva $\Delta = 2 + \sqrt{4 + J^2}$, e similarmente a interface entre PAF(AF) e FRU é dada por $\Delta = -2|J|$. É bom mencionar que a curva ao redor da região de frustração é uma curva degenerada, com entropia residual $S = k_B \ln(3)/2$, enquanto que a curva que delimita a fronteira entre FM e PAF(AF) tem uma entropia residual $S = k_B \ln(2)/2$.

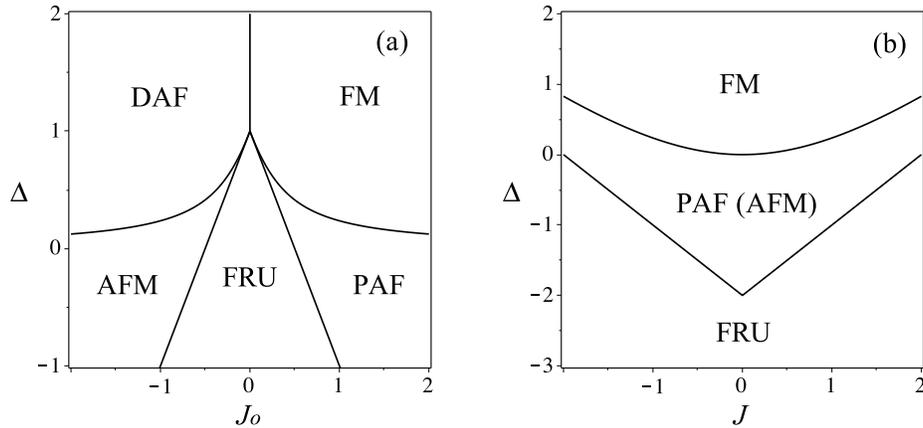


Figura 8 Diagrama de Fase para o estado fundamental. (a) Variando $\Delta \times J_0$, fixando $J = 1.0$. (b) Variando $\Delta \times J$, fixando $J_0 = 1.0$.

Em contraste com a referência (ROJAS; ROJAS; SOUZA, 2012), que é um modelo de duas dimensões Cairo pentagonal Ising. Neste modelo quase-unidimensional não há um estado ferrimagnético. Isto se deve pois à fase DAF é responsável por gerar a fase ferrimagnética para uma rede em duas dimensões;

isto é fácil de perceber uma vez que os spins em cima e abaixo serão compartilhados com duas células unitárias. Assim, tem-se uma magnetização diferente de zero por célula unitária, desta forma gera-se a fase ferrimagnética em duas dimensões. Porém, a fase AFM não será equivalente entre as células unitárias, assim como as propriedades de PAF para a rede em duas dimensões. Portanto, as fases AFM e PAF somente emergem em uma cadeia pentagonal uni-dimensional.

Observando a cadeia Cairo pentagonal como uma cadeia de dímero ortogonal como nas referências (PAULINELLI; SOUZA; ROJAS, 2013; VERKHOLYAK; STREKA, 2013), os spins de Ising podem ser considerados como spins decorados. Pode-se comparar a figura 8 com a figura 3 da referência (PAULINELLI; SOUZA; ROJAS, 2013). Observa-se, neste caso, um pouco de semelhança principalmente nas fronteiras das fases. Embora exista uma diferença, a cadeia dímero ortogonal não tem uma região de fase frustrada (PAULINELLI; SOUZA; ROJAS, 2013).

5.3 A termodinâmica do modelo

A Hamiltoniana da cadeia Cairo pentagonal Ising-Heisenberg será solucionada usando a abordagem de matriz de transferência 4×4 (BAXTER, 1982). Para isso também será usada a notação do modelo de 8-vértices para simplificar o resultado.

O fator de Boltzmann da célula elementar para o dímero ab é dado por:

$$w(s_{1,i}, s_{2,i}, s_{3,i}, s_{4,i}) = \text{tr}_{ab}(\mathbf{e}^{-\beta \mathcal{H}_i^{ab}}), \quad (74)$$

enquanto que para a célula elementar cd :

$$\tilde{w}(s_{1,i+1}, s_{4,i}, s_{3,i}, s_{2,i+1}) = \text{tr}_{cd}(\mathbf{e}^{-\beta \mathcal{H}_{i,i+1}^{cd}}). \quad (75)$$

A melhor forma de calcular o traço da matriz é diagonalizando a matriz Hamiltoniana em partes, mais precisamente pelos dímeros ab e cd já supracitados (ab e cd).

O fator de Boltzmann para a célula elementar ab pode ser expresso usando a notação do modelo de 8-vértices em (BAXTER, 1982), como usado para modelos de rede bidimensional em (ROJAS; ROJAS; SOUZA, 2012; URUMOV, 2002). Portanto, para célula elementar ab tem-se:

$$\omega_1 = \mathbf{w}(+, +, +, +) = z(x^4 + x^{-4}) + \frac{y^2 + y^{-2}}{z}, \quad (76)$$

$$\omega_2 = \mathbf{w}(+, -, +, -) = 2z + \frac{y^2 + y^{-2}}{z}, \quad (77)$$

$$\omega_3 = \mathbf{w}(+, +, -, -) = \omega_2, \quad (78)$$

$$\omega_4 = \mathbf{w}(+, -, -, +) = 2z + \frac{y_2^2 + y_2^{-2}}{z}, \quad (79)$$

$$\omega_5 = \mathbf{w}(+, +, +, -) = z(x^2 + x^{-2}) + \frac{y_1^2 + y_1^{-2}}{z}, \quad (80)$$

$$\omega_6 = \mathbf{w}(+, +, -, +) = \omega_5, \quad (81)$$

$$\omega_7 = \mathbf{w}(+, -, +, +) = \omega_5, \quad (82)$$

$$\omega_8 = \mathbf{w}(-, +, +, +) = \omega_5, \quad (83)$$

onde $x = e^{\beta J_0/4}$, $y = e^{\beta J/4}$, $z = e^{\beta \Delta/4}$, $y_1 = e^{\beta \sqrt{J^2 + J_0^2}/4}$ e $y_2 = e^{\beta \sqrt{J^2 + 4J_0^2}/4}$ para simplificar a notação.

Analogamente, a célula elementar cd terá uma notação similar, portanto o fator de Boltzmann dado em (75) fica:

$$\tilde{\omega}_1 = \tilde{w}(+, +, +, +) = z'(x^4 + x^{-4}) + \frac{y'^2 + y'^{-2}}{z'}, \quad (84)$$

$$\tilde{\omega}_2 = \tilde{w}(+, -, +, -) = 2z' + \frac{y'^2 + y'^{-2}}{z'}, \quad (85)$$

$$\tilde{\omega}_3 = \tilde{w}(+, +, -, -) = \omega_2, \quad (86)$$

$$\tilde{\omega}_4 = \tilde{w}(+, -, -, +) = 2z' + \frac{y_2'^2 + y_2'^{-2}}{z'}, \quad (87)$$

$$\tilde{\omega}_5 = \tilde{w}(+, +, +, -) = z'(x^2 + x^{-2}) + \frac{y_1'^2 + y_1'^{-2}}{z'}, \quad (88)$$

$$\tilde{\omega}_6 = \tilde{w}(+, +, -, +) = \tilde{\omega}_5, \quad (89)$$

$$\tilde{\omega}_7 = \tilde{w}(+, -, +, +) = \tilde{\omega}_5, \quad (90)$$

$$\tilde{\omega}_8 = \tilde{w}(-, +, +, +) = \tilde{\omega}_5, \quad (91)$$

onde $y' = e^{\beta J'/4}$, $z' = e^{\beta \Delta'/4}$, $y_1' = e^{\beta \sqrt{J'^2 + J_0'^2}/4}$ e por último $y_2' = e^{\beta \sqrt{J'^2 + 4J_0'^2}/4}$.
 Similarmente para o dímero ab , tem-se as seguintes relações: $\tilde{\omega}_1 = \tilde{\omega}_2$ e $\tilde{\omega}_5 = \tilde{\omega}_6 = \tilde{\omega}_7 = \tilde{\omega}_8$.

Para estudar a termodinâmica da cadeia Cairo pentagonal Ising-Heisenberg, deve-se perceber que cada célula unitária da rede comuta entre si, então a função de partição pode ser escrita como um produto de cada célula,

$$\mathcal{Z} = \text{tr} \left(\prod_{i=1}^N e^{-\beta(\mathcal{H}_i^{ab} + \mathcal{H}_{i,i+1}^{cd})} \right). \quad (92)$$

Portanto, a função de partição (92) pode ser resolvida usando o método de matriz de transferência:

$$\mathbb{T}(s_1, s_2, s'_1, s'_2) = \sum_{s_3, s_4} w(s_1, s_2, s_3, s_4) \tilde{w}(s'_1, s_4, s_3, s'_2), \quad (93)$$

explicitamente, as matrizes \mathbf{w} e $\tilde{\mathbf{w}}$ são:

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} \omega_1 & \omega_5 & \omega_5 & \omega_3 \\ \omega_5 & \omega_4 & \omega_2 & \omega_5 \\ \omega_5 & \omega_2 & \omega_4 & \omega_5 \\ \omega_3 & \omega_5 & \omega_5 & \omega_1 \end{bmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{w}} = \begin{bmatrix} \tilde{\omega}_1 & \tilde{\omega}_5 & \tilde{\omega}_5 & \tilde{\omega}_4 \\ \tilde{\omega}_5 & \tilde{\omega}_2 & \tilde{\omega}_3 & \tilde{\omega}_5 \\ \tilde{\omega}_5 & \tilde{\omega}_3 & \tilde{\omega}_2 & \tilde{\omega}_5 \\ \tilde{\omega}_4 & \tilde{\omega}_5 & \tilde{\omega}_5 & \tilde{\omega}_1 \end{bmatrix}. \quad (94)$$

Deve-se perceber que as matrizes \mathbf{w} e $\tilde{\mathbf{w}}$ são totalmente simétricas. Logo, a matriz de transferência \mathbf{T} fica:

$$\mathbf{T} = \mathbf{w}\tilde{\mathbf{w}} = \begin{bmatrix} \tau_1 & \tau_5 & \tau_5 & \tau_4 \\ \tau_7 & \tau_2 & \tau_3 & \tau_7 \\ \tau_7 & \tau_3 & \tau_2 & \tau_7 \\ \tau_4 & \tau_7 & \tau_7 & \tau_1 \end{bmatrix}, \quad (95)$$

onde τ_i é escrito de forma similar ao modelo de 8-vértices nas referências (ROJAS; ROJAS; SOUZA, 2012; URUMOV, 2002). Então τ_i é expresso como:

$$\tau_1 = \omega_1\tilde{\omega}_1 + \omega_3\tilde{\omega}_4 + 2\omega_5\tilde{\omega}_5, \quad (96)$$

$$\tau_2 = \omega_2\tilde{\omega}_3 + \omega_4\tilde{\omega}_2 + 2\omega_5\tilde{\omega}_5, \quad (97)$$

$$\tau_3 = \omega_2\tilde{\omega}_2 + \omega_4\tilde{\omega}_3 + 2\omega_5\tilde{\omega}_5, \quad (98)$$

$$\tau_4 = \omega_1\tilde{\omega}_4 + \omega_3\tilde{\omega}_1 + 2\omega_5\tilde{\omega}_5, \quad (99)$$

$$\tau_5 = (\omega_1 + \omega_4)\tilde{\omega}_5 + (\tilde{\omega}_1 + \tilde{\omega}_4)\omega_5, \quad (100)$$

$$\tau_7 = (\omega_1 + \omega_3)\tilde{\omega}_5 + (\tilde{\omega}_2 + \tilde{\omega}_3)\omega_5, \quad (101)$$

$$(102)$$

verifica-se que $\tau_3 = \tau_2$, $\tau_5 = \tau_6$ e $\tau_7 = \tau_8$.

A matriz de transferência \mathbf{T} não é simétrica, pois $\tau_5 \neq \tau_7$, embora w e \tilde{w} sejam perfeitamente simétricos.

Usando o método de matriz de transferência, a função de partição (92) é escrita como:

$$\mathcal{Z} = \text{tr} \left[(\mathbf{W}\tilde{\mathbf{W}})^N \right] = \text{tr} \left[\mathbf{T}^N \right]. \quad (103)$$

Os autovalores da matriz de transferência podem ser obtidos pelo determinante $\det(\mathbf{T} - \lambda) = 0$, que resulta em

$$(\lambda^2 - a_1\lambda + a_0)(\lambda - \tau_2 + \tau_3)(\lambda - \tau_1 + \tau_4) = 0, \quad (104)$$

onde os coeficientes da parte quadrática da equação são dados por:

$$a_1 = (\tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4), \quad (105)$$

$$a_0 = (\tau_1 + \tau_4)(\tau_2 + \tau_3) - 4\tau_5\tau_7. \quad (106)$$

$$(107)$$

Consequentemente, os autovalores da matriz de transferência podem ser expressos como:

$$\lambda_0 = \tau_2 - \tau_3, \quad (108)$$

$$\lambda_1 = \tau_1 - \tau_4, \quad (109)$$

$$\lambda_+ = \frac{\tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4}{2} + \frac{\sqrt{(\tau_1 - \tau_2 - \tau_3 + \tau_4)^2 + 16\tau_5\tau_7}}{2}, \quad (110)$$

$$\lambda_- = \frac{\tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4}{2} - \frac{\sqrt{(\tau_1 - \tau_2 - \tau_3 + \tau_4)^2 + 16\tau_5\tau_7}}{2}. \quad (111)$$

Embora a matriz de transferência \mathbf{T} não seja simétrica, pode-se observar que todos os autovalores são obviamente números reais. Assim, pode-se indentificar rapidamente que existe somente um único maior autovalor positivo, definido como λ_+ , pois todos τ_i são positivos e números reais como nas equações (96-101).

A matriz de transferência 4×4 pode ser também reduzida em uma matriz de transferência 3×3 , pois $\tau_3 = \tau_2$. Isto significa que a cadeia equivalente mapeada também levará toda a informação da cadeia da rede pentagonal.

No limite termodinâmico, a energia livre por célula unitária é dada pelo maior autovalor da matriz de transferência, neste caso encontra-se:

$$f = -\frac{1}{2\beta} \ln(\lambda_+), \quad (112)$$

usando o resultado da energia livre, podem ser obtidas as demais quantidades termodinâmicas.

5.4 Quantidades físicas

Será discutida aqui a entropia ($S = -\frac{\partial f}{\partial T}$) da cadeia Cairo pentagonal Ising-Heisenberg. Serão ilustradas regiões onde o modelo exibe um setor de frustração bem como diferentes fases antiferromagnéticas encontradas e discutidas em

seções anteriores.

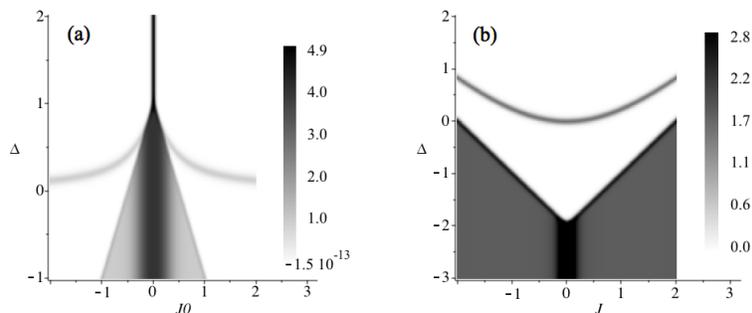


Figura 9 Gráficos da densidade da entropia para uma temperatura fixa $T = 0.01$. (a) A entropia como função de J_0 e Δ , fixando $J = 1.0$. Em (b) tem-se a entropia em função dos acoplamentos J e Δ , fixando $J_0 = 1.0$.

Na figura 9a, é ilustrada a densidade da entropia como uma função de Δ e J_0 para o parâmetro fixo $J = 1$ e no limite de baixa temperatura $T = 0.01$; as regiões escuras denotam uma alta entropia. É fácil perceber que a figura de densidade de entropia é muito semelhante com à figura do diagrama de fase do modelo, pode-se perceber ainda que cada fase fundamental das figuras 8a e 8b corresponde a sua respectiva região nas figuras 9a e 9b

É verificado que a região de frustração (FRU) tem entropia residual $S = k_B \ln(2)/2$, e na fronteira desta região tem-se uma frustração com entropia residual de $S = k_B \ln(3)/2$, ainda há uma curva com frustração na interface de FM e DAF (PAF e AFM), ambos com entropia residual de $S = k_B \ln(2)/2$. As regiões mais escurecidas da figura correspondem a $J_0 \cong 0$, isto quer dizer que não há uma ligação entre os spins de Ising s_α com os dímeros ab e cd . Desta forma, encontra-se uma fase de frustração trivial.

Similarmente, na figura 9b tem-se a ilustração da densidade de entropia para os acoplamentos J e Δ , no limite de temperatura baixa $T = 0.01$ e fixando o parâmetro $J_0 = 1$. A figura mostra novamente a presença de regiões frustradas no

modelo.

Na figura 9b, a região mais escurecida existe quando $J \cong 0$; neste caso, a cadeia Cairo pentagonal é reduzida a uma cadeia com acoplamentos Ising somente com entropia residual $S = k_B \ln(2)$. Nesta região tem-se uma frustração equivalente à obtida na referência (ROJAS; ROJAS; SOUZA, 2012), onde há um fator $1/2$. Isto se deve ao fato de que na rede Cairo pentagonal em duas dimensões a célula elementar é a própria célula unitária, porém para o modelo estudado aqui, uma célula unitária é composta de duas células elementares.

Na figura 10a, foram fixados os parâmetros de acoplamento $\Delta = -1.5$ e $J_0 = 1$, enquanto que o acoplamento J foi analisado para $J = \{0.45, 0.48, 0.5, 0.53, 0.55\}$. Usando a escala logarítmica para mostrar o comportamento do sistema em baixa temperatura perto das transições de fase, tem-se a intenção de mostrar a influência da baixa temperatura, devido à transição de fase em temperatura zero na fase de frustração.

Na figura 10b, é discutida também outra interessante quantidade termodinâmica chamada de calor específico ($C = -T\partial^2 f/\partial T^2$). São ilustrados valores do calor específico para os mesmos valores da figura 10a e também em escala logarítmica. Vê-se uma anomalia de dois picos de calor específico na região de baixa temperatura, isto se deve à transição de fase no limite de temperatura zero entre as fases $AFM \leftrightarrow$ fase de interface, e a fase de interface $\leftrightarrow FRU$ resultando assim em dois picos anômalos. O primeiro pico ocorre quando $T < 0.01$, é fácil perceber que nesta região existem variados picos de calor específico conforme o valor de acoplamento J , enquanto que o começo do segundo pico é localizado grosseiramente em $T \lesssim 0.35$ e o pico em $T \approx 0.4$ que corresponde a um pico de calor específico padrão.

Estes dois picos anômalos foram discutidos em Karlová, Strecka e Mada-

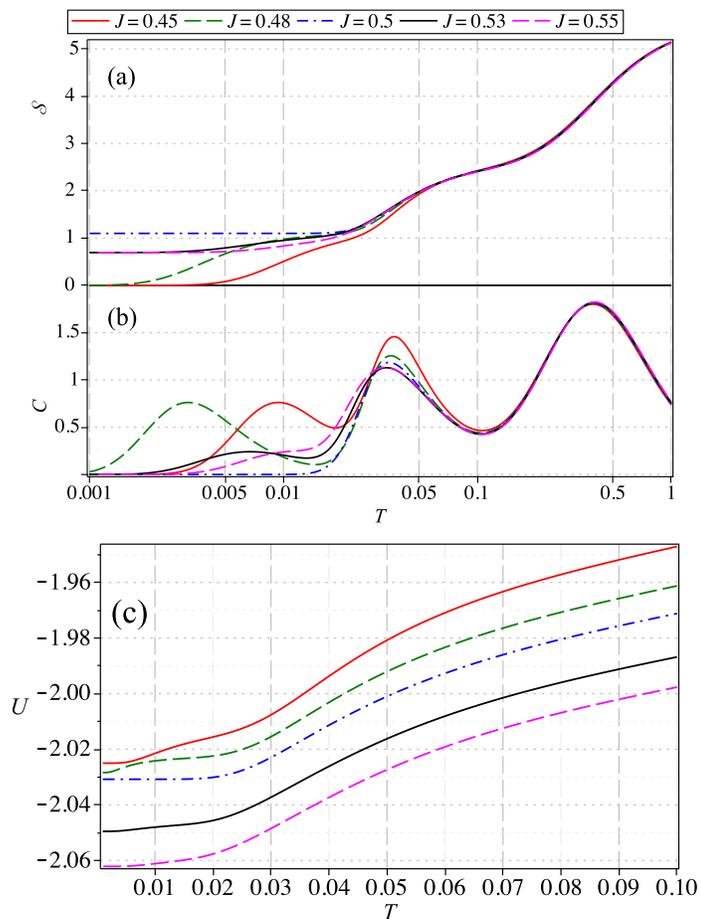


Figura 10 (a) Entropia em função da temperatura para os parâmetros fixos $\Delta = -1.5$, $J_0 = 1$ e $J = \{0.45, 0.48, 0.5, 0.53, 0.55\}$. A temperatura está em escala logarítmica. (b) Calor específico em função da temperatura para os mesmos parâmetros fixados em (a). (c) Energia interna em função da temperatura, também para os mesmos parâmetros fixados em (a), porém a temperatura está disposta em escala linear.

ras (2016) para poliedros regulares (tetraedro, octaedro, cubo, icosaedro, dodecaedro) de acoplamento Ising. A técnica denominada "Schottky theory" evidencia a degenerescência da rede na transição de fase da rede entre dois estados distintos. Por analogia será empregada a mesma visão desta técnica com os picos anômalos

de calor específico. Mais precisamente, vê-se que na região de primeiro pico de calor específico, cada curva de valor J distinto varia. Somente quando a curva tem valor de $J = 0.5$ é que não existe um pico de calor específico.

Quando $J < 0.5$ o pico de calor específico se propaga com cada vez menos temperatura, ou seja: Para $J = 0.45$ o pico fica em torno de $T \approx 0.01$, mas quando $J = 0.48$ o pico vai para $T \approx 0.003$. Para os valores de $J > 0.5$ tem-se que para $J = 0.53$ o pico fica em torno de $T \approx 0.006$, enquanto que para $J = 0.55$ o pico de calor específico fica em torno de $T \approx 0.01$. Desta forma, observa-se qualitativamente em comparação com Karlová, Strecka e Madaras (2016), uma degenerescência na transição de fase dos estados AFM e FRU.

Na figura 10c, são encontradas várias curvas para a energia interna ($U = f + TS$) para as mesmas faixas de parâmetros considerados na figura 10a, mas agora é usada uma escala linear para temperatura. Isto para mostrar o comportamento da energia interna na região de baixa temperatura, para comparar com os picos de calor específico, uma vez que $C = \partial U / \partial T$ relaciona as duas quantidades.

6 Conclusão

Para este trabalho, a cadeia Cairo pentagonal foi motivada por recentes descobertas, tais como a rede Fe^{3+} em $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ e a estrutura de ferro Cairo pentagonal oxifluoreto $\text{Bi}_4\text{Fe}_5\text{O}_{13}\text{F}$. Desta forma, foi proposto aqui um arranjo quase bidimensional de uma estrutura Cairo pentagonal com acoplamentos Ising-Heisenberg.

Foram discutidas transições de fase para temperatura zero sendo ilustradas cinco fases: uma fase ferromagnética, uma fase dímero antiferromagnético, uma fase de plaqueta antiferromagnética, uma fase típica antiferromagnética e uma fase peculiar de frustração geométrica. Na fase de frustração coexistem dois tipos de estados frustrados que não se misturam.

Foi relatado também que para a rede bidimensional, a fase DAF é transformada em uma fase ferrimagnética. Isto se deve ao compartilhamento de spins entre células unitárias. Já as fases AFM e PAF não aparecem para cadeias Cairo pentagonais bidimensionais, pois os spins entre as células unitárias se tornam incompatíveis.

Para resolver o modelo proposto, foi utilizada a abordagem matriz de transferência e por conseguinte o modelo de oito vértices para determinar a função de partição do sistema. De posse dos resultados, foram discutidos a entropia e o calor específico dependentes da temperatura.

Foram encontrados comportamentos não usuais para o limite de baixa temperatura: entropia residual e dois picos de calor específico, devido à existência (muito próxima) de três estados distintos na transição de fase. Sendo que dois estados são de frustração geométrica. Assim, a excitação térmica para baixas amplitudes de energia origina dois picos de calor específico anômalos.

REFERÊNCIAS

ABAKUMOV, A. M. et al. Frustrated pentagonal Cairo lattice in the non-collinear antiferromagnet $\text{Bi}_4\text{Fe}_5\text{O}_{13}\text{F}$. **Physical Review B**, New York, v. 87, n. 2, p. 024423, Jan. 2013.

BAXTER R. J. **Exactly solved models in statistical mechanics**. New York: Academic Press, 1982. 512 p.

BRAMWELL, S. T.; GINGRAS, M. J. P. Spin ice state in frustrated magnetic pyrochlore materials. **Science**, London, v. 294, n. 5546, p. 1495-1501, Nov. 2001.

BRAZ, F. F. et al. Quantum decoration transformation for spin models. **Annals of Physics**, New York, v. 372, p. 523, Sept. 2016.

CHAINANI, A.; SHESHADRI, K. Frustration effects and role of selective exchange coupling for magnetic ordering in the Cairo pentagonal lattice. **Cornell University Library**, New York, Dec. 2014.

DIEP, H. T. **Frustrated Spin Systems**. Hackensack: World Scientific, 2004. 599 p.

FISHER, M. E. Transformations of Ising models. **Physical Review**, New York, v. 113, n. 4, p. 969, May 1959.

ISODA, M.; NAKANO, H.; SAKAI, T. Frustration-induced magnetic properties of the spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on the Cairo pentagon lattice. **Journal of the Physical Society of Japan**, Tokyo, v. 83, n. 8, p. 1-7, 2014.

IVANOV, N. B.; RICHTER, J. Competition between plaquette and dimer phases in Heisenberg chains. **Physics Letters A**, Amsterdam, v. 232, n. 308, p. 308-312, July 1997.

KARLOVÁ, K.; STRECKA, J.; MADARAS, T. The Schottky-type specific heat as an indicator of relative degeneracy between ground and first-excited states:

The case study of regular Ising polyhedra. **Physica B: condensed matter**, Amsterdam, v. 488, p. 49-56, May 2016.

KITTEL, C. **Introduction to solid state physics**: volume 1. New York: Wiley & Sons, 2005. 704 p.

MA, Y. et al. Room temperature quantum spin Hall states in two-dimensional crystals composed of pentagonal rings and their quantum wells. **NPG Asia Materials**, London, v. 8, n. 4, p. e264, Feb. 2016.

NAKANO, H.; ISODA, M.; SAKAI, T. Magnetization process of the $S = 1/2$ Heisenberg antiferromagnet on the Cairo pentagon lattice. **Journal of the Physical Society of Japan**, Tokyo, v. 83, n. 5, p. 1-5, 2014.

NUSSENZVEIG, H. M. **Curso de física básica 2**. volume 2. 4. ed. São Paulo: E. Blucher, 2002. 314 p.

PAULINELLI, H. G.; SOUZA, S. M. de; ROJAS, O. Thermal entanglement in an orthogonal dimer-plaquette chain with alternating Ising-Heisenberg coupling. **Journal of Physics: condensed matter**, Bristol, v. 25, n. 30, p. 1-7, July 2013.

PAULING, L. The structure and entropy of ice and of other crystals with some randomness of atomic arrangement. **Journal of the American Chemical Society**, New York, v. 57, n. 12, p. 2680-2684, 1935.

PCHELKINA, Z. V.; STRELTSOV, S. V. Ab initio investigation of the exchange interactions in $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$: The Cairo pentagonal lattice compound. **Physical Review B**, Amsterdam, v. 88, n. 5, p. 1-6, 2013.

RALKO, A. Phase diagram of the Cairo pentagonal X X Z spin-1/2 magnet under a magnetic field. **Physical Review B**, Amsterdam, v. 84, n. 18, p. 184434, Nov. 2011.

REIF, F. **Fundamentals of statistical and thermal physics**. New York: Waveland Press, 2009. 651 p.

RESSOUCHE, E. et al. Magnetic frustration in an iron-based Cairo pentagonal lattice. **Physical Review Letters**, New York, v. 103, n. 26, p. 267204, Jan. 2009.

ROJAS, M.; ROJAS, O.; SOUZA, M. S de. Frustrated Ising model on the Cairo pentagonal lattice. **Physical Review E**, New York, v. 86, n. 5, p. 1-12, Nov. 2012.

ROJAS, O.; SOUZA, S. M. de. Direct algebraic mapping transformation for decorated spin models. **Journal of Physics A: mathematical and theoretical**, Bristol, v. 44, n. 24, p. 245001, May 2011.

ROUSOCHATZAKIS, I.; LÄUCHLI, A. M.; MOESSNER, R. Quantum magnetism on the Cairo pentagonal lattice. **Physical Review B**, Amsterdam, v. 85, n. 10, p. 104415, Jan. 2012.

ROZOVA, M. G. et al. Synthesis, structure and magnetic ordering of the mullite-type $\text{Bi}_2\text{Fe}_{4-x}\text{Cr}_x\text{O}_9$ solid solutions with a frustrated pentagonal Cairo lattice. **Dalton Transactions**, Cambridge, v. 45, n. 3, p. 1192-1200, Jan. 2016.

SALINAS, R. A. S. **Introdução a física estatística**. 3. ed. São Paulo: Edusp, 2013. 464 p.

SHASTRY, B. S.; SUTHERLAND, B. Exact ground state of a quantum mechanical antiferromagnet. **Physica B+ C**, Amsterdam, v. 108, n. 1/3, p. 1069-1070, Aug./Sept. 1981.

SYOZI, I. **Phase transitions and critical phenomena**: volume 1. New York: Academic Press, 1972. 320 p.

URUMOV, V. Exact solution of the Ising model in a pentagonal lattice. **Journal of Physics A: mathematical and general**, Bristol v. 35, n. 34, p. 7317, Aug. 2002.

VERKHOLYAK, T.; STREKA, J. Exact solution for a quantum spin-1/2 Ising-Heisenberg orthogonal-dimer chain with Heisenberg intradimer and Ising interdimer interactions. **Physical Review B**, Amsterdam, v. 88, n. 13, p. 134419, Oct 2013.

ZHANG, S. et al. Penta-graphene: A new carbon allotrope. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, Allahabad, v. 112, n. 8, p. 2372-2377, 2015.