

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS - CAMPUS A. C. SIMÕES
FÍSICA BACHARELADO

ELOÍSA GABRYELA DE SOUZA NICÁCIO

**EFEITO MAGNETOCALÓRICO EM UMA CADEIA DUPLA DE
SPINS HÍBRIDOS**

MACEIÓ - AL
2024

ELOÍSA GABRYELA DE SOUZA NICÁCIO

**EFEITO MAGNETOCALÓRICO EM UMA CADEIA DUPLA DE
SPINS HÍBRIDOS**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Física Bacharelado da Universidade Federal de Alagoas - Campus A. C. Simões para a obtenção do título de Bacharelado em Física.

Orientadora: Profa. Dra. Maria Socorro Seixas Pereira

MACEIÓ - AL
2024

Catálogo na Fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico

Bibliotecário: Marcelino de Carvalho Freitas Neto – CRB-4 – 1767

N582e

Nicácio, Eloísa Gabryela de Souza.

Efeito magnetocalórico em uma cadeia dupla de spins híbridos / Eloísa Gabryela de Souza Nicácio. – 2024.

51 f. : il.

Orientadora: Maria Socorro Seixas Pereira.

Monografia (Trabalho de conclusão de curso em física : bacharelado) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto Física. Maceió, 2024.

Bibliografia: f. 43-51.

1. Cadeia de spins do tipo escada. 2. Efeito Magnetocalórico. 3. Propriedades magnéticas. I. Título.

CDU: 537

Troy, Nick e Zuko.

Obrigada pela companhia.

AGRADECIMENTOS

Muitas pessoas contribuíram para eu alcançar o dia de hoje, e sem elas eu não seria nada. Primeiramente, gostaria de agradecer à minha mãe Ana e meu pai Dário. Muito obrigada por sempre me incentivarem a buscar sucesso, segurança e felicidade, não importa que caminho eu decida seguir.

À minha avó Vitória (*in memoriam*), queria muito que você pudesse ver todos os passos que eu dei fora do seu olhar nesses últimos anos.

Aos meus irmãos Joyce e Tiago, por sempre me receberem com confuso entusiasmo, e por serem uma rocha quando eu me sinto à deriva.

Às minhas grandes amigas Laísa Dowsley, Laura Gomes e Lívia Lopes, muito obrigada por serem refúgio e morada todos esses anos. Não seria a pessoa que sou hoje se não fosse pelo impacto de vocês na minha vida. Muito obrigada por tudo.

Aos amigos que entraram comigo na graduação, com os quais sempre quero manter uma rede de afeto: Rayssa, Messias (por ter enfrentado cada obstáculo comigo até o fim), Aírton, Vitória, Samila, Jordan e Badú. Sem vocês, não conseguiria seguir essa jornada com tantos momentos de felicidade.

Aos amigos que fiz durante o curso, Miquéias, Lavínia, Igor, Ramsés, Mariana, Laís, Júlia e Joana, o apoio e companheirismo de vocês me ajudaram a enfrentar muitos momentos difíceis.

Aos meus professores de ensino médio Humberto Rodas, Taís e Sérgio Negão, por me ajudarem a sonhar ser professora de física.

Aos professores Marcelo Lyra, Cássya, Pedro Valentim, Tereza de Araujo, Wagner Ferreira, Iram Gléria, Fernanda Selingardi, Tiago Mariz e Sérgio, por todo apoio, conversas, reflexões sobre a vida e boas recordações, que tiveram impacto positivo na minha jornada.

À professora Socorro Pereira, pela oportunidade e por todo o apoio e ensinamento durante a iniciação científica. Muito obrigada por ter me guiado até aqui.

Ao CNPq, pelo auxílio financeiro, sem o qual eu não teria conseguido concluir essa etapa.

“You are not separate or other. You’re an animal. And animals have no purpose. Nothing has a purpose. The world simply is. If you want to do things that are meaningful to others, fine! Good! So do I! But if I wanted to crawl into a cave and watch stalagmites with Frostfrog for the remainder of my days, that would also be both fine and good. You keep asking why your work is not enough, and I don’t know how to answer that, because it is enough to exist in the world and marvel at it. You don’t need to justify that, or earn it. You are allowed to just live. That is all most animals do.”

Becky Chambers

RESUMO

No presente trabalho, é estudada uma cadeia híbrida de spins do tipo escada de dois ramos, com spins nodais de Ising e elétrons intersticiais itinerantes que possuem amplitude de hopping. Inicialmente, é feita uma breve discussão sobre alguns dos aspectos mais importantes do ponto de vista conceitual para o estudo de propriedades magnéticas em sistemas de baixa dimensionalidade. São descritas aplicações de sistemas magnéticos, e fenômenos como o diamagnetismo, paramagnetismo, ferromagnetismo, antiferromagnetismo e ferrimagnetismo. Também são descritos efeitos magnéticos como a Magnetorresistência e o Efeito Magnetocalórico (EMC). Esse último é retomado mais a frente com mais profundidade. Em seguida, é apresentada uma breve descrição de sistemas de baixa dimensionalidade, com uma solução do modelo de Ising unidimensional, discussão sobre sistemas com frustração, cadeias de spins do tipo diamante e cadeias de spins do tipo escada. Continuamente, é apresentada uma revisão do estudo das propriedades termodinâmicas magnetização, susceptibilidade magnética e calor específico em um modelo escada de spins híbrido realizado por Carvalho et. al., e como a amplitude de hopping e o campo magnético externo alteram essas quantidades. Além disso, o estudo do EMC e do EMC Inverso é revisitado neste modelo, com o acréscimo de uma análise das curvas de isoentropia. Finalmente, são apresentadas aplicações atuais de refrigeração magnética e perspectivas futuras.

Palavras-chave: Cadeia de spins do tipo escada. Efeito Magnetocalórico (EMC). Propriedades magnéticas.

ABSTRACT

The present work studies a hybrid '2-legged' spin-ladder chain, with nodal Ising spins and interstitial itinerant electrons which have a hopping amplitude. Initially, there is a brief discussion on some of the most important conceptual aspects concerning the study of magnetic properties in low-dimensional systems. We describe applications of magnetic systems, as well as phenomena such as diamagnetism, paramagnetism, ferromagnetism, ferrimagnetism and antiferromagnetism. Some magnetic effects are also defined, namely the Magnetoresistance and the Magnetocaloric Effect (MCE). This last is later described more profoundly. Afterwards, low-dimensional systems are introduced, with the unidimensional Ising model solution, a discussion on frustrated systems, diamond-chain systems and spin-ladder systems. As a result, we present a review on the study of the magnetic and thermodynamic properties of a hybrid spin ladder realized by Carvalho et. al., as well as how the hopping amplitude and the externally applied magnetic field change these quantities. Subsequently, the MCE and the Inverse MCE are revisited within this model, with the addition of the isentropic curves' analysis. Finally, current applications of magnetic refrigeration are presented, and future perspectives for this work.

Keywords: Spin-ladder chains. Magnetocaloric effect (MCE). Magnetic properties.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	9
1.1	Aplicações de Sistemas Magnéticos	9
1.2	Organização do Texto	10
2	PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DA MATÉRIA	12
2.1	Fenômenos Magnéticos	12
2.1.1	Diamagnetismo	13
2.1.2	Paramagnetismo	13
2.1.3	Ferromagnetismo	15
2.1.4	Antiferromagnetismo	16
2.1.5	Ferrimagnetismo	16
2.2	Efeitos Magnéticos	16
2.2.1	Magnetorresistência	16
2.2.2	Efeito Magnetocalórico (MCE)	17
3	SISTEMAS MAGNÉTICOS DE BAIXA DIMENSIONALIDADE	19
3.1	Solução Exata do Modelo de Ising Unidimensional	19
3.2	Sistemas com frustração	23
3.3	Cadeia de spins do tipo diamante	23
3.4	Cadeia de spins do tipo escada (<i>legs</i>)	24
4	CADEIA DO TIPO '2-LEG LADDER' COM ELÉTRONS INTERSTICIAIS	26
4.1	O Modelo	26
4.2	Transformação Decoração-Interação	31
4.2.1	Cadeia 1D de Ising com um sítio intersticial decorador	31
4.2.2	Cadeia dupla de spins de Ising com parâmetros efetivos	33
4.3	Propriedades Termodinâmicas	35
4.4	Efeito Magnetocalórico	37
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	41
	REFERÊNCIAS	43

1 INTRODUÇÃO

Desde o início da história considerada formal no Ocidente, já eram conhecidos alguns materiais que apresentavam características magnéticas. Ainda no século VI a.C., a magnetita (Fe_3O_4) foi discutida teoricamente pelos Gregos, especialmente por Tales de Mileto (Coelho 2020). Paralelamente, Wang Chu (Guiguzi séc. IV a.C.), na China, desenvolvia a teoria por trás do que viraria a primeira bússola primitiva durante a Dinastia Han.

Séculos depois, as pesquisas por trás do fenômeno do magnetismo se ampliaram além do desenvolvimento de bússolas, sobretudo com a observação de Oersted do movimento de uma agulha próxima a um circuito pelo qual passava corrente elétrica (Oersted 1820) em 1820. Após 53 anos, James C. Maxwell realizou uma grande unificação do conhecimento científico adquirido até a época e publicou sua teoria do eletromagnetismo (Maxwell 1873). Assim, apesar do estudo dos fenômenos magnéticos ser bem antigo, suas aplicações tecnológicas são as mais diversas, e que estimulam ainda hoje a pesquisa na área.

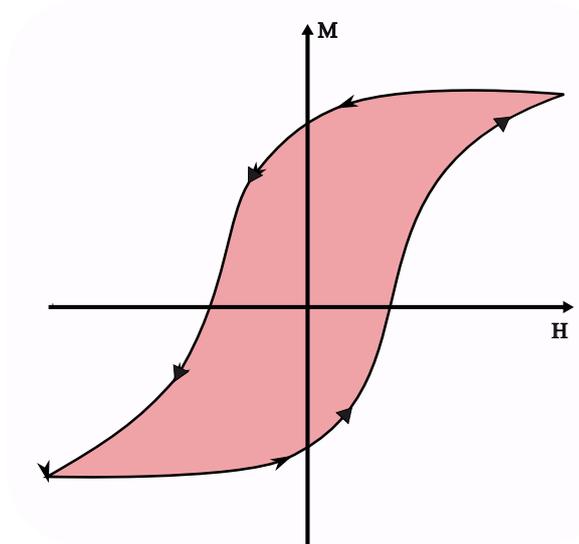
1.1 Aplicações de Sistemas Magnéticos

Com o rápido desenvolvimento científico no final do século XIX e sua extensão para o século XX, foram descobertas cada vez mais propriedades interessantes de sistemas magnéticos. Ao longo da Revolução Industrial, foram realizados diferentes experimentos para tentar alterar propriedades magnéticas de materiais sem realmente entender o funcionamento por trás disso, tipicamente com a adição ou retirada de impurezas.

Em alguns materiais magnéticos, essa alteração servia para modificar o momento magnético da substância (com alta reversibilidade), os chamados materiais magnéticos moles. Esses materiais eram especialmente úteis na fabricação de dínamos e transformadores, pela natureza transiente de seu funcionamento.

Em outras substâncias, no entanto, era observado que o momento magnético não era facilmente revertido. No caso de motores elétricos, esses materiais magnéticos duros reagem realizando trabalho, se movendo fisicamente. Essa propriedade dos materiais magnéticos duros é chamada de histerese (Ewing e Jenkin 1882, Jiles e Atherton 1984). O fenômeno da histerese ocorre quando existem impedimentos à variação de magnetização do material, e é representado graficamente por uma curva de ciclo sigmoidal (William 2007) para o que hoje é chamado de ferromagneto.

Figura 1 – Imagem representando o ciclo de histerese de um material ferromagnético. O eixo das abscissas representa o campo magnético H , e o eixo das ordenadas registra a magnetização total M da substância.



Fonte: Elaborado pela autora, 2024.

O domínio da histerese em materiais teve enorme impacto no desenvolvimento do magnetismo aplicado e culminou no desenvolvimento dos primeiros mecanismos de gravação magnética baseados em mecanismos que perduram até a atualidade nas técnicas de engenharia (Sayers, Bertram 1994). O estudo de ciclos de magnetização e desmagnetização também é utilizado para variar a temperatura da substância, o que consiste na base da refrigeração magnética (Almanza, LoBue e Lebouc 2023) e é tema de impacto na área de energias limpas. Todos esses conceitos físicos de importância serão discutidos nas seções a seguir.

1.2 Organização do Texto

A presente monografia está dividida em quatro partes: propriedades magnéticas da matéria, sistemas magnéticos de baixa dimensionalidade, análise do modelo que é o foco desse estudo e considerações finais.

Na primeira seção, serão definidos e detalhados os fenômenos magnéticos do diamagnetismo, paramagnetismo, ferromagnetismo, antiferromagnetismo e ferrimagnetismo; bem como os efeitos: magnetoresistência, magnetocalórico direto e magnetocalórico inverso.

A segunda seção irá discutir múltiplos sistemas de baixa dimensionalidade, com interações competitivas, frustrações, e cadeias específicas de interesse, como a diamante e a do tipo escada.

Finalmente, a terceira seção compreende uma descrição do modelo da cadeia de spins do tipo escada de dois ramos com elétrons intersticiais. A técnica de Transformação Decoração

Iteração é usada para simplificar o estudo do modelo, e suas propriedades termodinâmicas são analisadas. O Efeito Magnetocalórico (EMC) tem seu estudo aprofundado.

O trabalho é então concluído com as considerações finais da pesquisa, aplicações atuais de sistemas de spins no desenvolvimento de energias limpas e perspectivas futuras.

2 PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DA MATÉRIA

2.1 Fenômenos Magnéticos

Os fenômenos magnéticos que são encontrados por conta da existência de um átomo podem ser compreendidos ao saber a forma com que os elétrons preenchem os orbitais e os diferentes estados de spins que são assumidos. Friedrich Hermann Hund, em 1925, descreveu uma série de diretrizes observadas empiricamente que nos permitem entender como os elétrons de um átomo são organizados (Gadre e Sahu 2022, Morgan 1996). De fato, Hund enunciou três regras que determinam o \mathbf{S} o spin total, \mathbf{L} o momento angular espacial total e $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ o momento angular total do estado fundamental de um átomo. Essas regras podem ser enunciadas da seguinte maneira:

- Dentre todos os estados possíveis de uma mesma configuração, o estado fundamental possui o maior valor total de \mathbf{S} ;
- Dados os estados com mesmo valor de \mathbf{S} máximo, o estado fundamental será o com maior valor de \mathbf{L} . Assim, sabemos em quais orbitais atômicos os elétrons serão situados;
- Os momentos angulares orbital e de spin irão ou não estar alinhados. O valor do momento angular total é então $J = L \pm S$. Se a camada de valência estiver mais cheia do que vazia, o sinal da operação é positivo. Caso contrário, negativo.

O momento magnético por unidade de volume de um sistema é comumente chamado de magnetização do sistema e representado por \mathbf{M} . Essa magnetização é relacionada linearmente ao campo magnético aplicado \mathbf{H} , através da susceptibilidade magnética χ .

$$\vec{M} = \chi \vec{H} \rightarrow \chi = \frac{\partial \vec{M}}{\partial \vec{H}}. \quad (2.1)$$

Quando um material possui uma susceptibilidade magnética da forma $\chi \sim \frac{C}{T}$, onde C é uma constante, diz-se que ele obedece à Lei de Curie, nomeada em honra de Pierre Curie.

No entanto, um elétron qualquer está sob o efeito de um campo magnético dado por

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}),$$

onde μ_0 é a constante de permeabilidade magnética do vácuo ($\mu_0 \approx 1.256 \times 10^{-6} \text{N} \cdot \text{A}^{-2}$). Com a exceção dos ferromagnetos, a susceptibilidade magnética de um material quase sempre é muito pequena, então é possível aproximar \vec{B} como $\mu_0 \vec{H}$ e, assim, temos:

$$\vec{M} = \chi \vec{B} / \mu_0. \quad (2.2)$$

Lembrando que, para o magnetismo, os sistemas relevantes são aqueles nos quais existem momentos magnéticos, ou seja, camadas eletrônicas incompletas, embora átomos não garantam a existência de momentos magnéticos em camadas incompletas em cristais. Assim, o Hamiltoniano de um sistema simples com múltiplos átomos pode ser escrito da seguinte forma:

$$\mathcal{H} = \mu_B \vec{B} \cdot (\vec{L} + g\vec{S}), \quad (2.3)$$

que pode ser reescrito como

$$\mathcal{H} = \tilde{g}\mu_0 \vec{B} \cdot \vec{J}, \quad (2.4)$$

onde $\mu_B \approx 9,274 \times 10^{-24} \text{J} \cdot \text{T}^{-1}$ é o magneton de Bohr, unidade usual do momento magnético. \tilde{g} é chamado de fator de Landé ou fator g efetivo, que é definido em função do momento angular orbital e de spins através da equação de Landé:

$$\tilde{g} = \frac{1}{2}(1 + g) + \frac{1}{2} \left[\frac{S(S+1) - L(L+1)}{J(J+1)} \right],$$

onde g é o fator giro magnético do elétron.

2.1.1 Diamagnetismo

O diamagnetismo é uma propriedade presente em alguns materiais que consiste em uma repulsão quando expostos à influência de um campo magnético. Nessa situação, é induzido um momento de dipolo que não ocorre naturalmente, e que é oposto à direção do campo (Simon 2013). Frequentemente, esse fenômeno ocorre em elementos que não possuem elétrons emparelhados, e o valor da susceptibilidade magnética é negativa.

Foi inicialmente observada por Anton Brugmans, em 1778, ao observar que o bismuto era repellido ao ser colocado em proximidade de um ímã (Brugmans 1778, Kuestler 2007). A pequena força diamagnética, no entanto, fez com que apenas posteriormente, em 1845, Michael Faraday descrevesse as propriedades do diamagnetismo (Faraday 1846).

As aplicações do diamagnetismo são principalmente relevantes nos estudos de levitação magnética. Especialmente, os trens que utilizam tecnologia Maglev. Outro experimento famoso é o do sapo que foi uma vez levantado por um grupo de cientistas holandeses e britânicos com o uso dessa tecnologia (Geim 1998, Berry e Geim 1997).

2.1.2 Paramagnetismo

Para os paramagnetos, a susceptibilidade magnética é positiva e pequena. Sob o efeito de um campo magnético, a magnetização resultante do sistema possui o mesmo sentido que o campo (Simon 2013). Além disso, seus átomos possuem momento magnético permanente.

Exemplos de materiais paramagnéticos incluem os sais de metais de transição, metais como o alumínio e gases como o oxigênio.

Em geral, os materiais paramagnéticos apresentam comportamento de um dos seguintes tipos: o paramagnetismo de Langevin ou o paramagnetismo de Pauli (F. 2008). A teoria de Langevin explica a dependência térmica da susceptibilidade magnética de alguns materiais, considerando que a orientação dos momentos magnéticos de átomos que não interagem entre si são determinadas aleatoriamente pela sua energia térmica.

A partir dos estudos de Langevin, é possível obter a lei de Curie para a susceptibilidade paramagnética considerando efeitos quânticos. Assim,

$$\chi = \frac{Ng^2J(J+1)\mu_B^2}{3k_B T} = \frac{C}{T}, \quad (2.5)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann e $\frac{Ng^2J(J+1)\mu_B^2}{3k_B}$ é a constante de Curie.

No entanto, a Lei de Curie historicamente se mostrou incompleta ao observar sistemas nos quais as interações entre os momentos magnéticos dentro do átomo não são negligíveis. A fim de resolver esse problema, Weiss (Weiss e Foëx 1931) postulou a existência de um *campo molecular*, uma espécie de interação interna entre os momentos. Esse campo molecular \vec{H}_m seria diretamente proporcional à magnetização \vec{M} , com a constante de proporcionalidade do campo molecular γ , ou seja,

$$\vec{H}_m = \gamma \vec{M}$$

$$\chi = \frac{\vec{M}}{H_{tot}} \rightarrow \frac{\vec{M}}{\vec{H} + \gamma \vec{M}} = \frac{C}{T}, \quad (2.6)$$

$$\vec{M} = \frac{C\vec{H}}{T - \gamma C}$$

$$\chi = \frac{C}{T - \gamma C}$$

$$\chi = \frac{C}{T - \Theta} \quad (2.7)$$

Aqui, definimos $\Theta = \gamma C$ e obtemos a Lei de Curie-Weiss. A Equação 2.7 nos diz que a susceptibilidade magnética diverge à medida que a temperatura se aproxima do valor Θ . Isso corresponde a existência de uma transição de fase nessa temperatura crítica em alguns casos (também chamada de temperatura de Curie). Quando $T > \Theta$, as interações térmicas do sistema são predominantes, e o comportamento é paramagnético. No entanto, para $T < \Theta$, o regime do sistema é de que os momentos magnéticos estejam alinhados em temperaturas baixas, apresentando comportamento ferromagnético.

Além do paramagnetismo de Langevin, alguns materiais paramagnéticos possuem comportamento independente da temperatura. Eles seguem o chamado paramagnetismo de Pauli. Ao

estudarmos a magnetização de um gás de elétrons livres utilizando os conceitos da estatística de Fermi-Dirac, é observado que apenas uma certa quantidade de elétrons do material conseguem alterar a sua orientação quando submetidos a um campo magnético externo, especialmente os que estão próximos à superfície de Fermi. É obtida então a seguinte expressão para a suscetibilidade magnética de um gás de elétrons livres:

$$\chi = \frac{\mu_0 \mu_B^2 N}{E_F}, \quad (2.8)$$

onde E_F é a energia na superfície de Fermi, e N é o número total de elétrons.

No geral, materiais paramagnéticos com a presença de elétrons localizados apresentam o comportamento paramagnético de Langevin. Em contraste, paramagnetos que podem ser representados por um gás de elétrons livres, como os metais, são descritos pelo paramagnetismo de Pauli.

2.1.3 Ferromagnetismo

A palavra ímã tem origem do francês *l'aiment*, ou *pierre aiment*, que significa *amante*, ou *pedra que ama* (Shu-hua 1954). Por conta disso, os ferromagnetos são os materiais nos quais pensamos ao imaginar um ímã de geladeira, por exemplo.

Ferromagnetos são materiais que possuem magnetização não nula mesmo na ausência de um campo magnético aplicado. Essa característica é chamada de *magnetização espontânea*. Acima de sua temperatura de Curie, todos os materiais ferromagnéticos apresentam comportamento paramagnético, como mostrado anteriormente (F. 2008). Exemplos de materiais com esse comportamento são o ferro, níquel e cobalto.

Weiss (Weiss 1907) propôs uma teoria de ferromagnetismo baseada em uma hipótese relativa a ações mútuas entre moléculas. Cada molécula contribui com uma ação igual a de um campo uniforme, proporcional à intensidade de magnetização e com mesma direção. Esse *campo molecular* é adicionado ao campo magnético externo e é responsável pela intensidade de magnetização dos ferromagnetos por meio das leis que regem os corpos paramagnéticos.

Weiss também explicou a alta intensidade da magnetização desses materiais pela existência de *domínios magnéticos* (Weiss e Kunz 1905). Realisticamente, materiais magnéticos são formados por *domínios magnéticos*, regiões individuais nas quais a magnetização é saturada e segue uma direção uniforme (Kittel 2004). Os domínios são divididos por *paredes*, que podem ter a sua espessura alterada em função de parâmetros externos. Abaixo da temperatura de Curie, a magnetização de uma substância se divide espontaneamente nesses domínios, estabelecendo o comportamento ferromagnético dessas substâncias.

2.1.4 Antiferromagnetismo

O fenômeno do antiferromagnetismo foi inicialmente introduzido por Lev Landau em 1933, ao discutir a dependência que a susceptibilidade possui com o campo em baixas temperaturas (Landau 1965). Louis Néel (Néel 1971), estudando a teoria do campo molecular de Weiss, observou, em 1936, esse novo comportamento magnético composto pela soma de dois ferromagnetos idênticos e intercalados e espontaneamente magnetizados em direções opostas.

Bitter (Bitter 1938) nomeou essa nova categoria de substâncias *antiferromagnetos* e os resultados de todos os estudos sobre essa classe de materiais até então foram reunidos por J.H. van Vleck (Vleck 1951). Os spins de um antiferromagneto são alinhados de forma antiparalela a seus spins vizinhos quando em seu estado de menor energia. Exemplos de materiais antiferromagnéticos são geralmente compostos de metais de transição que possuem oxigênio ou enxofre em sua composição.

2.1.5 Ferrimagnetismo

Após o estabelecimento da teoria do campo molecular de Weiss, Louis Néel (Néel 1948, Barbara 2019) descreveu alguns materiais que em temperatura ambiente, apresentam as mesmas características essenciais que as substâncias ferromagnéticas. Ou seja, também possuem magnetização espontânea. No entanto, os coeficientes de campo molecular são *negativos*. Consequentemente, Néel nomeia essas substâncias *ferrimagnetos*.

Materiais ferrimagnéticos são compostos por grupos, populações ou sub-redes de momentos magnéticos opostos entre grupos (Néel 1936). No entanto, a magnetização total espontânea ainda é existente, visto que esses momentos não possuem a mesma magnitude. A magnetita (Fe_3O_4) é um exemplo de material ferrimagnético, famoso por ser um dos primeiros ímãs conhecidos.

2.2 Efeitos Magnéticos

As propriedades e características magnéticas e suas combinações podem dar origem a diferentes fenômenos e efeitos extremamente interessantes.

2.2.1 Magnetoresistência

Outro fenômeno interessante, causado pela variação do campo magnético em um material, é a *magnetoresistência*. Primeiramente observada por Lord Kelvin (Thomson 1857) em 1857, o efeito consiste em uma variação da resistência elétrica de um material quando submetido a um campo magnético variável.

Esse fenômeno registra *diminuição* na resistência quando a corrente elétrica está na mesma direção que o campo aplicado, e *aumento* na resistência quando o campo aplicado é an-

tiparalelo à corrente (Degauque 1992, Thompson 2001). Em 2007, Albert Fert e Peter Grünberg (2007) receberam o prêmio Nobel de Física pela descoberta da *Magneto-resistência Gigante*.

2.2.2 Efeito Magnetocalórico (MCE)

Uma aplicação muito interessante das propriedades magnéticas da matéria é o Efeito Magnetocalórico (MCE). O primeiro registro (Weiss e Piccard 1917) desse curioso efeito foi publicado por Weiss e consiste na variação da temperatura de uma substância ao expô-la a um campo magnético variável (de Oliveira e von Ranke 2010). Através desse efeito foi possível o desenvolvimento da refrigeração magnética, tema atual nos estudos de energias limpas (Romero Gómez et al. 2013, Balli et al. 2014, Kolano et al. 2016).

O MCE (Gómez J.; Ferreiro Garcia 2013, Ranke et al. 2009) pode ser descrito por duas quantidades termodinâmicas: a variação da temperatura adiabática ΔT_{ad} e a variação isotérmica da entropia magnética ΔS_m , dadas por:

$$\Delta S_m = \int_{H_1}^{H_2} \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_H dH \quad (2.9)$$

onde M é a magnetização total e,

$$\Delta T_{ad} = - \int_{H_1}^{H_2} \frac{T}{C_H} \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_H dH \quad (2.10)$$

Também é interessante analisar o Parâmetro Magnético de Grüneisen (Gomes et al. 2019) Γ_H , que também é chamado de Taxa Magnetocalórica quando multiplicado pela temperatura T . Esse parâmetro pode ser escrito da seguinte forma:

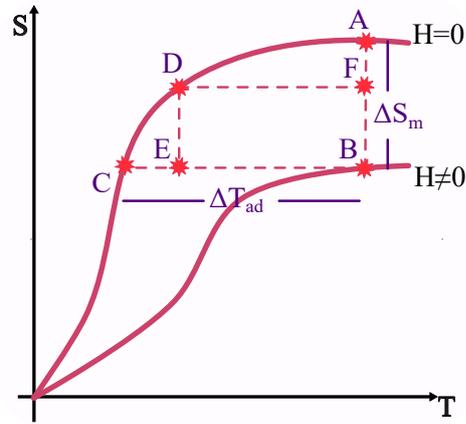
$$\Gamma_H = - \frac{(dM/dT)_H}{C_H} = \frac{1}{T} \frac{dT}{dH} \Big|_S \quad (2.11)$$

Considerando um gráfico da entropia S em função da temperatura T , para dois valores de campo magnético H aplicados, é possível observar um ciclo de refrigeração magnética, como ilustrado na Figura 2. Na região $A \rightarrow B$, há uma variação isotérmica da entropia magnética, igual a ΔS . Ao se atingir o ponto B , o sistema é então adiabaticamente isolado, e o campo magnético é reduzido, processo representado pelo segmento $B \rightarrow C$. Assim, a temperatura do sistema é reduzida, e há a remoção de calor do sistema. O ciclo $F \rightarrow B \rightarrow E \rightarrow D \rightarrow F$ é o análogo do ciclo de Carnot nessa situação, com as etapas:

- $F \rightarrow B$: Magnetização adiabática;
- $B \rightarrow E$: Variação da entalpia isomagnética;
- $E \rightarrow D$: Desmagnetização adiabática;

- $D \rightarrow F$: Variação da entropia isomagnética.

Figura 2 – Ilustração didática de um gráfico da entropia S versus a temperatura T , a fim de se observar as transformações que compõem o Efeito Magnetocalórico (MCE).



Fonte: Elaborado pela autora, 2024.

Em geral, à medida que o campo magnético aplicado aumenta isotermicamente sobre a substância, na presença de um MCE direto acontece uma desmagnetização. Assim,

$$\Delta S_m < 0 \rightarrow -\Delta S > 0 \text{ e } \Delta T_{ad} > 0$$

No entanto, alguns materiais (Romero Gómez et al. 2013) apresentam um comportamento diferente. Algumas ligas de Ni-Mn-Sn (Krenke et al. 2005) sofrem uma magnetização e, então,

$$\Delta S_m > 0 \rightarrow -\Delta S < 0 \text{ e } \Delta T_{ad} < 0$$

Nesse último caso, teremos o denominado Efeito Magnetocalórico Inverso.

3 SISTEMAS MAGNÉTICOS DE BAIXA DIMENSIONALIDADE

O Capítulo 2 apresentou uma revisão de conceitos básicos de magnetismo, que serão usados para aplicações em sistemas de baixa dimensionalidade. Essa família de sistemas é alvo de grande interesse de estudo na área de Física da Matéria Condensada, pela sua capacidade de fornecer uma análise de propriedades físicas de materiais que possuem estruturas com características semelhantes, sem a necessidade de realizar o estudo de sistemas de muitos corpos e fenômenos críticos (Baxter 1982).

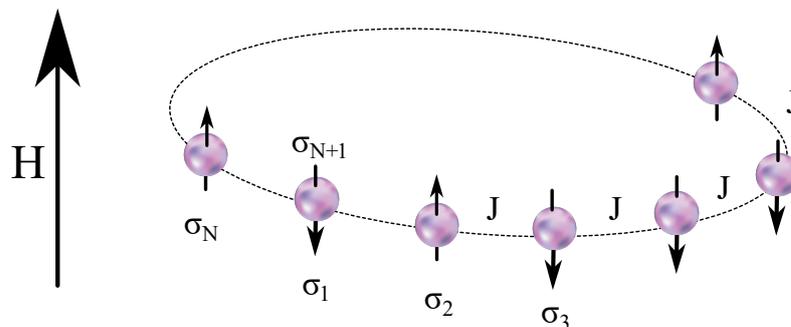
Um sistema ferromagnético simples pode então ser reduzido simplesmente ao que hoje é chamado de modelo de Ising. Proposto a Ernst Ising (Ising 1925) por seu orientador Wilhelm Lenz, o modelo reproduz de forma satisfatória as interações microscópicas de curto alcance entre os sítios primeiros-vizinhos de uma cadeia ferromagnética unidimensional.

Nesse capítulo apresentaremos a solução exata do Modelo de Ising unidimensional, que será útil para o entendimento do modelo de escada de spins que desejamos investigar. Além disso, faremos uma breve revisão sobre algumas propriedades ou características de sistemas magnéticos de baixa dimensionalidade.

3.1 Solução Exata do Modelo de Ising Unidimensional

No modelo de Ising unidimensional, os spins estão localizados em sítios equidistantes numa cadeia linear, interagindo somente com os vizinhos mais próximos. Essa estrutura pode ser observada na Figura 3. Assim, a energia potencial é mínima quando os dipolos interagentes apontam na mesma direção e máxima quando apontam em sentidos opostos. Existem várias formulações para a resolução desse modelo na presença de um campo externo. Adotamos a formulação introduzida por Montroll (Newell e Montroll 1953) e consideramos uma cadeia fechada com condições periódicas de contorno, além de utilizar a Técnica de Matriz Transferência.

Figura 3 – Representação gráfica do modelo de Ising em uma dimensão com condições periódicas de contorno. Os spins σ_j da cadeia possuem interação J com seus primeiros vizinhos σ_{j+1} , e j vai de 1 a N .



Fonte: Elaborado pela autora, 2024.

Esse modelo é extremamente útil para a avaliação de potenciais métodos aproximativo, pela simplicidade e ampla literatura de sua solução exata. Além disso, existem aplicações satisfatórias desse sistema em problemas de física estatística sem relação direta com o magnetismo (Agliari, Burioni e Contucci 2010, Fortunato 2005, Malarz 2003).

No modelo, N sítios σ_j vizinhos são spins, que podem assumir valores ± 1 . A energia $E(\sigma)$ do modelo é dada por

$$E(\sigma) = E_0(\sigma) + E_1(\sigma), \quad (3.1)$$

onde $E_0(\sigma)$ é a energia de contribuição das forças intramoleculares entre cada spin com seu vizinho, e $E_1(\sigma)$ advém da interação entre os spins e um campo eletromagnético aplicado H .

Como o campo é proporcional a seu componente na direção do spin, temos que

$$E_1(\sigma) = -H \sum_{j=1}^N \sigma_j. \quad (3.2)$$

Entre sítios vizinhos da rede também existe uma energia de interação dada por

$$E_0(\sigma) = -J \sum_{j=1}^N \sigma_j \sigma_{j+1}. \quad (3.3)$$

Assim, a energia total do sistema é:

$$E(\sigma) = -J \sum_{j=1}^N \sigma_j \sigma_{j+1} - H \sum_{j=1}^N \sigma_j. \quad (3.4)$$

Definimos então as relações a seguir, e escrevemos a função de partição do sistema da seguinte forma:

$$K = J/k_\beta T \quad \text{e} \quad h = H/k_\beta T, \quad (3.5)$$

$$Z_N = \sum_{\sigma} \exp \left[K \sum_{j=1}^N s_j s_{j+1} + h \sum_{j=1}^N s_j \right], \quad (3.6)$$

onde foram considerados a ciclicidade e periodicidade do sistema, que asseguram a equivalência dos sítios (Thompson 1976). E podemos representar a função de partição também da seguinte forma:

$$Z_N = \sum_{\sigma} \prod_{j=1}^N L(\sigma_j, \sigma_{j+1}),$$

em que

$$L(\sigma, \sigma') = \exp \left[K\sigma\sigma' + \frac{h(\sigma + \sigma')}{2} \right]. \quad (3.7)$$

Aqui $\sigma_j = \sigma$ se $\sigma_{j+1} = \sigma'$, com $\sigma = \pm 1$ e $\sigma' = \pm 1$, bem como $L(\sigma, \sigma') = L(\sigma', \sigma)$, temos que a nossa função de partição se transforma em:

$$Z_N = \sum_{\sigma_j = \pm 1} L^N(\sigma, \sigma').$$

A Técnica de Matriz Transferência consiste na escrita dos possíveis valores de $L(\sigma, \sigma')$ como as entradas de uma matriz L :

$$L = \begin{pmatrix} L(+1, +1) & L(+1, -1) \\ L(-1, +1) & L(-1, -1) \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Ou seja,

$$L = \begin{pmatrix} e^{K+h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-h} \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Assim, sabemos que $Z_N = \text{Tr}(L)^N = \lambda_1^2 + \lambda_2^2$, onde λ_1^2 e λ_2^2 são os autovalores da matriz L , dados por

$$\lambda_{1,2} = e^K \cosh(h) \pm [e^{2K} \sinh^2(h) + e^{-2K}]^{1/2}. \quad (3.10)$$

Dessa forma, podemos escrever a função de partição da seguinte forma:

$$Z_N = \lambda_1^N \cdot \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right].$$

Assim,

$$Z_N = \left\{ e^K \cosh(h) [e^{2K} \sinh^2(h) + e^{-2K}]^{1/2} \right\}^N \cdot \left\{ 1 + \left[\frac{e^K \cosh(h) - [e^{2K} \sinh^2(h) + e^{-2K}]^{1/2}}{e^K \cosh(h) + [e^{2K} \sinh^2(h) + e^{-2K}]^{1/2}} \right]^N \right\}. \quad (3.11)$$

A energia livre f por sítio pode ser definida como:

$$f(H, T) = -k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln Z_N}{N}. \quad (3.12)$$

Logo,

$$f(H, T) = -k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln \left(\lambda_1^N \cdot \left(1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right) \right)$$

$$f(H, T) = -k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \left(N \ln \lambda_1 + \ln \left(1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right) \right)$$

$$f(H, T) = -k_B T \cdot \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \ln \lambda_1 + \frac{\ln \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right]}{N} \right\}.$$

É fácil observar que $\lambda_1 > \lambda_2$. Vamos lembrar também que, no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, os diferentes ensembles estatísticos são equivalentes (Touchette 2015). Portanto, retomando (3.5) e $\beta = 1/k_B T$, a energia livre por sítio do sistema é

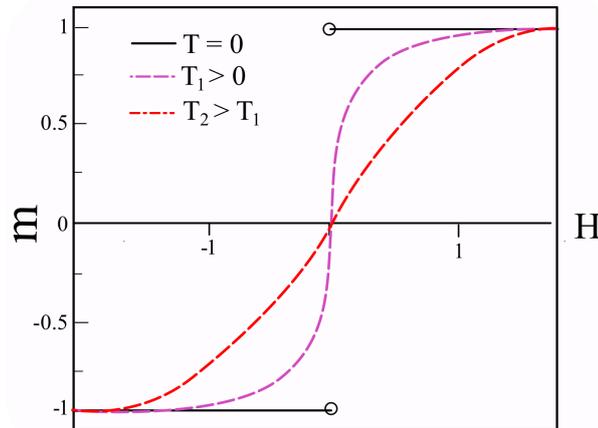
$$f(H, T) = \frac{-1}{\beta} \cdot \ln \left\{ e^{\beta J} \cosh(\beta H) + \left[e^{2\beta J} \sinh^2(\beta H) + e^{-2\beta J} \right]^{1/2} \right\} \quad (3.13)$$

Adicionalmente, derivando a energia livre em relação ao campo magnético H , obtemos a magnetização M do sistema.

$$M(H, T) = \frac{\partial f(H, T)}{\partial H} = \frac{e^K \sinh(h)}{[e^{2K} \sinh^2(h) + e^{-2K}]^{1/2}} \quad (3.14)$$

A dependência da magnetização com um campo magnético H é mostrada na Figura 4. Quando $H = 0$, a função é contínua e nula para qualquer valor de temperatura que seja diferente de zero. Por conta disso, temos que a magnetização não é espontânea em nenhum momento (Baxter 1982).

Figura 4 – Gráfico da magnetização M em função de um campo magnético H para o modelo de Ising unidimensional.



Fonte: Elaborado pela autora, 2024.

Também evidenciamos que a magnetização, podendo ser definida como o momento magnético médio do sistema (Baxter 1982), realmente se encontra no intervalo $[-1, 1]$, e que o sistema não possui nenhuma transição de fase para qualquer seja a temperatura positiva finita adotada.

3.2 Sistemas com frustração

Nas últimas décadas, modelos de spins quânticos com interações competitivas (frustrações) têm atraído muita atenção, especialmente devido ao comportamento extraordinário do seu estado fundamental.

O conceito de frustração de um sistema de spins foi introduzido formalmente em 1977 (Toulouse 1980, Vannimenus e Toulouse 1977), ao se discutir a possibilidade de uma nova transição de fase nos ditos *vidros de spin*. Esse efeito de frustração é provocado por restrições topológicas que fazem com que a configuração de um sistema de spins seja diferente da configuração de menor energia de cada elemento individual (Diep 2020).

Um exemplo clássico de sistema de spins de baixa dimensionalidade que apresenta frustração é o modelo de Ising triangular com acoplamento antiferromagnético entre os primeiros vizinhos (Wannier 1950, Wannier 1973). Sistemas frustrados frequentemente possuem estados fundamentais degenerados (Schnack 2010), que implicam consequências físicas interessantes, como transições magnetoelásticas (e.g. transições spin-Peierls (SP)) (Bray et al. 1983) e mecanismos de quebra de simetria espontânea, como o efeito Jahn-Teller (1958).

Por outro lado, a vasta literatura da área mostra que modelos de spins exatamente solúveis desempenham um papel importante no estudo do magnetismo, pois eles podem colaborar no entendimento de diversos aspectos de sistemas interagentes de muitos corpos, particularmente transições de fase e fenômenos críticos. Apesar de sua simplicidade, o tratamento desses modelos muitas vezes pode exigir um esforço computacional e/ou métodos matemáticos mais rebuscados. Uma técnica que tem se destacado nesses estudos é o mapeamento exato baseada em transformações algébricas. Assim, é possível obter a solução exata de modelos mais complexos com frustrações a partir de uma relação mapeamento precisa com um modelo mais simples e exatamente solúvel.

Dentro desse contexto, vários sistemas magnéticos frustrados com diferentes topologias têm sido investigados. A seguir, destacamos duas topologias para uma breve discussão: o modelo de spins do tipo diamante (ou AB2) e o modelo de escadas de spins. Esse último é o objeto de estudo desse trabalho de conclusão de curso (TCC).

3.3 Cadeia de spins do tipo diamante

Um dos mais simples sistemas quânticos frustrados 1-D é o modelo da cadeia tipo diamante (ou AB2), na qual a célula unitária tem o formato de um losango.

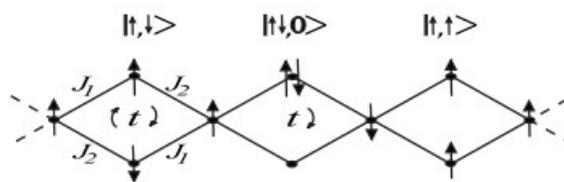
Para essa topologia, quando todas as interações entre todos os sítios nodais e sítios intersticiais são iguais, essa cadeia é chamada de cadeia diamante isotrópica e foi introduzida por Takano, Kubo e Sakamoto em 1996 (Takano K; Kubo 1996). Quando há interações diferentes entre sítios nodais e intersticiais subsequentes, temos uma cadeia do tipo diamante distorcida.

Esse modelo (Okamoto Kiyomi; Tonegawa 1999) foi introduzido por Okamoto e colaboradores em 1999. O cristal azurite ($Cu_3(CO_3)_2(OH)_2$), potencial matéria prima nos estudos de refrigeração magnética, é uma substância que apresenta essa estrutura.

Aliado a isso, um interesse renovado tem surgido em uma classe de modelos decorados em que um dímero quântico é colocado entre os spins de Ising formando diferentes geometrias (Strečka e Jascur 2003, Strečka et al. 2009, Gálisová et al. 2011). Nesses modelos, a mobilidade dos elétrons intersticiais que compõem os dímeros apresenta um termo cinético associado que produz correlações antiferromagnéticas que levam a interações frustradas (Doria, Pereira e Lyra 2014, Čisárová e Strečka 2014, Strečka, Čenčariková e Lyra 2015).

Um estudo realizado por Pereira e colaboradores (Pereira, Moura e Lyra 2008) analisou uma cadeia do tipo diamante de spins híbridos distorcida, na presença de um campo magnético externo. Essa cadeia possui spins de Ising localizados (sítios nodais), intercalados por spins itinerantes em sítios intersticiais (ver Figura 5). Nesse trabalho, os autores mostraram que esse sistema apresentava regiões de platôs na curva da magnetização, estruturas de picos duplos no calor específico e susceptibilidade, que são propriedades físicas típicas de sistemas frustrados. Além disso, tal sistema apresentou um efeito magnetocalórico pronunciado. De fato, a literatura sugere esses materiais como candidatos a substâncias magneto-ativas no processo de refrigeração magnética em baixas temperaturas, o que justifica os estudos das propriedades magnéticas, em especial do processo de magnetização de sistemas de spins frustrados.

Figura 5 – Cadeia de spins do tipo diamante. Os spins das bordas (nodais) são de Ising e localizados.



Fonte: (Pereira, Moura e Lyra 2008)

3.4 Cadeia de spins do tipo escada (*legs*)

Dentro do universo de sistemas de spins de baixa dimensionalidade a ser explorado, os modelos de spins-escada e suas variações se tornaram particularmente interessantes, sobretudo após a descoberta de uma fase supercondutora no composto $Sr_{14-x}Ca_xCu_{24}O_{41}$. Esse sistema é o primeiro material supercondutor de óxido de cobre com uma rede não quadrada (Uehara et al. 1996).

Cadeias de spins do tipo escada são estruturas compostas por n-cadeias paralelas de spins cujas interações entre os sítios de uma mesma cadeia e entre cadeias possuem magnitudes

próximas (Silva e Almeida 2021). Essas estruturas, além das quantidades termodinâmicas que indicam potencial como materiais refrigeradores, também possuem outras propriedades físicas de interesse. Tem sido mostrado que escadas com um número par de cadeias possuem um gap no estado fundamental (Ying et al. 2004), ao passo que escadas com um número ímpar de cadeias não possuem gap de spin (Gopalan, Rice e Sigrist 1994, Wang et al. 2016) e também foi evidenciado que, para escadas com número ímpar de cadeias, pode-se induzir a supercondutividade através da adição de frustrações no sistema (Dagotto 1999, Dagotto, Riera e Scalapino 1992, Dagotto 1994, Landee et al. 2001).

No presente trabalho, buscamos reproduzir os dados obtidos por Carvalho 2016 e, além disso, abordar uma forma de análise do Efeito Magnetocalórico no sistema através das curvas de isoentropia.

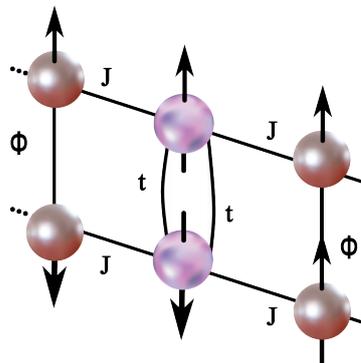
4 CADEIA DO TIPO '2-LEG LADDER' COM ELÉTRONS INTERSTICIAIS

Nos capítulos anteriores, foi feita uma breve discussão sobre alguns dos aspectos mais importantes do ponto de vista conceitual para o estudo de propriedades magnéticas em sistemas de baixa dimensionalidade. Agora, apresentaremos uma revisão do estudo das propriedades termodinâmicas em um modelo escada de spins híbrido realizado por Carvalho et. al. (Carvalho 2016). Além disso, revisitaremos o estudo do Efeito Magnetocalórico nesse modelo, acrescentando uma análise das curvas de isoentropia.

4.1 O Modelo

No trabalho realizado por Carvalho et. al. (Carvalho 2016), o objeto de estudo foi uma cadeia de spins do tipo escada de dois ramos, compostas por spins de Ising nodais e com elétrons itinerantes intersticiais que podem saltar de uma “perna” da escada para outra com uma amplitude de hopping t . A interação entre os spins e os elétrons móveis de um mesmo ramo da cadeia é representada pela constante de troca ou exchange J . Por outro lado, a interação entre um spin de uma cadeia com seu vizinho mais próximo da outra cadeia é ϕ , como ilustrado na Figura 6.

Figura 6 – Ilustração da cadeia híbrida de spins de Ising do tipo escada (em rosa escuro) com spins itinerantes intersticiais (em lilás), ϕ é a interação de troca entre ramos da escada, J é a interação entre os spins de Ising e os spins móveis, e t é amplitude quântica de hopping.



Fonte: Elaborado pela autora, 2024.

Para os spins fixos da cadeia superior, denotamos $\sigma_{1,i}$, e para os spins de Ising da cadeia

inferior, $\sigma_{2,i}$. O Hamiltoniano do modelo é

$$\mathcal{H}_{total} = \sum_{i=1}^N [(\mathcal{H}_i) + \frac{H}{2} (\sigma_{1,i} + \sigma_{2,i} + \sigma_{1,i+1} + \sigma_{2,i+1}) + \frac{\phi}{2} (\sigma_{1,i}\sigma_{2,i} + \sigma_{1,i+1}\sigma_{2,i+1})], \quad (4.1)$$

onde \mathcal{H}_i representa a interação em uma mesma cadeia dos spins de Ising com os elétrons itinerantes, que pode ser representado numa forma matricial da seguinte maneira

$$\mathcal{H}_i \doteq \begin{array}{c|cccccc} & |\uparrow, \uparrow\rangle & |\downarrow, \downarrow\rangle & |\uparrow, \downarrow\rangle & |\downarrow, \uparrow\rangle & |0, \uparrow\downarrow\rangle & |\uparrow\downarrow, 0\rangle \\ \hline |\uparrow, \uparrow\rangle & -J(\sigma_{1,i} + \sigma_{1,i+1}) + \sigma_{2,i} + \sigma_{2,i+1} - 2H & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |\downarrow, \downarrow\rangle & 0 & +J(\sigma_{1,i} + \sigma_{1,i+1}) + \sigma_{2,i} + \sigma_{2,i+1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ |\uparrow, \downarrow\rangle & 0 & 0 & -J(\sigma_{1,i} + \sigma_{1,i+1}) + J(\sigma_{2,i} + \sigma_{2,i+1}) & 0 & t & t \\ |\downarrow, \uparrow\rangle & 0 & 0 & 0 & +J(\sigma_{1,i} + \sigma_{1,i+1}) - J(\sigma_{2,i} + \sigma_{2,i+1}) & t & t \\ |0, \uparrow\downarrow\rangle & 0 & 0 & t & t & 0 & 0 \\ |\uparrow\downarrow, 0\rangle & 0 & 0 & t & t & 0 & 0 \end{array},$$

Os quatro spins de Ising podem estar distribuídos em $2^4 = 16$ configurações diferentes e, em algumas delas, as energias são iguais. Em resumo, os spins nodais podem ter as configurações ilustradas na Figura 7.

A partir da diagonalização exata do Hamiltoniano (4.1) e considerando o termo de interação de cada spin com o campo, obtemos os autovalores para cada configuração dos spins em nosso sistema, e destacamos na Figura 7 os estados de menor energia em rosa.

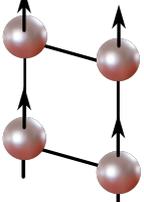
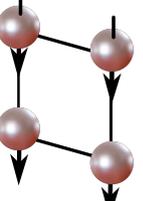
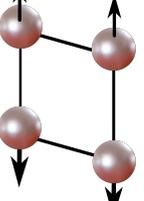
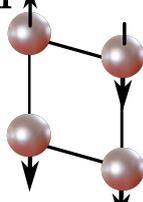
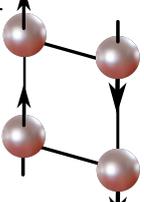
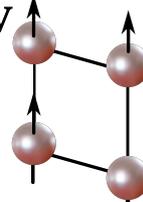
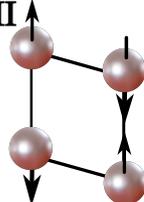
Os estados com menor energia, E_I , E_{II} e E_{III} , são obtidos ao compararmos os autovalores obtidos. As duas primeiras são observadas na Configuração I do sistema e a última, na Configuração V. Quando E_I , o sistema está em seu estado ferromagnético (F). Para E_{II} , é observada uma fase chamada de paramagnética não saturada (P). Por fim, E_{III} representa um estado antiferromagnético (AF) do sistema. Esses três possíveis estados de menor energia são mostrados na Figura 8.

$$E_I = -4J - 4H - \phi \quad (4.2)$$

$$E_{II} = -2t - \phi - 2H \quad (4.3)$$

$$E_{III} = \phi - \sqrt{16J^2 + 4t^2} \quad (4.4)$$

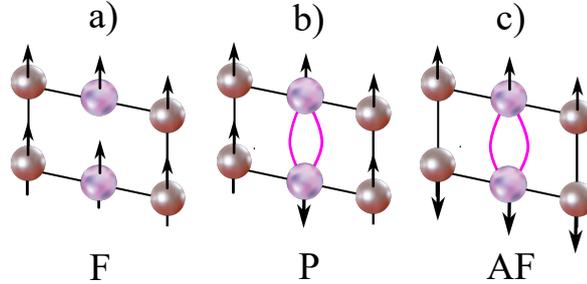
Figura 7 – Representação esquemática de cada configuração do sistema e suas autoenergias correspondentes. As menores autoenergias estão destacadas em rosa. Configuração I - Os quatro spins alinhados paralelamente ao campo magnético; Configuração II - Os 4 spins antiparalelos ao campo magnético; Configuração III - Três spins antiparalelos e um está paralelo; Configuração IV - Três spins paralelos e um antiparalelo ao campo; Configuração V - Dois spins paralelos ao campo na mesma cadeia; Configuração VI - Dois spins paralelos ao campo no mesmo ramo da escada; Configuração VII - Dois spins paralelos ao campo formando uma diagonal.

	I 	$-4J - 4H - \phi$ $4J - \phi$ $2t - \phi - 2H$ $-2t - 2H - \phi$ $-\phi + 2H$ $-\phi + 2H$	
II 	$-4J + 4H - \phi$ $4J - \phi$ $2t - \phi$ $-2t - \phi$ $-\phi + 2H$ $-\phi + 2H$	V 	$\phi - 2H$ $\phi + 2H$ ϕ ϕ $\sqrt{16J^2 + 4t^2} + \phi$ $\phi - \sqrt{16J^2 + 4t^2}$
III 	$-2J - 3H$ $2J + H$ $-H$ $-H$ $-H + \sqrt{4J^2 + 4t^2}$ $-H - \sqrt{4J^2 + 4t^2}$	VI 	$-\phi - 2H$ $-\phi + 2H$ $-\phi$ $-\phi$ $2t - \phi$ $-2t - \phi$
IV 	$-2J + 3H$ $2J - H$ H H $H + \sqrt{4J^2 + 4t^2}$ $H - \sqrt{4J^2 + 4t^2}$	VII 	$\phi - 2H$ $\phi + 2H$ ϕ ϕ $2t + \phi$ $-2t + \phi$

Fonte: Elaborado pela autora, 2024.

De posse das autoenergias e autoestados do sistema, obtemos o Diagrama de Fases do Estado Fundamental (ver Figura 9), através de comparações de cada uma das menores autoenergias do sistema. Obtemos as curvas que irão formar o nosso Diagrama através das igualdades entre as nossas autoenergias, que irão representar as transições de fase. Aqui vamos nos atentar ao caso em que $\phi/J = 1/2$, pois representa um regime onde o diagrama de fase se torna mais

Figura 8 – Possíveis configurações para o estado fundamental da célula unitária do sistema. Os spins de Ising são mostrados em rosa escuro, e os spins itinerantes intersticiais em lilás. a) A configuração é de um sistema ferromagnético; b) A configuração é um sistema paramagnético são-saturado; c) A configuração é de um sistema antiferromagnético.



Fonte: Elaborado pela autora, 2024.

rico. Dessa forma, obtemos:

$$\begin{aligned} E_I = E_{II} &= -4J - 4H - \phi = -2t - \phi - 2H \\ 2J + 2H &= t + H \\ 2J + H &= t \end{aligned}$$

$$H/J = t/J - 2; \quad (4.5)$$

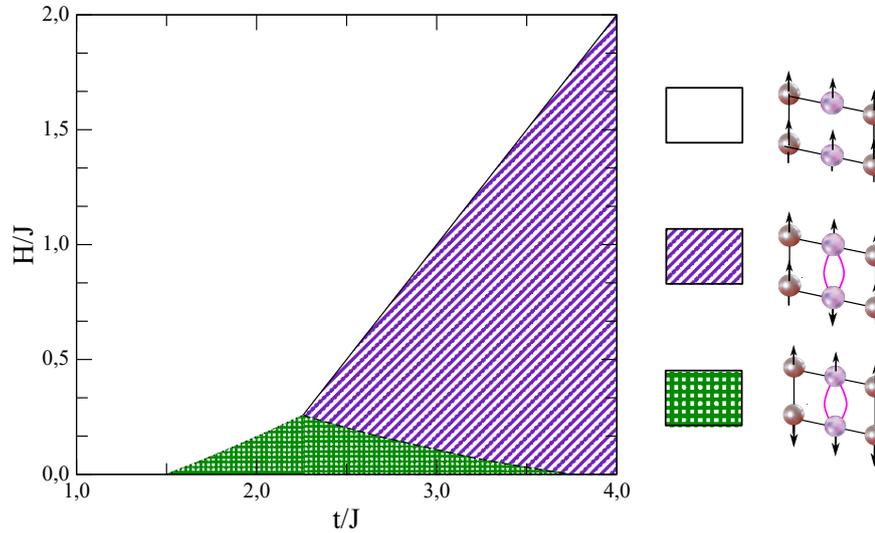
$$\begin{aligned} E_I = E_{III} &= -4J - 4H - \phi = \phi - \sqrt{16J^2 + 4t^2} \\ 4J + 4H + 2\phi &= \sqrt{16J^2 + t^2} \\ 4H^2 + \phi^2 + 8JH + 4J\phi + 4H\phi &= t^2 \end{aligned}$$

$$4 \left(\frac{H}{J} \right)^2 + 10 \frac{H}{J} + \frac{9}{4} = \left(\frac{t}{J} \right)^2; \quad (4.6)$$

$$\begin{aligned} E_{II} = E_{III} &= -2t - \phi - 2H = \phi - \sqrt{16J^2 + 4t^2} \\ t + \phi + H &= \sqrt{4J^2 + t^2} \\ t^2 + \phi^2 + H^2 + 2t\phi + 2tH + 2\phi H &= 4J^2 + t^2 \end{aligned}$$

$$\left(\frac{H}{J} \right)^2 + 2 \left(\frac{t}{J} \right) \left(\frac{H}{J} \right) + \frac{t}{J} + \frac{H}{J} = \frac{15}{4}. \quad (4.7)$$

Figura 9 – Diagrama de Fases do Estado fundamental do sistema para $\phi/J = 1/2$. A região em branco representa a fase ferromagnética (F), a região roxa com linhas diagonais representa a fase paramagnética não-saturada (P), e a região verde com linhas cruzadas representa a fase antiferromagnética (AF).



Fonte: Elaborado pela autora, 2024.

Para $\phi/J = 1/2$, o sistema possui três possíveis configurações de fase no estado fundamental, dependendo dos parâmetros de campo magnético e amplitude de hopping t do sistema. Na fase Ferromagnética (região branca do diagrama), os 4 spins de Ising e os 2 spins itinerantes se encontram paralelos ao campo externo. Na fase Paramagnética não-saturada (região roxa com linhas diagonais do diagrama), os 4 spins de Ising e um dos spins itinerantes estão paralelos ao campo externo. Por fim, na fase Antiferromagnética (região verde com linhas cruzadas), os spins de Ising e o elétron itinerante de uma única cadeia da escada estão paralelos ao campo externo.

Mais recentemente, foi considerada insatisfatória a descrição "paramagnética não saturada" da fase descrita na região roxa do diagrama de fases. A razão para isso será ressaltada na seção de Propriedades Termodinâmicas, mas a nomenclatura foi mantida nesse trabalho para alinhamento com o estudo de origem.

Observe que, para valores elevados de campo e pequenos valores de hopping, a fase ferromagnética predomina. Por outro lado, no regime de maiores valores de hopping, tem-se o domínio da fase paramagnética. A fase antiferromagnética é predominante da região de menores valores de campo e numa região intermediária da amplitude de hopping. De fato, Carvalho e colaboradores mostraram que para valores maiores da interação entre os sítios das "pernas" da escada, ou seja, para valores maiores de ϕ/J , a fase antiferromagnética é suprimida, enquanto a fase paramagnética é favorecida.

Após a obtenção do Diagrama de Fases do modelo, foi considerado interessante estu-

dar outras quantidades termodinâmicas do sistema em determinadas amplitudes de hopping. Os valores escolhidos foram $t/J = 1.0$, $t/J = 2.0$, $t/J = 3.0$ e $t/J = 4.0$ pelos três últimos apresentarem transições de fase que podem indicar comportamentos interessantes na entropia. No entanto, a fim de ser possível realizar essa análise, foi necessário primeiramente mapear o nosso modelo em termos de uma solução bem conhecida.

4.2 Transformação Decoração-Interação

A fim de mapear o nosso modelo em termos de um modelo de solução conhecida, utilizamos transformações algébricas. Nesse trabalho, foi usada a Transformação Iteração-Decoração.

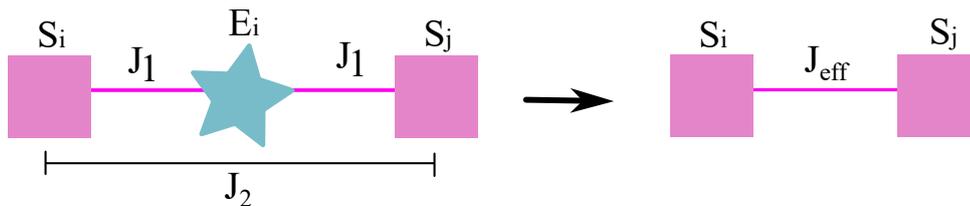
Utilizando a Técnica de Transformação Iteração-Decoração, podemos relacionar a conhecida função de partição de uma escada de Ising de dois ramos com a função do modelo decorado através de parâmetros efetivos.

Essa transformação foi introduzida por Syosi (Syosi 1951), e estendida para o caso da presença de um campo externo por Naya (Naya 1954). Por fim, Fisher (Fisher 1959) generalizou a Transformação Iteração-Decoração para o caso em que o elemento decorador fosse qualquer sistema físico.

4.2.1 Cadeia 1D de Ising com um sítio intersticial decorador

A fim de contextualizar o procedimento que iremos realizar em nosso modelo, inicialmente analisamos uma cadeia decorada formada por spins nodais de Ising, cujo elemento decorador é um sítio contendo um único spin que pode adotar valores ± 1 . A interação entre os sítios nodais (ocupados por spins tipo Ising) e o spin decorador é J_1 . Além disso, consideramos uma interação de troca J_2 , direta entre os spins nodais, conforme mostrado na Figura 10.

Figura 10 – Representação do modelo de cadeia de spins, onde os sítios nodais (S_i e S_j) são ocupados por spins Ising localizados. Os sítios intersticiais (E_i) podem ser ocupados por um spin ± 1 . Os spins nodais com os sítios intersticiais com uma interação de troca J_1 , e interagem entre si com uma interação de troca J_2 . Após a Transformação, o elemento decorador é representado como uma interação efetiva J_{eff} entre os spins nodais.



Fonte: Elaborado pela autora, 2024.

Sob a influência de um campo magnético externo H , o Hamiltoniano do modelo pode ser escrito da seguinte forma:

$$\mathcal{H}(S_i, S_j, E_i, H) = -J_1 E_i S_i - J_1 E_i S_j - J_2 S_i S_j - \frac{H}{2}(S_i + S_j) - H E_i. \quad (4.8)$$

O mapeamento via transformação Iteração-Decorção permite obter a constante de proporcionalidade A , o acoplamento efetivo J_{eff} e o campo efetivo H_{eff} que agem sobre a cadeia. Seguindo o protocolo da Transformação de Decorção-Iteração, fazemos a igualdade entre os fatores de Boltzmann do modelo com ligação efetiva e os fatores de Boltzmann do modelo decorado, através da soma sobre todos os possíveis estados do elemento decorador. Assim, podemos obter a interação efetiva J_{eff} entre os spins de Ising.

$$e^{\beta J_{eff}} = \frac{\left[\left(e^{-\beta(-2J_1 - J_2 - 2H)} + e^{-\beta(2J_1 - J_2)} \right) \cdot \left(e^{\beta(2J_1 - J_2)} + e^{\beta(-2J_1 - J_2 + H)} \right) \right]^{1/4}}{\left[e^{\beta(J_2 - H)} + e^{\beta(J_2 + H)} \right]^{1/2}}. \quad (4.9)$$

Após alguma álgebra, chegamos a:

$$J_{eff} = \frac{1}{\beta} \cdot \left[\left(\frac{e^{2\beta J_2}}{2 \cosh(\beta H)} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot (2 \cosh(2\beta H) + 2 \cosh(4\beta J_1)) \right]^{\frac{1}{4}}. \quad (4.10)$$

Analogamente, pode-se determinar o campo efetivo do modelo da seguinte maneira:

$$e^{2\beta H_{eff}} = \frac{e^{-\beta(-2J_1 - J_2 - 2H)} + e^{-\beta(2J_1 - J_2)}}{e^{-\beta(2J_1 - J_2)} + e^{-\beta(-2J_1 - J_2 + H)}} \quad (4.11)$$

$$H_{eff} = \frac{1}{2\beta} \cdot \ln \left(\frac{1 + e^{\beta(2J_1 + J_2 + 2H)}}{1 + e^{\beta(2J_1 + J_2 - 2H)}} \right). \quad (4.12)$$

Adicionalmente, determinamos a constante de normalização do modelo, dada por:

$$A = \left[\left(e^{-\beta(-2J_1 - J_2 - 2H)} + e^{-\beta(2J_1 - J_2)} \right) \cdot \left(e^{-\beta(2J_1 - J_2)} + e^{-\beta(-2J_1 - J_2 + H)} \right) \right]^{\frac{1}{4}} \cdot \left[e^{-\beta(J_2 - H)} + e^{-\beta(J_2 + H)} \right]^{\frac{1}{2}},$$

que nos leva a:

$$A = [2 \cosh(2\beta H) + 2 \cosh(4\beta J_1)]^{\frac{1}{4}} \cdot [2 \cosh(\beta H)]^{\frac{1}{2}}. \quad (4.13)$$

Observe que usando esse método é possível determinar a função de partição e, portanto, toda a termodinâmica do modelo decorado, a partir da conhecida função de partição do modelo de Ising unidimensional com parâmetros efetivos.

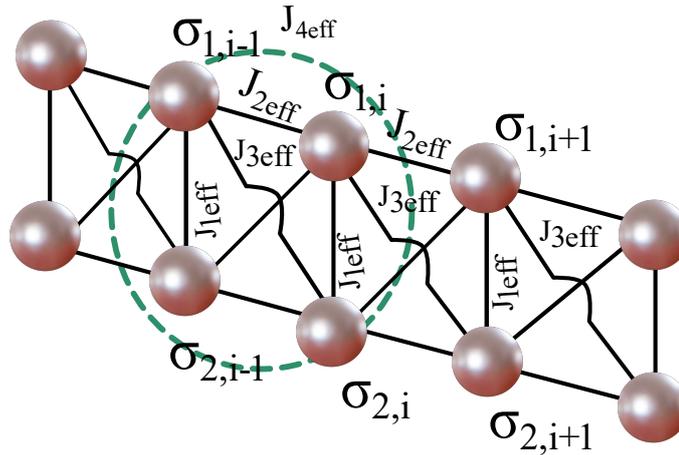
4.2.2 Cadeia dupla de spins de Ising com parâmetros efetivos

Utilizando a Transformação Iteração-Decoração no modelo da Figura 6, portanto, é possível escrever o Hamiltoniano a partir dos seguintes parâmetros efetivos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{i=1}^N \left[-J_{1eff}/2(\sigma_{1,i}\sigma_{2,i} + \sigma_{1,i+1}\sigma_{2,i+1}) - J_{2eff}(\sigma_{1,i}\sigma_{1,i+1} + \sigma_{2,i}\sigma_{2,i+1}) \right. \\ & - J_{3eff}(\sigma_{1,i}\sigma_{2,i+1} + \sigma_{2,i}\sigma_{1,i+1}) - J_{4eff}(\sigma_{1,i}\sigma_{1,i+1}\sigma_{2,i}\sigma_{2,i+1}) \\ & \left. - H_{eff1}/2(\sigma_{1,i} + \sigma_{2,i} + \sigma_{1,i+1} + \sigma_{2,i+1}) \right. \\ & \left. - H_{eff2}(\sigma_{1,i}\sigma_{1,i+1}\sigma_{2,i} + \sigma_{1,i}\sigma_{2,i}\sigma_{2,i+1} + \sigma_{1,i}\sigma_{1,i+1}\sigma_{2,i+1} + \sigma_{2,i}\sigma_{2,i+1}\sigma_{1,i+1}) \right] \end{aligned} \quad (4.14)$$

Assim, o sistema é reduzido à seguinte configuração, de resolução exata bem estabelecida na literatura (Links e Foerster 2000, Vekua 2003):

Figura 11 – Representação gráfica de uma cadeia de spins do tipo escada de dois ramos com parâmetros de interação efetivos.



Fonte: Elaborado pela autora, 2024.

J_{1eff} é a interação efetiva entre spins correspondentes em diferentes ramos da escada. J_{2eff} é o parâmetro de acoplamento efetivo entre dois spins vizinhos de uma mesma cadeia, mediado pelos elétrons itinerantes que decoram o sistema. J_{3eff} é a interação efetiva entre spins "diagonais" que estão em cadeias opostas. J_{4eff} é o parâmetro de interação efetiva entre quatro spins de uma plaqueta. Além disso, H_{eff1} representa o campo magnético que interage individualmente com cada spin, e H_{eff2} retém as propriedades das interações do campo magnético efetivo com cada trio de spins possível.

Assim, temos as seguintes equações para os parâmetros efetivos do sistema.

$$Ae^{-\beta(-J_{1eff}-2J_{2eff}-2J_{3eff}-J_{4eff}-2H_{1eff}-4H_{2eff})} = [e^{-\beta(-4J-4H)} + e^{-4\beta J} + 2e^{2\beta H} (1 + \cosh(2\beta t))] e^{\beta\phi};$$

$$Ae^{-\beta(-J_{1eff}-2J_{2eff}-2J_{3eff}-J_{4eff}+2H_{1eff}+4H_{2eff})} = e^{-\beta(-4J+4H)} + e^{-4\beta J} + 2e^{-2\beta H} [1 + \cosh(2\beta t)] e^{\beta\phi};$$

$$\begin{aligned}
 Ae^{-\beta(J_{4eff}-H_{1eff}+2H_{2eff})} &= e^{-\beta(-2J-3H)} + e^{-\beta(2J+H)}; \\
 Ae^{-\beta(J_{4eff}+H_{1eff}-2H_{2eff})} &= e^{-\beta(2J-H)} + e^{\beta(2J-3H)} + 2e^{-\beta H[1+\cosh(2\beta\sqrt{J^2+t^2})]}; \\
 Ae^{-\beta(J_{1eff}-2J_{2eff}-2J_{3eff}-J_{4eff})} &= 2e^{-\beta\phi}[\cosh(2\beta H) + 1 + \cosh(2\beta\sqrt{16J^2+4t^2})]; \\
 Ae^{-\beta(-J_{1eff}+2J_{2eff}+2J_{3eff}-J_{4eff})} &= 2e^{\beta\phi}[\cosh(2\beta H) + 1 + \cosh(2\beta t)]; \\
 Ae^{-\beta(J_{1eff}+2J_{2eff}-2J_{3eff}-J_{4eff})} &= 2e^{-\beta\phi}[\cosh(2\beta H) + 1 + \cosh(2\beta t)]. \quad (4.15)
 \end{aligned}$$

Utilizando o software computacional Maple 2019, foram então obtidas as soluções para esses parâmetros efetivos.

$$\begin{aligned}
 J_{1eff} &= 2J_{3eff} + \phi; \\
 J_{2eff} &= -\frac{H_{1eff} + 2H_{2eff}}{4} + \frac{1}{8\beta} \ln\left(\frac{x_0 x^2}{2x_3^2}\right); \\
 J_{3eff} &= -\frac{H_{1eff} + 2H_{2eff}}{4} + \frac{1}{8\beta} \ln\left(\frac{x_0}{2x_2}\right); \\
 J_{4eff} &= \frac{H_{1eff} - 6H_{2eff}}{4} + \frac{1}{8\beta} \ln\left(\frac{8x_0 x_2 x_3}{x_1^4}\right); \\
 H_{eff1} &= \frac{1}{8\beta} \ln\left[\left(\frac{x_0}{x_4}\right) \left(\frac{x_1}{x_5}\right)^2\right]; \\
 H_{eff2} &= \frac{1}{16\beta} \ln\left[\left(\frac{x_0}{x_4}\right) \left(\frac{x_5}{x_1}\right)^2\right]; \quad (4.16)
 \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
 x_0 &= e^{4\beta(J+H)} + e^{-4\beta J} + 2e^{2\beta H}[1 + \cosh(2\beta t)]; \\
 x_1 &= e^{\beta(2J+3H)} + e^{-\beta(2J+H)} + 2e^{\beta H}[1 + \cosh(2\beta\sqrt{J^2+t^2})]; \\
 x_2 &= \cosh(2\beta H) + 1 + \cosh(2\beta\sqrt{J^2+t^2}); \\
 x_3 &= \cosh(2\beta H) + 1 + \cosh(2\beta t); \\
 x_4 &= e^{4\beta(J-H)} + e^{-4\beta J} + 2e^{-2\beta H}[1 + \cosh(2\beta t)]; \\
 x_5 &= e^{\beta(2J+H)} + e^{-\beta(2J-H)} + 2e^{-\beta H}[1 + \cosh(2\beta\sqrt{J^2+t^2})]. \quad (4.17)
 \end{aligned}$$

A função de partição, portanto, é obtida como:

$$Z = \sum_{\text{estados}} \exp(-\beta E_{\text{estados}}). \quad (4.18)$$

Utilizando o método de Matriz Transferência, é possível escrever a função de partição como o traço da matriz de transferência L que diagonaliza o Hamiltoniano. Assim,

$$Z = \text{Tr}(L)^N. \quad (4.19)$$

4.3 Propriedades Termodinâmicas

Sendo conhecida a função de partição do nosso sistema com parâmetros efetivos, é possível obter propriedades termodinâmicas importantes. Considerando o acoplamento ferromagnético entre cadeias da escada $\phi/J = 1/2$, foram usados conceitos de mecânica estatística para obter numericamente as curvas de suscetibilidade magnética e calor específico do modelo.

Inicialmente, vamos relembrar a análise da curva de magnetização. A Figura 12 mostra a dependência da magnetização m total por célula com o campo externo H para $\phi/J = 1/2$, e para diferentes valores de temperatura T e quatro valores representativos da amplitude de hopping t/J . Observe que para $t/J = 1.0$, que representa a fase ferromagnética a campo nulo, a magnetização em $k_B T/J = 0.0$ tem valor máximo igual a 4, já que nessa fase todos os spins estão alinhados com o campo.

Para $t/J = 2.0$, sob o mesmo regime de temperatura, observa-se uma transição da fase antiferromagnética (que tem magnetização nula para pequenos valores de campo) para a fase ferromagnética (onde a magnetização tem maior valor). Por outro lado, para $t/J = 3.0$ e $t/J = 4.0$ é possível observar um platô $1/2$ em seu valor igual a 2, onde a magnetização não responde ao acréscimo do campo externo até esse acréscimo atingir um valor crítico que corresponde à transição da fase paramagnética para fase ferromagnética. Em todas as situações, as curvas são suavizadas devido a flutuações térmicas.

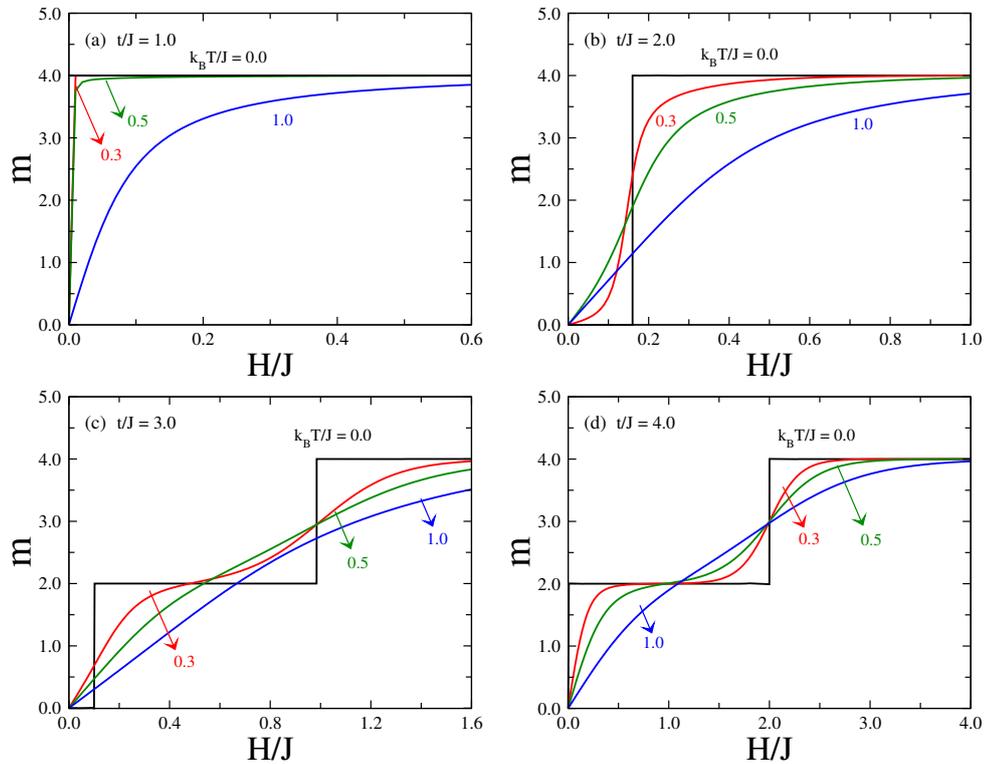
É interessante ressaltar que, atualmente, a nomenclatura da fase *paramagnética não-saturada* é observada como insatisfatória para descrever a fase magnética do material, visto que a magnetização resultante deveria tender a zero, e não exibir esse platô de magnetização $1/2$. No entanto, a fim de alinhamento com o trabalho de origem, manteremos essa nomenclatura. Uma nomenclatura mais apropriada a ser adotada em periódicos futuros seria uma fase *ferromagnética não-saturada*.

Em seguida, foi investigada a suscetibilidade magnética do modelo quando com um acoplamento ferromagnético. Devemos lembrar que

$$\chi = k_B T \left(\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial H^2} \right)_T. \quad (4.20)$$

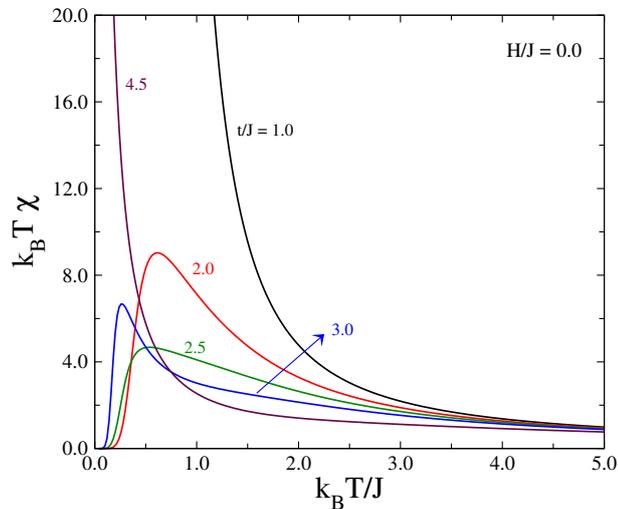
Na Figura 13, vemos o comportamento da suscetibilidade magnética χ com a temperatura T , para diferentes valores de hopping t e $\phi/J = 1/2$, como na análise anterior. É observado o comportamento típico da suscetibilidade para cada uma das fases do diagrama de fases. Assim, para $t/J = 1.0$ temos a divergência comum da fase ferromagnética em regime de baixa temperatura. Para $t/J = 2.0$ e $t/J = 3.0$, o estado fundamental é antiferromagnético. Por isso, temos $\chi = 0$ quando $k_B T/J \rightarrow 0$, e o valor da suscetibilidade aumenta com a temperatura, atingindo um valor máximo que decai gradativamente devido às flutuações térmicas. Para $t/J = 4.5$, o estado fundamental também resulta numa suscetibilidade divergente em baixas temperaturas.

Figura 12 – Magnetização total m por célula em função do campo H aplicado para diferentes valores de temperatura e $\phi/J = 1/2$. Aqui foram analisados quatro diferentes valores para a amplitude de hopping. Em (a) $t/J = 1.0$, (b) $t/J = 2.0$, (c) $t/J = 3.0$ e (d) $t/J = 4.0$. Os estados fundamentais correspondentes aos valores de magnetização 0, 2 e 4 são, respectivamente, antiferromagnético (AF), paramagnético não saturado (P) e ferromagnético (F).



Fonte: Elaborado pela autora, 2024.

Figura 13 – Dependência térmica da Susceptibilidade para diferentes valores de hopping t e $\phi/J = 1/2$. Aqui $H/J = 0.0$.

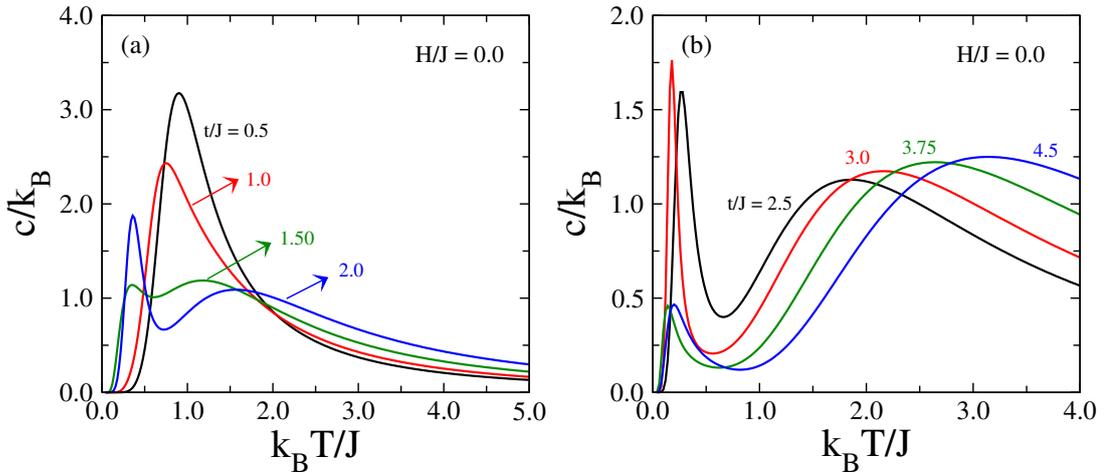


Fonte: Elaborado pela autora, 2024.

Também foi analisado o calor específico. Para alguns valores representativos do parâmetro de hopping e $\phi/J = 1/2$, essa dependência do calor específico com a temperatura, em $H/J = 0.0$, é mostrada na Figura 14. O que se observa aqui é que, à medida que t aumenta, a curva nula, a curva do calor específico mostra uma estrutura de pico duplo que não aparece para $t/J = 1.0$, onde a fase fundamental é a ferromagnética (ver Figura 14 (a)).

De fato, nesta fase temos um único pico no calor específico. A existência desse pico na ausência de uma transição de fase pode ser atribuída à anomalia de Schottky (Holanda et al. 2020, Borges e Bezerra 2010), devido a uma banda de energia limitada no nosso material. Além disso, (Souza et al. 2016) quanto maior a razão entre a degenerescência do estado excitado e a degenerescência do estado fundamental, maior é a magnitude do pico apresentado na curva do calor específico. Como mostrado na Figura 14 (b), para valores de hopping referentes aos estados frustrados, há a ocorrência de dois picos na curva do calor específico, cuja amplitude parece ser independente do valor t/J .

Figura 14 – Dependência do Calor Específico com a temperatura para diferentes valores de hopping e $\phi/J = 1/2$. Em (a) $t/J = 0.5$, $t/J = 1.0$, $t/J = 1.5$ e $t/J = 2.0$. Em (b) $t/J = 2.5$, $t/J = 3.0$, $t/J = 3.75$ e $t/J = 4.5$.



Fonte: Elaborado pela autora, 2024.

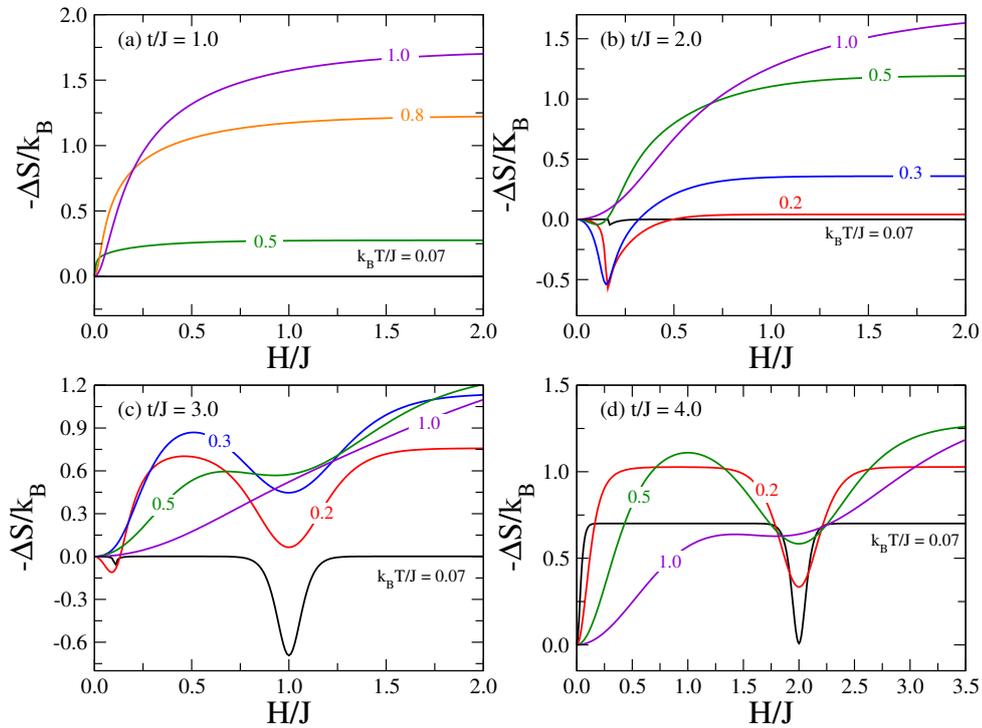
Além disso, foram obtidas a dependência magnetoentrópica tanto da temperatura quanto do campo magnético (Carvalho 2016) e observar as curvas de variação de entropia, isoentropia e taxa magnetocalórica do sistema para diferentes amplitudes do termo quântico de hopping para os sítios itinerantes.

4.4 Efeito Magnetocalórico

Como discutido anteriormente, o efeito magnetocalórico pode ser estimado através da variação da entropia na transformação isotérmica ΔS_M e da variação da temperatura adiabática ΔT_{ad} , também conhecida como taxa magnetocalórica.

Inicialmente, vamos analisar a variação da entropia. Na transformação isotérmica, com o aumento do campo magnético, a variação da entropia magnética é negativa, já que o campo magnético tende a reduzir a desordem do sistema. Dessa forma, através da expressão $-\Delta S/k_B = -[S(T, H) - S(T, 0)]/k_B$, analisamos a dependência térmica da variação da entropia quando o campo magnético é aplicado, para quatro valores representativos da amplitude de hopping, conforme mostra a Figura 15.

Figura 15 – Variação da entropia $-\Delta S/k_B$ em função do campo magnético para $\phi/J = 1/2$, para diferentes valores de temperatura $k_B T/J$. Em (a) $t/J = 1.0$, (b) $t/J = 2.0$, (c) $t/J = 3.0$ e (d) $t/J = 4.0$. O valor negativo é utilizado para se observar a magnitude da variação.



Fonte: Elaborado pela autora, 2024.

Como para $t/J = 1.0$ não ocorre transição de fase no sistema, no limite de temperaturas baixas (linha preta) a variação de entropia é nula. Com o aumento da temperatura, a variação da entropia também aumenta. No entanto, por conta das propriedades de origem quântica do sistema, para os outros valores da amplitude de hopping nos quais são observadas transições de fase, são observados tanto picos quanto platôs na variação de entropia, até mesmo no limite de baixas temperaturas.

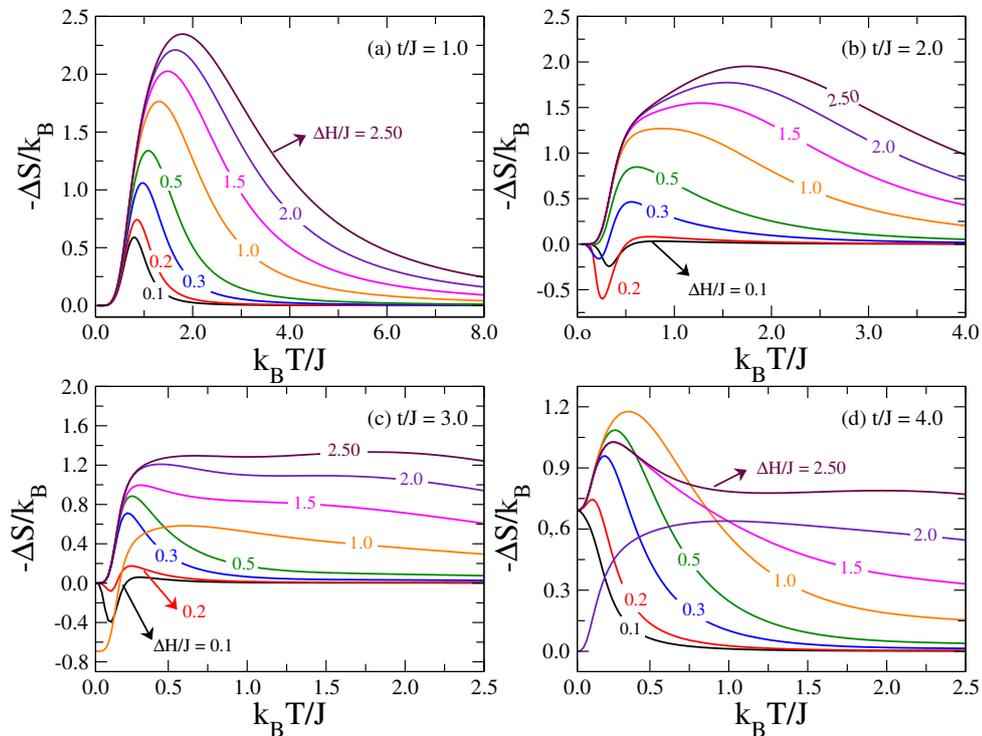
Em altas temperaturas, é predominante o Efeito Magnetocalórico Normal ($-\Delta S > 0$). São observados platôs na variação da entropia, com ocasionais picos nas regiões de campo crítico, onde é observado maior MCE pela variação de temperatura eficiente nas proximidades desses valores de campo.

Por outro lado, para valores intermediários de hopping, para $t/J = 2.0$ e $t/J = 3.0$ (ver

Figura 15 (b) e (c)), por exemplo, é observado um Efeito Magnetocalórico Inverso ($-\Delta S < 0$) em pequenas temperaturas nas proximidades dos valores críticos do campo magnético para cada amplitude de hopping. Quando $t/J = 4.0$, é observado apenas o MCE normal.

Adicionalmente, foram obtidas as curvas de variação da entropia isotérmica em função da temperatura para diferentes valores fixos da variação de campo magnético e amplitude de hopping t , ilustradas na Figura 16.

Figura 16 – Variação isotérmica da entropia $-\Delta S/k_B$ em função da temperatura T para ϕ/J , diferentes variações de campo magnético aplicado $\Delta H/J$. Em (a) $t/J = 1.0$, (b) $t/J = 2.0$, (c) $t/J = 3.0$ e (d) $t/J = 4.0$. O valor negativo é utilizado para se observar a magnitude da variação.



Fonte: Elaborado pela autora, 2024.

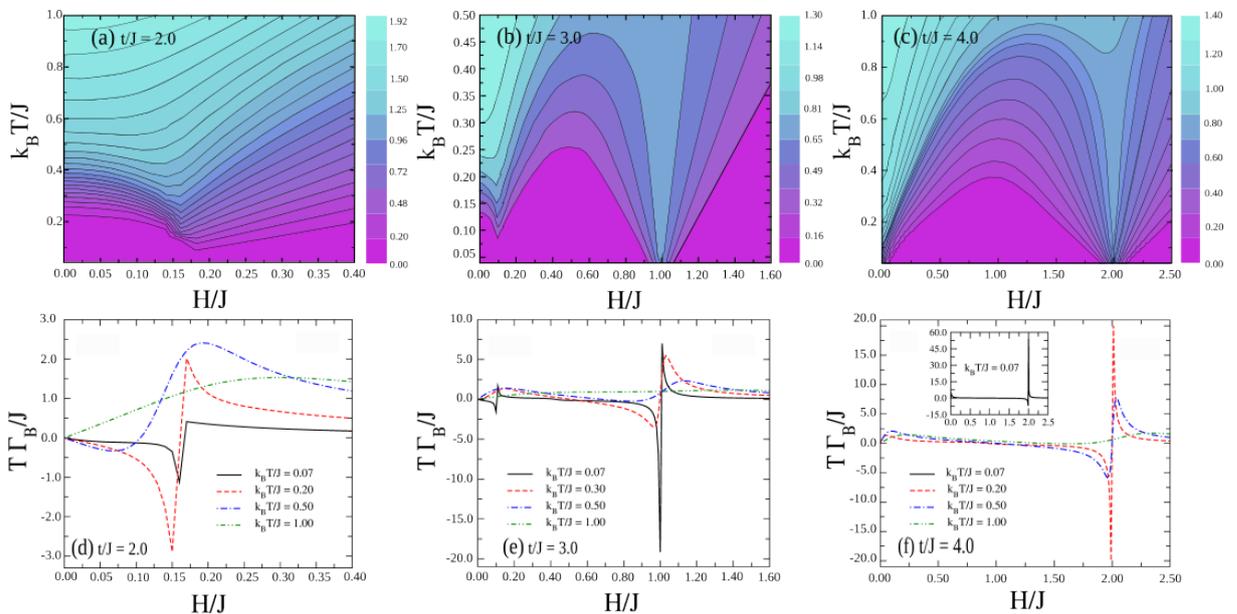
As características do MCE no sistema também podem ser observadas ao se analisar graficamente a variação isotérmica da entropia em função da temperatura, outra quantidade que pode ser obtida experimentalmente. É observado que, ao crescer a variação do campo magnético, há um aumento do valor máximo da variação da entropia, e também no valor absoluto da temperatura onde esse máximo acontece. Para $t/J = 2.0$ e $t/J = 3.0$ (ver Figuras 16 (b) e (c)), é observado um Efeito Magnetocalórico Inverso, para pequenas variações do campo magnético e no regime de baixas temperaturas. Mais especificamente, para os parâmetros nos quais o sistema está em um regime antiferromagnético (Carvalho 2016, Carvalho et al. 2017).

Considerando esses últimos três valores de t , foram obtidas as curvas de isoentropia da Figura 17. Elas permitem a observação de profundas quedas de temperatura em função de um

campo externo H para determinados valores críticos de campo magnético aplicado. Esses campos são os mesmos onde são observados picos nas curvas da taxa magnetocalórica e depressões nas curvas de variação da entropia (Gomes et al. 2019).

Nos gráficos da taxa magnetocalórica (Figuras 17(d), (e) e (f)) também é possível observar a transição do comportamento da curva de vale-pico característico do regime antiferromagnético para o comportamento mais suavizado da curva após o aumento da temperatura.

Figura 17 – (painel superior) Curvas de isoentropia com a temperatura $k_B T/J$ em função do campo magnético externo H/J para os valores do parâmetro de hopping a) $t/J = 2.0$, b) $t/J = 3.0$ e c) $t/J = 4.0$. (painel inferior) Taxa Magnetocalórica $T \Gamma_B/J$ para 4 valores de temperatura em função do campo magnético externo H/J para os valores do parâmetro de hopping e) $t/J = 2.0$, f) $t/J = 3.0$ e g) $t/J = 4.0$. Observe a suavização nas curvas ao longo do aumento da temperatura.



Fonte: Elaborado pela autora, 2024.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Como visto nesse trabalho de conclusão de curso, a literatura da área mostra que modelos de spins exatamente solúveis desempenham um papel importante no estudo do magnetismo, pois podem colaborar no entendimento de diversos aspectos de sistemas interagentes, particularmente que apresentam transições de fase e fenômenos críticos. Em particular, modelos decorados em que o elemento decorador é um dímero quântico, colocado entre spins de Ising formando diferentes geometrias têm atraído um interesse renovado. Isso se deve ao fato de que o termo cinético associado à mobilidade dos elétrons intersticiais, que compõe os dímeros, produz correlações antiferromagnéticas que levam às interações frustradas. Tais sistemas apresentam propriedades físicas bem interessantes, bem como um pronunciado efeito magnetocalórico, de suma importância em aplicações para refrigeração magnética (Zhang et al. 2021).

Por outro lado, desde que Aharony et. al. (Korenblit, Aharony e Entin-Wohlman 1999) sugeriram que os efeitos da frustração também desempenham papel importante na explicação da supercondutividade em altas temperaturas em cerâmicas a base de cobre, vários trabalhos foram realizados a fim de aprofundar os conhecimentos gerais da comunidade científica sobre o tema.

Particularmente, os modelos de escadas de spins desempenham um papel de destaque nessa área, sobretudo depois da descoberta da supercondutividade no composto escada de duas cadeias sobre pressão. De fato, esse sistema é o primeiro material supercondutor de óxido de cobre com uma rede não quadrada (Uehara et al. 1996). Com o intuito de melhor entender as propriedades termodinâmicas e possível efeito magnetocalórico num modelo escada de spins, esse trabalho de conclusão de curso revisitou o estudo de Carvalho e colaboradores (Carvalho et al. 2017). Nesse trabalho, os autores introduziram um modelo de escada de spins híbridos constituído de spins Ising nodais e spins intersticiais móveis que reproduz alguns aspectos dos sistemas escada de presentes em cerâmicas supercondutoras. O processo de hopping dos spins móveis induz um acoplamento antiferromagnético entre as cadeias da escada que compete com o acoplamento ferromagnético entre os spins nodais. Essa competição leva ao surgimento de correlações de spins em temperaturas finitas.

O diagrama de fase do modelo foi obtido de forma exata, e três fases foram observadas para os parâmetros utilizados. De fato o hopping ou salto quântico entre as 'pernas' da escada reforça um acoplamento antiferromagnético entre os spins nodais que compete com a interação ferromagnética direta entre esses spins. Em nossa reprodução, confirmamos que uma fase antiferromagneticamente se desenvolve em campos magnéticos baixos e amplitudes de hopping intermediárias. À medida que o campo magnético aumenta, esta fase antiferromagnética é suprimida.

Além disso, investigamos algumas propriedades termodinâmicas como calor específico e susceptibilidade, bem como o processo de magnetização do sistema. Assim como no trabalho original, as curvas de magnetização mostraram platôs, associados às transições de fase do estado fundamental. Esses platôs são suavizados à medida que a temperatura aumenta. Por outro lado

as curvas de calor específico mostraram um pico de temperatura baixa para parâmetros físicos onde o sistema se encontra nas proximidades de uma transição de fase do estado fundamental. Da mesma forma, o comportamento da susceptibilidade em baixas temperaturas também reflete os diferentes estados fundamentais.

Por fim, também reproduzimos os resultados para o efeito magnetocalórico do modelo. Em particular, nessa análise, nós investigamos as curvas de isoentropia que não foram discutidas no trabalho original. As análises da variação da entropia magnética tanto em função do campo quanto em função da temperatura mostram a presença de um efeito magnetocalórico inverso no regime intermediário da amplitude de hopping, onde a fase antiferromagnética predomina. Tal comportamento é confirmado nas curvas de isoentropia e taxa magnetocalórica. De fato, as curvas da taxa magnetocalórica apresentam estruturas bem definidas de pico de vale nas proximidades dos campos críticos, uma característica bem vinda para o desenvolvimento de ciclos de refrigeração utilizando materiais magnéticos como substância ativa.

Por fim, nossa investigação ratifica que a frustração em sistemas de spin de baixa dimensão está geralmente associada à possibilidade de atingir grandes taxas de refrigeração magnetocalórica. Esses modelos de spins híbridos com topologia escada parecem ser uma classe interessante de sistemas magnéticos de baixa dimensão, com confiáveis realizações experimentais nas quais as previsões teóricas disponíveis podem ser testadas. Esperamos que os presentes resultados possam motivar novos estudos nessa direção (Wolf et al. 2014, Silva e Almeida 2021).

REFERÊNCIAS

1958 WOLF, Bernd and Honecker, Andreas and Hofstetter, Walter and Tutsch, Ulrich and Lang, Michael. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, v. 244, n. 1236, p. 1–16, fev. 1958. ISSN 0080-4630, 2053-9169. Disponível em: <<https://royalsocietypublishing.org/doi/10.1098/rspa.1958.0022>>. Citado na página 23.

2007 *NobelPrize.org*, Oct 2007. Disponível em: <<https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2007/press-release/>>. Citado na página 17.

Agliari, Burioni e Contucci 2010 AGLIARI, E.; BURIONI, R.; CONTUCCI, P. A diffusive strategic dynamics for social systems. *Journal of Statistical Physics*, v. 139, n. 3, p. 478–491, maio 2010. ISSN 0022-4715, 1572-9613. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/s10955-010-9948-1>>. Citado na página 20.

Almanza, LoBue e Lebouc 2023 ALMANZA, M.; LOBUE, M.; LEBOUc, A. Réfrigération magnétique: des principes fondamentaux aux applications. *Conversion de l'énergie électrique*, jun. 2023. Disponível em: <<https://www.techniques-ingenieur.fr/doi/10.51257/a/v2/re28>>. Citado na página 10.

Balli et al. 2014 BALLI, M. et al. Anisotropy-enhanced giant reversible rotating magnetocaloric effect in HoMn2O5 single crystals. *Applied Physics Letters*, v. 104, n. 23, p. 232402, 06 2014. ISSN 0003-6951. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.4880818>>. Citado na página 17.

Barbara 2019 BARBARA, B. Louis néel: His multifaceted seminal work in magnetism. *Comptes Rendus Physique 2019-nov vol. 20 iss. 7-8*, v. 20, nov 2019. Disponível em: <<libgen.li/file.php?md5=61b3654676908917817b86bdd971ebb6>>. Citado na página 16.

Baxter 1982 BAXTER, R. *Exactly solved models in statistical mechanics*. illustrated edition. Academic Press, 1982. ISBN 0120831805; 9780120831807. Disponível em: <<libgen.li/file.php?md5=674064d2f1e931f982c237cd9eb85590>>. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 22.

Berry e Geim 1997 BERRY, M. V.; GEIM, A. K. Of flying frogs and levitrons. *European Journal of Physics*, v. 18, n. 4, p. 307–313, jul. 1997. ISSN 0143-0807, 1361-6404. Disponível em: <<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0143-0807/18/4/012>>. Citado na página 13.

Bertram 1994 BERTRAM, H. N. *Theory of Magnetic Recording*. 1. ed. Cambridge University Press, 1994. ISBN 9780521445122. Disponível em: <<https://www.cambridge.org/core/product/identifler/9780511623066/type/book>>. Citado na página 10.

Bitter 1938 BITTER, F. A generalization of the theory of ferromagnetism. *Physical Review (Series I) 1938-jul 01 vol. 54 iss. 1*, v. 54, jul 1938. Disponível em: <<libgen.li/file.php?md5=7a10365cd77676807ca9b4ee7e0a8841>>. Citado na página 16.

Borges e Bezerra 2010 BORGES, F. A. de S.; BEZERRA, C. G. Consequências termodinâmicas da quasiperiodicidade em sistemas magnéticos de spins localizados. *Revista Pública*, v. 5, n. 1, jan. 2010. Disponível em: <<https://periodicos.ufrn.br/publica/article/view/87>>. Citado na página 37.

Bray et al. 1983 BRAY, J. W. et al. The spin-peierls transition. In: _____. *Extended Linear Chain Compounds: Volume 3*. Boston, MA: Springer US, 1983. p. 353–415. ISBN 978-1-4684-4175-8. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-1-4684-4175-8_7>. Citado na página 23.

Brugmans 1778 BRUGMANS, A. *Antonii Brugmans Magnetismus, seu, De affinitatibus magneticis observationes academicæ*. Apud Luzac & Van Damme, 1778. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=Ntke-mqGU2EC>>. Citado na página 13.

Carvalho et al. 2017 CARVALHO, C. P. et al. Ground-state phase diagram, fermionic entanglement and kinetically-induced frustration in a hybrid ladder with localized spins and mobile electrons. *J. Phys.: Condens. Matter*, v. 29, 2017. Citado na página 41.

Carvalho 2016 CARVALHO, R. C. P. Propriedades magnéticas e termodinâmicas de uma cadeia dupla formada por spins híbridos. Aug 2016. Disponível em: <<http://www.repositorio.ufal.br/jspui/handle/riufal/1659>>. Citado 3 vezes nas páginas 26, 37 e 39.

Carvalho et al. 2017 CARVALHO, R. C. P. et al. Ground-state phase diagram, fermionic entanglement and kinetically-induced frustration in a hybrid ladder with localized spins and mobile electrons. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 29, n. 36, p. 365801, aug 2017. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/1361-648X/aa7d61>>. Citado na página 39.

Coelho 2020 COELHO, A. Uma abordagem qualitativa e histórico investigativa sobre o eletromagnetismo. fev. 2020. Disponível em: <<http://educapes.capes.gov.br/handle/capes/564153>>. Citado na página 9.

Dagotto 1994 DAGOTTO, E. Correlated electrons in high-temperature superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 66, p. 763–840, Jul 1994. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.66.763>>. Citado na página 25.

Dagotto 1999 DAGOTTO, E. Experiments on ladders reveal a complex interplay between a spin-gapped normal state and superconductivity. *Reports on Progress in Physics*, v. 62, n. 11, p. 1525, nov 1999. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/62/11/202>>. Citado na página 25.

Dagotto, Riera e Scalapino 1992 DAGOTTO, E.; RIERA, J.; SCALAPINO, D. Superconductivity in ladders and coupled planes. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 45, p. 5744–5747, Mar 1992. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.45.5744>>. Citado na página 25.

de Oliveira e von Ranke 2010 de Oliveira, N.; von Ranke, P. Theoretical aspects of the magnetocaloric effect. *Physics Reports*, v. 489, n. 4, p. 89–159, 2010. ISSN 0370-1573. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157309002907>>. Citado na página 17.

Degauque 1992 DEGAUQUE, J. Magnétisme et matériaux magnétiques : introduction. *Journal de Physique IV (Proceedings)/Le Journal de Physique IV 1992-dec vol. 02 iss. C3*, v. 02, dec 1992. Disponível em: <<libgen.li/file.php?md5=23bcb07f41503c13b03c055e83cf0054>>. Citado na página 17.

Diep 2020 DIEP, H. T. *Frustrated Spin Systems (Third Edition)*. 3. ed. World Scientific, 2020. ISBN 981121414X; 9789811214141. Disponível em: <libgen.li/file.php?md5=a7403a8c303466b79f05eea03e694e3e>. Citado na página 23.

Doria, Pereira e Lyra 2014 DORIA, F.; PEREIRA, M.; LYRA, M. Band-filling driven crossover from ferro to antiferromagnetic order in ising lattices decorated by quantum dimers. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 368, p. 98–104, 2014. ISSN 0304-8853. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885314004661>>. Citado na página 24.

Ewing e Jenkin 1882 EWING, J. A.; JENKIN, H. C. F. Vii. on the production of transient electric currents in iron and steel conductors by twisting them when magnetised or by magnetising them when twisted. *Proceedings of the Royal Society of London*, v. 33, n. 216-219, p. 21–23, 1882. Disponível em: <<https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspl.1881.0067>>. Citado na página 9.

F. 2008 F., R. A. *Paramagnetism*. 2008. Disponível em: <https://www.u-cursos.cl/ingenieria/2008/1/FI76K/1/material_docente/PlataformadeApoyoalaDocenciaPresencial>. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 15.

Faraday 1846 FARADAY, M. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, v. 136, p. 21–40, dez. 1846. ISSN 0261-0523, 2053-9223. Disponível em: <<https://royalsocietypublishing.org/doi/10.1098/rstl.1846.0003>>. Citado na página 13.

Fisher 1959 FISHER, M. E. Transformations of ising models. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 113, p. 969–981, Feb 1959. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.113.969>>. Citado na página 31.

Fortunato 2005 FORTUNATO, S. Monte carlo simulations of opinion dynamics. In: *Complexity, Metastability and Nonextensivity*. Erice, Sicily, Italy: WORLD SCIENTIFIC, 2005. p. 301–305. ISBN 9789812565259. Disponível em: <http://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/9789812701558_0034>. Citado na página 20.

Gadre e Sahu 2022 GADRE, S. R.; SAHU, N. Friedrich hund: A pioneer of quantum chemistry (1896–1997). *Resonance*, v. 27, n. 9, p. 1483–1500, set. 2022. ISSN 0973-712X. Disponível em: <<https://link.springer.com/10.1007/s12045-022-1445-8>>. Citado na página 12.

Geim 1998 GEIM, A. Everyone’s magnetism. *Physics Today*, v. 51, n. 9, p. 36–39, set. 1998. ISSN 0031-9228, 1945-0699. Disponível em: <<https://pubs.aip.org/physicstoday/article/51/9/36/410616/Everyone-s-MagnetismThough-it-seems>>. Citado na página 13.

Gomes et al. 2019 GOMES, G. O. et al. Magnetic grüneisen parameter for model systems. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 100, p. 054446, Aug 2019. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.100.054446>>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 40.

Gopalan, Rice e Sigrist 1994 GOPALAN, S.; RICE, T. M.; SIGRIST, M. Spin ladders with spin gaps: A description of a class of cuprates. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 49, p. 8901–8910, Apr 1994. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.49.8901>>. Citado na página 25.

Guiguzi séc. IV a.C. GUIGUZI. . séc. IV a.C. Disponível em: <<https://www.gutenberg.org/ebooks/7209/pg7209.html>>. Citado na página 9.

Gálisová et al. 2011 GÁLISOVÁ, L. et al. Effect of the on-site interaction on the magnetic properties of an exactly solvable spin–electron system. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 23, n. 17, p. 175602, apr 2011. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/23/17/175602>>. Citado na página 24.

Gómez J.; Ferreiro Garcia 2013 GÓMEZ J.; FERREIRO GARCIA, R. D. M. C. A. R. G. M. R. Magnetocaloric effect: A review of the thermodynamic cycles in magnetic refrigeration. *Renewable and Sustainable Energy Reviews 2013-jan vol. 17*, v. 17, jan 2013. Disponível em: <libgen.li/file.php?md5=05b7f3fbc6a39687c646fd30e25beab8>. Citado na página 17.

Holanda et al. 2020 HOLANDA, L. M. et al. Comportamento magnético de materiais por meio da mecânica estatística. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, FapUNIFESP (SciELO), v. 42, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1590/1806-9126-rbef-2019-0196>>. Citado na página 37.

Ising 1925 ISING, E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, v. 31, n. 1, p. 253–258, fev. 1925. ISSN 0044-3328. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/BF02980577>>. Citado na página 19.

Jiles e Atherton 1984 JILES, D. C.; ATHERTON, D. L. Theory of ferromagnetic hysteresis (invited). *Journal of Applied Physics*, v. 55, n. 6, p. 2115–2120, mar. 1984. ISSN 0021-8979, 1089-7550. Disponível em: <<https://pubs.aip.org/jap/article/55/6/2115/13220/Theory-of-ferromagnetic-hysteresis-invited>>. Citado na página 9.

Kittel 2004 KITTEL, C. *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 2004. ISBN 9780471415268. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=kym4QgAACAAJ>>. Citado na página 15.

Kolano et al. 2016 KOLANO, R. et al. Magnetocaloric cooling device with reciprocating motion of the magnetic field source. *Acta Physica Polonica A*, v. 129, n. 6, p. 1205–1209, jun. 2016. ISSN 0587-4246, 1898-794X. Disponível em: <<http://przyrbwn.icm.edu.pl/APP/PDF/129/a129z6p25.pdf>>. Citado na página 17.

Korenblit, Aharony e Entin-Wohlman 1999 KORENBLIT, I. Y.; AHARONY, A.; ENTIN-WOHLMAN, O. Competing frustration and dilution effects on the antiferromagnetism in $la_{2-x}sr_xcu_{1-z}zn_zo_4$. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 60, p. R15017–R15020, Dec 1999. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.60.R15017>>. Citado na página 41.

Krenke et al. 2005 KRENKE, T. et al. Inverse magnetocaloric effect in ferromagnetic ni–mn–sn alloys. *Nature Materials*, Springer Science and Business Media LLC, v. 4, n. 6, p. 450–454, maio 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nmat1395>>. Citado na página 18.

Kuestler 2007 KUESTLER, G. Diamagnetic levitation - historical milestones. *Revue Roumaine des Sciences Techniques - Serie Électrotechnique et Énergétique*, v. 52, p. 265–282, 07 2007. Citado na página 13.

- Landau 1965 LANDAU, L. D. In: _____. *Collected Papers of L.D. Landau*. Elsevier, 1965. p. 73–76. ISBN 9780080105864. Disponível em: <<https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780080105864500171>>. Citado na página 16.
- Landee et al. 2001 LANDEE, C. P. et al. Magnetic properties of a molecular-based spin-ladder system: $(5\text{IAP})_2\text{CuBr}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 63, p. 100402, Feb 2001. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.63.100402>>. Citado na página 25.
- Links e Foerster 2000 LINKS, J.; FOERSTER, A. Solution of a two-leg spin ladder system. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 62, p. 65–68, Jul 2000. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.62.65>>. Citado na página 33.
- Malarz 2003 MALARZ, K. Social phase transition in solomon network. *International Journal of Modern Physics C*, v. 14, n. 05, p. 561–565, jun. 2003. ISSN 0129-1831, 1793-6586. Disponível em: <<https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0129183103004747>>. Citado na página 20.
- Maxwell 1873 MAXWELL, J. C. *A Treatise on Electricity and Magnetism*. 1. ed. Oxford Clarendon Press, 1873. Disponível em: <<https://www.aproged.pt/biblioteca/MaxwellI.pdf>>. Citado na página 9.
- Morgan 1996 MORGAN, W. K. J. D. Hund's rules. *The European Physical Journal D / Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics 1996-sep vol. 36 iss. 3-4*, v. 36, sep 1996. Disponível em: <libgen.li/file.php?md5=b4f7a42bb719ec682a7c6e249bd727e6>. Citado na página 12.
- Naya 1954 NAYA, S. On the spontaneous magnetizations of honeycomb and kagomé ising lattices. *Progress of Theoretical Physics*, v. 11, n. 1, p. 53–62, jan. 1954. ISSN 0033-068X. Disponível em: <<https://academic.oup.com/ptp/article-lookup/doi/10.1143/PTP.11.53>>. Citado na página 31.
- Newell e Montroll 1953 NEWELL, G. F.; MONTROLL, E. W. On the theory of the ising model of ferromagnetism. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 25, p. 353–389, Apr 1953. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.25.353>>. Citado na página 19.
- Néel 1936 NÉEL, L. Propriétés magnétiques de l'état métallique et énergie d'interaction entre atomes magnétiques. *Annales de physique*, v. 11, n. 5, p. 232–279, 1936. ISSN 0003-4169, 1286-4838. Disponível em: <<http://www.annphys.org/10.1051/anphys/193611050232>>. Citado na página 16.
- Néel 1971 NÉEL, L. Magnetism and local molecular field. *Science*, v. 174, n. 4013, p. 985–992, dez. 1971. ISSN 0036-8075, 1095-9203. Disponível em: <<https://www.science.org/doi/10.1126/science.174.4013.985>>. Citado na página 16.
- Néel 1948 NÉEL, M. L. Propriétés magnétiques des ferrites; ferrimagnétisme et antiferromagnétisme. *Annales de Physique*, v. 12, n. 3, p. 137–198, 1948. ISSN 0003-4169, 1286-4838. Disponível em: <<http://www.annphys.org/10.1051/anphys/194812030137>>. Citado na página 16.

- Oersted 1820 OERSTED, H. C. Experiments on the effect of a current of electricity on the magnetic needle, 1820. In: . [s.n.], 1820. Disponível em: <<https://api.semanticscholar.org/CorpusID:113334704>>. Citado na página 9.
- Okamoto Kiyomi; Tonegawa 1999 OKAMOTO KIYOMI; TONEGAWA, T. T. Y. K. M. The ground state of an $s = 1/2$ distorted diamond chain - a model of $\text{Cu}_3\text{Cl}_6(\text{H}_2\text{O})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{SO}_4$. *Journal of Physics Condensed Matter* 1999-dec 09 vol. 11 iss. 50, v. 11, dec 1999. Disponível em: <libgen.li/file.php?md5=45a88ecc4f261f6ce5b2fe02a2457295>. Citado na página 24.
- Pereira, Moura e Lyra 2008 PEREIRA, M. S. S.; MOURA, F. A. B. F. de; LYRA, M. L. Magnetization plateau in diamond chains with delocalized interstitial spins. *PHYSICAL REVIEW B*, v. 77, 2008. Citado na página 24.
- Ranke et al. 2009 RANKE, P. J. von et al. Understanding the inverse magnetocaloric effect in antiferro- and ferrimagnetic arrangements. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 21, n. 5, p. 056004, jan 2009. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/21/5/056004>>. Citado na página 17.
- Romero Gómez et al. 2013 Romero Gómez, J. et al. Magnetocaloric effect: A review of the thermodynamic cycles in magnetic refrigeration. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 17, p. 74–82, 2013. ISSN 1364-0321. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S136403211200528X>>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 18.
- Sayers SAYERS, J. Disponível em: <<https://scalar.usc.edu/maker/record/index>>. Citado na página 10.
- Schnack 2010 SCHNACK, J. Effects of frustration on magnetic molecules: a survey from olivier kahn until today. *Dalton Transactions* vol. 39 iss. 20, v. 39, 2010. Disponível em: <libgen.li/file.php?md5=61186c1453d365da0b91d2816d8e4722>. Citado na página 23.
- Shu-hua 1954 SHU-HUA, L. Origine de la boussole ii. aimant et boussole. *Isis*, v. 45, n. 2, p. 175–196, jul. 1954. ISSN 0021-1753, 1545-6994. Disponível em: <<https://www.journals.uchicago.edu/doi/10.1086/348315>>. Citado na página 15.
- Silva e Almeida 2021 SILVA, R. A. L.; ALMEIDA, M. Spin-ladder behaviour in molecular materials. *J. Mater. Chem. C*, The Royal Society of Chemistry, v. 9, p. 10573–10590, 2021. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/D1TC01576A>>. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 42.
- Simon 2013 SIMON, S. *The Oxford Solid State Basics*. OUP Oxford, 2013. ISBN 9780191502101. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=ISNoAgAAQBAJ>>. Citado na página 13.
- Souza et al. 2016 SOUZA, M. D. et al. Specific heat anomalies in solids described by a multilevel model. *Brazilian Journal of Physics*, v. 46, n. 2, p. 206–212, abr. 2016. ISSN 0103-9733, 1678-4448. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/s13538-016-0404-9>>. Citado na página 37.
- Strecka e Jascur 2003 STRECKA, J.; JASCUR, M. Existence of a magnetization plateau in a class of exactly solvable ising–heisenberg chains. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 15, n. 26, p. 4519, jun 2003. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/15/26/302>>. Citado na página 24.

Strečka et al. 2009 STREČKA, J. et al. Spontaneous antiferromagnetic long-range order in the two-dimensional hybrid model of localized ising spins and itinerant electrons. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 80, p. 174410, Nov 2009. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.174410>>. Citado na página 24.

Strečka, Čenčariková e Lyra 2015 STREČKA, J.; ČENČARIKOVÁ, H.; LYRA, M. L. Phase diagrams and anomalous thermodynamic behavior of a correlated spin–electron system on doubly decorated planar lattices. *Physics Letters A*, v. 379, n. 45, p. 2915–2921, 2015. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960115007513>>. Citado na página 24.

Syozi 1951 SYOZI, I. Statistics of kagome lattice. *Progress of Theoretical Physics*, v. 6, n. 3, p. 306–308, jun. 1951. ISSN 0033-068X, 1347-4081. Disponível em: <<https://academic.oup.com/ptp/article-lookup/doi/10.1143/ptp/6.3.306>>. Citado na página 31.

Takano K; Kubo 1996 TAKANO K; KUBO, K. S. H. Ground states with cluster structures in a frustrated heisenberg chain. *Journal of Physics Condensed Matter 1996-aug 26 vol. 8 iss. 35*, v. 8, aug 1996. Disponível em: <libgen.li/file.php?md5=16e053f71ffd7a6ffdcee0b176d72f05>. Citado na página 23.

Thompson 1976 THOMPSON, C. J. One-dimensional models — short range forces. In: _____. *Phase transitions and critical phenomena. Vol. 1: Exact results*. 2. print. ed. London: Acad. Press, 1976. v. 1. ISBN 9780122203015. Citado na página 20.

Thompson 2001 THOMPSON, S. Magnetoresistive heads: Physical phenomena. In: BUSCHOW, K. J. et al. (Ed.). *Encyclopedia of Materials: Science and Technology*. Oxford: Elsevier, 2001. p. 5095–5101. ISBN 978-0-08-043152-9. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B0080431526008858>>. Citado na página 17.

Thomson 1857 THOMSON, W. On the electro-dynamic qualities of metals:—effects of magnetization on the electric conductivity of nickel and of iron. *Abstracts of the Papers Communicated to the Royal Society of London (1843-1854) 1857-dec 31 vol. 8 iss. 0*, v. 8, dec 1857. Disponível em: <libgen.li/file.php?md5=cc9abf54f2079b3feca65f9bcbdb0def3>. Citado na página 16.

Touchette 2015 TOUCHETTE, H. Equivalence and nonequivalence of ensembles: Thermodynamic, macrostate, and measure levels. *Journal of Statistical Physics*, v. 159, n. 5, p. 987–1016, jun. 2015. ISSN 0022-4715, 1572-9613. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/s10955-015-1212-2>>. Citado na página 22.

Toulouse 1980 TOULOUSE, G. The frustration model. In: PEKALSKI, A.; PRZYSTAWA, J. A. (Ed.). *Modern Trends in the Theory of Condensed Matter*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1980. p. 195–203. ISBN 978-3-540-38628-5. Citado na página 23.

Uehara et al. 1996 UEHARA, M. et al. Superconductivity in the ladder material Sr_2CuO_7 . *Journal of the Physical Society of Japan*, Physical Society of Japan, v. 65, n. 9, p. 2764–2767, 1996. ISSN 0031-9015. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 41.

Vannimenus e Toulouse 1977 VANNIMENUS, J.; TOULOUSE, G. Theory of the frustration effect. ii. ising spins on a square lattice. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 10, n. 18, p. L537, sep 1977. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0022-3719/10/18/008>>. Citado na página 23.

Vekua 2003 VEKUA, T. Effective field theories for generalized spin ladders. Hannover : Universität, 2003. Disponível em: <<https://www.repo.uni-hannover.de/handle/123456789/6338>>. Citado na página 33.

Vleck 1951 VLECK, J. V. Recent developments in the theory of antiferromagnetism. *Journal de Physique et le Radium*, v. 12, n. 3, p. 262–274, 1951. ISSN 0368-3842. Disponível em: <<http://www.edpsciences.org/10.1051/jphysrad:01951001203026200>>. Citado na página 16.

Wang et al. 2016 WANG, S. et al. Quantum phase transition and magnetic plateau in three-leg antiferromagnetic heisenberg spin ladder with unequal j_1 - j_2 - j_1 legs. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 397, p. 319–324, 2016. ISSN 0304-8853. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885315305436>>. Citado na página 25.

Wannier 1950 WANNIER, G. H. Antiferromagnetism. the triangular ising net. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 79, p. 357–364, Jul 1950. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.79.357>>. Citado na página 23.

Wannier 1973 WANNIER, G. H. Antiferromagnetism. the triangular ising net. *Physical Review B 1973-jun 01 vol. 7 iss. 11*, v. 7, jun 1973. Disponível em: <<libgen.li/file.php?md5=1baa08fda2efbfbc90ef0135cd6157a6>>. Citado na página 23.

Weiss 1907 WEISS, P. L'hypothèse du champ moléculaire et la propriété ferromagnétique. *Journal de Physique Théorique et Appliquée*, v. 6, n. 1, p. 661–690, 1907. ISSN 0368-3893. Disponível em: <<http://www.edpsciences.org/10.1051/jphystap:019070060066100>>. Citado na página 15.

Weiss e Foëx 1931 WEISS, P.; FOËX, G. *Le Magnétisme, par Pierre Weiss et Gabriel Foëx. 69 figures. 2e édition, revue et corrigée.* libr. Armand Colin, 1931. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=4PMitwAACAAJ>>. Citado na página 14.

Weiss e Kunz 1905 WEISS, P.; KUNZ, J. Les variations thermiques de l'aimantation de la pyrrhotine. *Journal de Physique Théorique et Appliquée*, v. 4, n. 1, p. 847–873, 1905. ISSN 0368-3893. Disponível em: <<http://www.edpsciences.org/10.1051/jphystap:019050040084700>>. Citado na página 15.

Weiss e Piccard 1917 WEISS, P.; PICCARD, A. Le phénomène magnétocalorique. *Journal de Physique Théorique et Appliquée*, v. 7, n. 1, p. 103–109, 1917. ISSN 0368-3893. Disponível em: <<http://www.edpsciences.org/10.1051/jphystap:019170070010300>>. Citado na página 17.

William 2007 WILLIAM, L. *Fundamentals of Geophysics*. 2nd ed. ed. Cambridge University Press, 2007. ISBN 9780521859028; 0521859026; 9780521675963; 0521675960. Disponível em: <<libgen.li/file.php?md5=31e4e48407a2d46a40d16fa67176c29e>>. Citado na página 9.

Wolf et al. 2014 WOLF, B. et al. Cooling through quantum criticality and many-body effects in condensed matter and cold gases. *International Journal of Modern Physics B*, v. 28, n. 26, p. 1430017, out. 2014. ISSN 0217-9792, 1793-6578. Disponível em: <<https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0217979214300175>>. Citado na página 42.

Ying et al. 2004 YING, Z.-J. et al. Exact solution and magnetic properties of an anisotropic spin ladder. *The European Physical Journal B*, v. 41, n. 1, p. 67–74, Sep 2004. Citado na página 25.

Zhang et al. 2021 ZHANG, Y. et al. Solutions to obstacles in the commercialization of room-temperature magnetic refrigeration. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 143, p. 110933, 2021. ISSN 1364-0321. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032121002252>>. Citado na página 41.

Čisárová e Strečka 2014 ČISÁROVÁ, J.; STREČKA, J. Exact solution of a coupled spin–electron linear chain composed of localized ising spins and mobile electrons. *Physics Letters A*, v. 378, n. 38, p. 2801–2807, 2014. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960114007750>>. Citado na página 24.