



UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS-ICE
DEPARTAMENTO DE FÍSICA-DF
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Teoria Quântica de Campos Aplicada em Modelos de Spins Frustrados

Anne Beatriz Rocha Abreu



UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS-ICE
DEPARTAMENTO DE FÍSICA-DF
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Teoria Quântica de Campos Aplicada em Modelos de Spins Frustrados

Anne Beatriz Rocha Abreu

Orientador: Prof. Dr. José Ricardo de Sousa

Dissertação Apresentada ao
Programa de Pós-Graduação em
Física da Universidade Federal
do Amazonas, como parte dos
pré-requisitos para obtenção do
título de Mestre em Física.

Sumário

Agradecimentos	ix
Resumo	x
Abstract	xi
1 Introdução	1
1.1 Magnetismo em Sólidos	1
1.2 Transição de Fase e Fenômenos Críticos	3
1.2.1 Expoentes Críticos	6
1.2.2 Transição de Fase Quântica	12
1.3 Teoria de Escala e Universalidade em $T=0$	15
1.4 Apresentação da Dissertação	18
2 Modelos de Spins	19
2.1 Hamiltoniano de Heisenberg	19
2.2 Estado Fundamental Antiferromagnético	27
2.3 Anisotropia Magnética	29
2.4 Frustração Magnética	32
2.5 Invariância e Quebra de Simetria	34
2.6 Modelo $J_1 - J_2$	36
2.7 Modelo $J_1 - J'_1 - J_2$	41

3	Teoria de Ondas de Spin	49
3.1	Introdução	49
3.2	Transformação de Holstein e Primakoff	52
3.3	Aproximação Linear	55
3.4	Transformada de Bogoliubov	58
3.5	O Modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ Antiferromagnético	62
4	Operadores de Sachdev	78
4.1	Considerações Gerais	78
4.2	Os Operadores de Sachdev para Spin-1/2	79
4.2.1	Relações de Comutação	88
4.2.2	Métodos Aproximativos	89
4.3	Os Operadores de Sachdev para Spin-1	92
4.4	Modelo $J_1 - J'_1 - J_2$	97
5	Conclusões e Perspectivas Futuras	108
A	Cálculo dos Parâmetros Numéricos	112

Lista de Figuras

1.1	Comportamento de magnetizações espontâneas em função da temperatura reduzida T/T_c de compostos ferromagnéticos [8].	4
1.2	Comportamento apresentado pela susceptibilidade magnética χ em função da temperatura T em $(CuX)LaNb_2O_7$, com $X = Cl, Br$ [9, 10].	5
1.3	(a) Relação de C_p/T para $(CuCl)LaNb_2O_7$ com a contribuição dos fônons βT^3 representada na curva tracejada. (b) Magnetizações em baixas temperaturas medidas em vários campos magnéticos externos [11].	6
1.4	Níveis de energia E em função de um parâmetro g . Na figura (a) temos o cruzamento dos níveis de energia e na figura (b) os níveis de energia se repelem conforme o valor de g se aproxima de g_c [14].	13
2.1	Divisão da estrutura cristalina em sub-redes A e B. As magnetizações na sub-rede A, m_A , correspondem aos spins orientados para cima \uparrow e as magnetizações na sub-rede B, m_B , correspondem aos spins orientados para baixo \downarrow , e a magnetização total m é nula pois no antiferromagnetismo $m_A = -m_B$ [23].	28
2.2	Estrutura cristalina La_2CuO_4 . As esferas vermelhas representam Cu , em laranja são O , e em azul La . Os íons Cu são os vértices da rede quadrada que se estendem no plano horizontal [26].	30
2.3	Configuração de Spins Ising com interações antiferromagnéticas em (a) uma rede quadrada e (b) uma rede triangular.	32

2.4	Configuração de dímeros antiferromagnéticos. As linhas vermelhas representam a interação de troca J , enquanto as linhas verdes tracejadas têm interação J/g , as elipses representam o enlace dos estados singletos dos spins [35].	34
2.5	Representação de uma rede quadrada antiferromagnética frustrada, preservando o grupo de simetria de uma rede quadrada. Quando $g > g_c$, o estado VBS é quatro vezes degenerado e depende do padrão de cristalização dos singletos [35].	35
2.6	Modelo $J_1 - J_2$. Na direção x e y (—) temos a interação J_1 e ao longo das diagonais (- - -) temos a interação J_2	36
2.7	Diagrama de fase em $T = 0$ do modelo $J_1 - J_2$ com spin-1/2 numa rede quadrada.	37
2.8	Diagrama de fase para o Modelo $J_1 - J_2$ numa rede quadrada, onde estão representados os estados: (0,0) ferromagnético FM, (π, π) antiferromagnético de Néel NAF, ou AF, e $(\pi, 0)$ colinear antiferromagnético CAF [41].	39
2.9	Comportamento das magnetizações de sub-rede m_A em função do parâmetro α para o modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$ antiferromagnético com $S = 1/2$ (linhas sólidas) e $S = 1$ (linhas tracejadas), obtido pelo método de ondas de spin linear [42].	40
2.10	Modelo $J_1 - J'_1 - J_2$. Na direção x (—) J_1 , na direção y (- - -) J'_1 e ao longo das diagonais (- · -) J_2	42
2.11	Representação dos spins na configuração (a) antiferromagnética, (b) colinear antiferromagnética em linha e (c) colinear antiferromagnética em coluna.	43
2.12	Diagrama de fase em $T = 0$ no plano $J' - J_2$ para o modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético na rede quadrada de spin-1/2 obtido pelo método da diagonalização exata [51].	44

2.13	Diagrama de fase em $T = 0$ no plano $J'_1 - J_2$ do modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético de spin-1/2 numa rede quadrada obtido pelo CCM [48].	45
2.14	Diagrama de fases no plano $J'_1 - J_2$ do modelo antiferromagnético com $S=1$ obtido pelo método CCM numa rede quadrada [67].	48
3.1	Onda de spin unidimensional com propagação ao longo de uma rede cristalina com uma vista (a) em perspectiva e (b) de topo.	49
3.2	Rede recíproca na primeira zona de Brillouin para uma rede quadrada bidimensional com os vetores de primeiros vizinhos em linha (\mathbf{k}_x) e em coluna (\mathbf{k}_y), e de segundos vizinhos nas diagonais ($\mathbf{k}_{x,y}$).	57
3.3	Comportamento das magnetizações de sub-rede m_A em função do parâmetro de frustração α para o modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$ antiferromagnético de spin-1/2. As fases AF e CAF possuem transições de fase de segunda ordem entre a fase intermediária LS com parâmetros críticos em $\alpha_{1c} \simeq 0.37$ e $\alpha_{2c} \simeq 0.51$.	68
3.4	Comportamento das magnetizações de sub-rede m_A na fase AF e CAF em função do parâmetro de frustração α do modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$ com spin-1. As curvas sólidas são de transições de segunda ordem, com uma descontinuidade na fase CAF, representada pela curva tracejada, no valor $m_A \simeq 0.28$ com parâmetro $\alpha_{2c} \simeq 0.50$.	69
3.5	Comportamento dos parâmetros de ordem das fases AF e CAF como uma função do parâmetro de α e vários valores de λ , indicados nas curvas para o modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético de spin-1/2 obtido por ondas de spin linear.	70
3.6	Comportamento dos parâmetros de ordem das fases AF e CAF como uma função do parâmetro de α e vários valores de λ , indicados nas curvas para o modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético de spin-1 obtido por ondas de spin linear.	71

3.7	Comportamento da magnetização de sub-rede do estado AF como uma função do parâmetro de λ e alguns valores de α , indicados nas curvas para o modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético de spin-1/2 obtido por ondas de spin linear.	72
3.8	Comportamento da magnetização de sub-rede do estado AF como uma função do parâmetro de λ e alguns valores de α , indicados nas curvas para o modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético de spin-1 obtido por ondas de spin linear.	73
3.9	Diagrama de fase no plano $\lambda - \alpha$ para o modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ com spin-1/2. As fases AF e CAF possuem transições de segunda ordem entre a fase intermediária LS, onde a linha tracejada representa o limite clássico $\alpha/\lambda = 0.5$	74
3.10	Diagrama de fase no plano $\lambda - \alpha$ para o estado fundamental do modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético com spin-1. Um ponto crítico quântico terminal ocorre no valor de $\lambda \simeq 0.66$ e $\alpha \simeq 0.33$, e uma fase intermediária LS entre as fases AF e CAF. Uma transição de segunda ordem ocorre entre a fase AF e LS, quando o parâmetro de ordem $m_A = 0$, como ocorre também entre as fases AF e CAF para valores abaixo do ponto crítico. Para valores acima do ponto entre as fases CAF e LS, apresentamos uma transição de primeira ordem, quando $m_A \neq 0$	75
4.1	A configuração de dímeros acoplados em uma cadeia antiferromagnética. A figura apresenta (a) o estado fundamental de estados singletos enlaçados $(+-\rangle - -+\rangle)/\sqrt{2}$, e (b) a excitação de estados tripletos para spin-1 [95].	90
4.2	Configuração do estado de líquido de spins [95].	90
4.3	Comportamento das magnetizações de sub-rede m_A em função do parâmetro de frustração α para diversos valores de λ para o modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada em $T = 0$, obtido pelo método dos operadores de Sachdev.	104

- 4.4 Comportamento das magnetizações de sub-rede m_A em função do parâmetro de frustração λ para diversos valores do parâmetro de α para o modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ com spin-1 na rede quadrada em $T = 0$ na fase antiferromagnética, obtido pelo método dos operadores de Sachdev. . . . 105
- 4.5 Diagrama de fase no plano $\lambda - \alpha$ para o estado fundamental do modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada anisotrópica, obtido pelo método dos operadores de Sachdev. As curvas apresentadas nas fases AF e CAF são de transições de segunda ordem entre a fase intermediária LS, onde comparamos o resultado obtido com a linha tracejada que corresponde ao resultado do limite clássico $\alpha/\lambda = 0.5$ 106

Lista de Tabelas

I.1	Valores teóricos e experimentais dos expoentes críticos.	10
-----	--	----

Agradecimentos

Agradeço a Deus pela orientação em todos os momentos.

Agradeço a minha família, e em especial aos meus queridos pais, Izabel e Johnson Abreu, pelo suporte emocional e financeiro durante todos os anos de dedicação exclusiva aos estudos.

Agradeço ao professor Dr. José Ricardo de Sousa pela orientação deste trabalho e pelos anos investidos em minha formação acadêmica, partilhando seus conhecimentos científicos e profissionais.

Agradeço ao Griffith Mendonça pelo auxílio no método computacional do trabalho.

Agradeço ao amigos da Seicho-No-Ie pelos ensinamentos de vida e em especial aos meus queridos preletores, Ilka e Wanderley Yokoyama, pelas palavras de incentivo.

Agradeço aos amigos do curso de graduação e pós-graduação pelos bons momentos de convivência e aprendizado.

Agradeço a CAPES pela bolsa de estudos.

Muito Obrigada.

Resumo

Neste trabalho estudamos o Modelo de Heisenberg Antiferromagnético Anisotrópico de spin-1 com interações entre primeiros (J_1 ao longo das linhas e J'_1 ao longo das colunas) e segundos vizinhos (J_2 ao longo das diagonais) numa rede quadrada. Aplicamos inicialmente o método da teoria de ondas de spin linear (LSWT) para estudar o comportamento da transição de fase quântica ($T=0$) e comparamos os resultados qualitativos com os valores obtidos para o modelo $J_1 - J'_1 - J_2$, onde exploramos os dois casos de spin-1/2 e spin-1. Analisamos o diagrama de fase no plano λ ($\lambda \equiv J'_1/J_1$) versus α ($\alpha \equiv J_2/J_1$). No caso de spin-1/2 os resultados não são satisfatórios na região de pequeno valor de λ , onde a região desordenada está presente para qualquer valor de λ em contradição com outros resultados disponíveis na literatura que apresenta a fase desordenada para $\lambda > \lambda_1$, enquanto que para $\lambda < \lambda_1$ temos ausência desta fase desordenada com uma transição de fase direta de primeira ordem entre as fases antiferromagnética (AF) e colinear antiferromagnética (CAF). O estado AF (estado de Néel) é caracterizado por spins orientados antiparalelamente sobre toda a rede quadrada. No caso do estado CAF, os spins estão orientados paralelamente em colunas e alternados em sentidos opostos entre cadeias na horizontal. No caso de spin-1 apenas disponibilizamos de um resultado na literatura, que foi obtido anos atrás por Bishop e colaboradores usando o método do cluster acoplado (CCM), no qual demonstram não existir a fase desordenada intermediária, nem mesmo para $\lambda = 1$, apresentando apenas transições de primeira ordem ($\lambda < \lambda_1$) e segunda ordem ($\lambda > \lambda_1$) com presença de um ponto tricrítico. Por outro lado, nossos resultados de ondas de spin mostram um diagrama de fase qualitativamente similar aos encontrados por outros métodos no caso de spin-1/2. Diante desta controvérsia dos resultados encontrados no spin-1, usando CCM e ondas de spin linear, iremos aplicar a técnica dos operadores de Sachdev (operadores de enlace). Nossos resultados indicam que temos a fase desordenada intermediária para qualquer valor de $\lambda > 0$.

Abstract

In this work we study the antiferromagnetic anisotropic Heisenberg spin-1 model with interactions between nearest neighbors (J_1 along the rows and J'_1 along the columns) and between the next nearest neighbors (J_2 along the diagonals) on a square lattice. We apply initially the method of linear spin wave theory (LSWT) to study the behavior of the quantum phase transition (T=0) and compare the results with qualitative values obtained for the model $J_1 - J'_1 - J_2$, where we explore the two cases of spin-1/2 and spin-1. We analyse the phase diagram in the plane λ ($\lambda \equiv J'_1/J_1$) versus α ($\alpha \equiv J_2/J_1$). In the case of spin-1/2 the results are not satisfactory in the region of small value of λ , where disordered region is present for any value of λ in contradiction with other results available in the literature that present the disordered phase for $\lambda > \lambda_1$, whereas for $\lambda < \lambda_1$ we have absence of disordered phase with a phase transition of first order direct between the phases antiferromagnetic (AF) e collinear antiferromagnetic (CAF). The AF state (Néel state) is characterized by spins oriented antiparallel over all the square lattice. In the CAF state, the spins are oriented parallel in columns and alternated in opposite senses between a horizontal chains. The literature provides only one result in the case of spin-1, which was obtained years ago by Bishop et al. using the cluster coupled method (CCM), in which they demonstrate that no longer exists disordered intermediate phase, not even to $\lambda = 1$, featuring only first order transitions ($\lambda < \lambda_1$) and second order ($\lambda > \lambda_1$) with presence of a tricritical point. On the other hand, our results for spin waves shows a phase diagram qualitatively similar to those obtained by other methods in the case of spin-1/2. Facing these controversy results found in spin-1, using CCM and LSWT, we will apply the technique of Sachdev operators (bond operators). Our results indicate that we have intermediate desordered phase for any value of $\lambda > 0$.

Capítulo 1

Introdução

1.1 Magnetismo em Sólidos

O século XX foi marcado pelo surgimento da mecânica quântica possibilitando assim o entendimento moderno do magnetismo [1]. Este entendimento foi intimamente ligado ao desenvolvimento da mecânica estatística e termodinâmica quântica, principalmente quanto aos fenômenos cooperativos. Contribuições clássicas importantes surgiram com a primeira teoria moderna do magnetismo com o conceito de campo molecular Weiss e a forma Lei de Curie-Weiss, seguida pela descoberta da maioria dos sistemas magnéticos, mesmo que o valor do campo molecular não tenha explicação clássica [2]. Além disso, havia o teorema de Van Leeuwen, que dizia: "classicamente a qualquer temperatura, campos magnéticos e elétricos, a magnetização total de um conjunto de elétrons em equilíbrio térmico é identicamente nula", demonstrado através das equações de Maxwell e a estatística de Boltzmann. Em outras palavras, o magnetismo não pode ser explicado pela física clássica, é intrinsecamente de caráter quântico.

A mecânica quântica explicou a origem dos momentos magnéticos atômicos, através do modelo atômico de Bohr, estabelecendo a unidade fundamental do momento magnético, o magneton de Bohr $\mu_B = eh/2mc$. A mecânica quântica "nova" com a formulação ondulatória de Schrödinger e a matricial de Heisenberg e, finalmente, a relativística de

Dirac [3], estabeleceram uma base que foi aplicada com sucesso em sólidos na mecânica estatística. A partir daí Pauli, Heisenberg e Dirac descreveram o spin do elétron, o ferromagnetismo e a origem do campo de Weiss com a famosa interação de troca.

O estudo do magnetismo é tratado sobre três vertentes dos momentos magnéticos: a origem, as interações entre si e a ferramenta (mecânica estatística) necessária para descrever suas propriedades macroscópicas. Uma característica fundamental do campo magnético é o seu caráter dipolar [4]. Isto é uma consequência da ausência de uma carga magnética isolada, porque até então não há indícios de sua existência.

A descrição microscópica de um sólido magnético envolve a descrição da natureza dos portadores de momento magnético, a origem da interação entre eles e a termodinâmica do sistema constituído por um conjunto (N) muito grande de momentos magnéticos interagentes.

Existem na natureza diversas partículas fundamentais, e dentre elas temos o elétron que representa um monopolo elétrico em relação aos campos elétricos e configura um dipolo elétrico em relação aos campos magnéticos. Existe um momento angular intrínseco \mathbf{S} associado ao momento de dipolo magnético do elétron denominado de spin [5], que possui natureza essencialmente quântica. A orientação de cada elétron no sólido é caracterizada pelas configurações distintas segundo o campo magnético, que pode ser isotrópico (não possui uma direção privilegiada para o campo magnético) ou anisotrópico (possui uma direção privilegiada para o campo magnético).

Os sistemas constituídos de muitos corpos dependem das coordenadas das partículas interagentes que o constituem, e por sua vez, os graus de liberdade das partículas estão associados com o número de dimensões. Os materiais magnéticos de baixas dimensionalidades servem como modelos em física do estado sólido, tanto no ponto de vista teórico quanto do experimental. Nos últimos anos, estes sistemas de baixas dimensões estão sendo muito estudados, devido a grande quantidade de novos materiais com tais propriedades sintetizados em laboratórios, e novas propriedades são observadas.

1.2 Transição de Fase e Fenômenos Críticos

Transições de fases e fenômenos críticos ocorrem numa enorme variedade de sistemas: fluidos simples e misturas de fluidos, materiais magnéticos, ligas metálicas, materiais ferroelétricos, superfluidos e supercondutores, cristais líquidos, etc. A tese de doutorado de van der Waals, publicada em 1873, contém a primeira teoria de sucesso sobre a "continuidade de estados líquidos e gasosos da matéria", permanecendo como um instrumento importante para a análise do comportamento crítico em sistemas de fluidos. A transição de fase no ferromagnetismo também tem sido explicada, desde o início do século XX, por uma teoria fenomenológica proposta por Pierre Curie, e desenvolvida por Pierre Weiss, que apresenta muitos pontos em comum com a teoria de van der Waals. Teorias dessa natureza são conhecidas como teorias clássicas das transições de fases, têm sido utilizadas para descrever os aspectos qualitativos de vários tipos de transições de fases [6].

A teoria dos fenômenos críticos foi desenvolvida a partir da necessidade de conhecer a física que ocorre em sistemas fora do equilíbrio [7]. Dando uma ideia geral sobre transição de fase podemos dizer que as transições de fase se dão através das discontinuidades das derivadas parciais da energia livre $g(T, H)$. A transição de fase clássica é caracterizada pela singularidade da energia livre $g(T, H)$ e suas derivadas, onde T e H correspondem à temperatura e o campo magnético, respectivamente. Desta maneira, classificamos uma transição de fase de n -ésima ordem quando temos singularidade (ou discontinuidade) na n -ésima derivada do potencial termodinâmico. Na natureza encontramos apenas transições de fases de primeira e segunda ordem.

Para um ferromagneto, que é caracterizado por apresentar magnetização espontânea ($H = 0$) para $T < T_c$, temos que as primeiras derivadas da energia livre estão relacionadas com a entropia $s(T, H) = -\left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)_H$ e magnetização média $\bar{m}(T, H) = -\left(\frac{\partial g}{\partial H}\right)_T$. Assim sendo, a campo nulo ($H = 0$), numa transição de primeira ordem esperamos ocorrer em $T = T_c^*$ uma discontinuidade na magnetização $\bar{m}(T, 0)$ e/ou na entropia $s(T, 0)$.

Uma discontinuidade na entropia em $T = T_c^*$ (temperatura de transição de fase) está diretamente relacionada à existência de um calor latente $Q_L = \frac{\Delta S}{T_c^*}$, onde

$\Delta S = S_P(T_c^*, 0) - S_F(T_c^*, 0)$, $S_P(T_c^*, 0)$ e $S_F(T_c^*, 0)$ são as entropias nas fases desordenadas (paramagnética) e ordenada (ferromagnética), respectivamente.

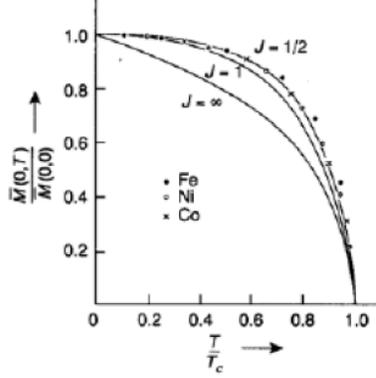


Figura 1.1: Comportamento de magnetizações espontâneas em função da temperatura reduzida T/T_c de compostos ferromagnéticos [8].

No ponto $T = T_c^*$ corresponde a coexistência das fases paramagnética e ferromagnética simultaneamente, semelhante ao que ocorre no diagrama de fase no plano $P - T$ da água, que temos linhas de coexistência entre os estados líquido-sólido, líquido-gás e sólido-gás. No caso das segundas derivadas da energia livre relacionamos com o calor específico $c(T, H) = -T \left(\frac{\partial^2 g}{\partial T^2} \right)_H$ e susceptibilidade magnética $\chi(T, H) = - \left(\frac{\partial^2 g}{\partial H^2} \right)_T$. Desta maneira, a campo nulo ($H = 0$), caso as primeiras derivadas não apresentem descontinuidades, teremos uma transição de segunda ordem (também chamada de transição contínua) se observarmos descontinuidades em $\chi(T, 0)$ e/ou $c(T, 0)$ quando atingimos a temperatura crítica $T = T_c$. No caso da susceptibilidade, observamos uma divergência, e como podemos relacionar a susceptibilidade com as flutuações da magnetização (teorema da flutuação- dissipação), isto é, $\chi \approx \langle (m - \bar{m})^2 \rangle$, dizemos que em $T = T_c$ o sistema experimenta fortes flutuações térmicas. No caso do calor específico, temos comportamentos singulares ou descontinuidades em $T = T_c$, vai depender do sistema analisado, tanto teoricamente (modelos) ou experimentalmente (compostos magnéticos).

A denominação de ponto crítico deve ser apenas referenciada no caso da transição

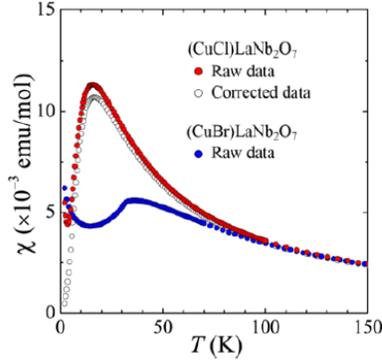


Figura 1.2: Comportamento apresentado pela susceptibilidade magnética χ em função da temperatura T em $(CuX)LaNb_2O_7$, com $X = Cl, Br$ [9, 10].

de fase contínua (segunda ordem), no caso da transição de primeira ordem chamamos simplesmente de ponto de transição de fase. Na transição de fase contínua, quando $T \rightarrow T_c$, o sistema simplesmente começa a se ajustar sobre uma escala microscópica, na forma de flutuações térmicas os quais tornam-se muito grandes nas proximidades destes pontos críticos. A susceptibilidade está relacionada com a flutuação da magnetização e o calor específico com a flutuação da energia interna. Para $T < T_c$, no ferromagneto temos presença de uma magnetização espontânea $\overline{m}(T, 0)$ devido a existência de interações microscópicas entre os seus consituíntes (spins), ocasionando correlações de curto alcance assim como de longo alcance. Apesar de termos apenas interações microscópicas de curto alcance no sistema, no ferromagneto a existência de uma magnetização global está relacionado com a presença de correlação de longo alcance. Qualitativamente, a ordem de longo alcance no ferromagneto pode ser entendido devido a competição entre a energia de troca J , responsável pelo alinhamento dos spins na rede cristalina, e a energia térmica $k_B T$, que tem a função de destruir esta ordem magnética (aumentar a entropia). Para altas temperaturas ($k_B T \gg J$), o sistema comporta-se aproximadamente como se existisse a interação (íons livres) de modo que o efeito microscópico dos spins será na ausência de ordem magnética [$\overline{m}(T, 0) = 0$]. À medida que diminuimos a temperatura, a interação de troca começa a ficar relevante e os spins a curtas distâncias (menor ou

igual ao comprimento de correlação ξ) ficam correlacionadas. Quando $k_B T \approx J$, o comprimento de correlação diverge, correlacionando, assim, todos os spins da rede, e dizemos que o sistema sofreu uma transição de fase. A existência de correlações de longo alcance é a responsável pelo comportamento singular das funções termodinâmicas.

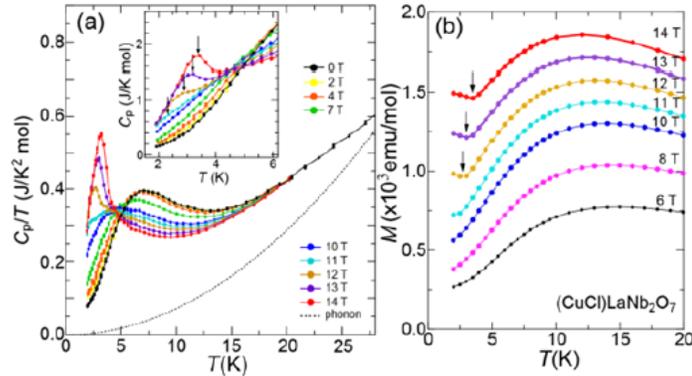


Figura 1.3: (a) Relação de C_p/T para $(CuCl)LaNb_2O_7$ com a contribuição dos fônons βT^3 representada na curva tracejada. (b) Magnetizações em baixas temperaturas medidas em vários campos magnéticos externos [11].

1.2.1 Expoentes Críticos

A origem das teorias de transições de fases clássicas ocorreu na década de 1960, com ideias sobre temas como invariância de escala e criticalidade para as funções termodinâmicas, quando conceitos básicos de parâmetro de ordem, classe de universalidade e escalas das funções termodinâmicas foram introduzidas e posteriormente ficaram fundamentados na década de 1970 com as ideias de Grupo de Renormalização. Sendo essas teorias clássicas bastante consolidadas, é natural esperar que no estudo das transições de fases quânticas se utilizem de toda base teórica na sua descrição. Apesar de tantas similaridades, as transições de fases quânticas possuem certas particularidades.

As transições podem ser estudadas pela termodinâmica e são caracterizadas por singularidades também nas grandezas físicas no ponto de transição. Uma transição de fase

clássica de segunda ordem é motivada pelo efeito térmico e, portanto, é caracterizada por uma temperatura de transição (temperatura crítica). Por isso, próximo a uma transição dessa espécie, procuramos descrever o comportamento singular das grandezas físicas do sistema através de comportamentos assintóticos em função de uma variável térmica definida por

$$t = \frac{(T_c - T)}{T_c}. \quad (1.1)$$

Para algumas grandezas importantes, o comportamento assintótico à campo nulo é descrito por:

(i) Magnetização

$$m \simeq (-t)^\beta \quad (1.2)$$

(ii) Calor Específico

$$c \propto |t|^{-\alpha} \quad (1.3)$$

(iii) Susceptibilidade Isotérmica

$$\chi \propto |t|^{-\gamma} \quad (1.4)$$

(iv) Função de Correlação Conectada

$$\begin{aligned} G_c(r) &= \langle \vec{\sigma}(\vec{r}) \cdot \vec{\sigma}(0) \rangle - \langle \vec{\sigma}(\vec{r}) \rangle \cdot \langle \vec{\sigma}(0) \rangle \\ &\approx \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2+\eta}} (r \rightarrow \infty) \end{aligned} \quad (1.5)$$

onde $\xi \approx |t|^{-\nu}$ é o comprimento de correlação que mede o tamanho médio dos aglomerados correlacionados.

Observamos que o comportamento assintótico das funções termodinâmicas é determinado pelos expoentes das relações acima, conhecidos como expoentes críticos, e estão relacionados entre si por algumas desigualdades derivadas da termodinâmica [12]:

Desigualdade de Rushbrooke (1963)

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2 \quad (1.6)$$

Primeira Desigualdade de Griffiths (1965)

$$\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2 \quad (1.7)$$

Segunda Desigualdade de Griffiths (1965)

$$\gamma \geq \beta(\delta - 1) \quad (1.8)$$

Desigualdade de Fisher (1969)

$$\gamma \geq (2 - \eta)\nu \quad (1.9)$$

Desigualdade de Josephson (1970)

$$d\nu \geq 2 - \alpha \quad (1.10)$$

As transições de fase quântica acontecem em sistemas à baixa temperatura, tecnicamente seria em $T = 0$, nos quais são envolvidas mudanças no estado fundamental através da variação de um ou mais parâmetros do Hamiltoniano do sistema. Este parâmetro pode ser, por exemplo, a dopagem em um supercondutor de alta temperatura crítica ou a desordem em um condutor próximo a sua transição metal-isolante. As transições à temperatura nula apresentam como principal diferença (em relação as transições que ocorrem à temperaturas finitas) a necessidade de levar em conta os efeitos quânticos do sistema. Na verdade é difícil saber exatamente a que temperatura os efeitos quânticos se tornam importantes na descrição de um sistema, mas é certo que quando $T = 0$ esses efeitos são relevantes.

A determinação experimental dos expoentes críticos (β , δ , γ , α , η , ν) depende da escolha do intervalo para a variável de temperatura t . O intervalo considerado pequeno é uma escolha delicada que é fortemente influenciada pelo tipo de material estudado, ou seja, este é o maior problema (técnico) para os físicos experimentais desta área que é identificar a região crítica, que tem fortes flutuações térmicas dificultando o acesso em $T = T_c$. Do ponto de vista teórico não temos esta dificuldade de atingir a criticalidade, encontramos, diante de uma teoria desenvolvida no modelo de spins, os expoentes críticos no limite $T \rightarrow T_c$. Na aproximação de campo médio (equivalente a modelos de spins com interação de longo alcance), os expoentes críticos (clássicos) são $\beta = 1/2$, $\gamma = 1$, $\alpha = 0$ (disc), $\delta = 5$, $\nu = 1/2$, $\eta = 0$, que da desigualdade de Josephson temos que $d \geq 4$ é a validade do campo médio (critério de Ginzburg-Landau) [13]. Dizemos então que para $d > 4$, rigorosamente, os expoentes críticos clássicos são exatos e qualquer metodologia usada em redes finitas (d), a extrapolação $d \rightarrow \infty$ deve ter assintoticamente os expoentes críticos clássicos como patamares. No caso da solução exata do modelo de Ising em duas dimensões (sem campo externo) foram obtidos os seguintes expoentes críticos $\beta = 1/\delta$, $\gamma = 7/4$, $\delta = 15$, $\alpha = 0$ (log), $\nu = 1$, $\eta = 1/4$. Estes dois conjuntos, exatos em $d = 2$ e $d > 4$, de expoentes críticos indicam na realidade nas desigualdades (1.6) a (1.10) uma relação de igualdade, ficando assim nas seguintes expressões

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha + 2\beta \neq \gamma = 2 \\ \alpha + \beta(\delta + 1) = 2 \\ \gamma = \beta(\delta - 1) \\ \nu d = 2 - \alpha \\ (2 - \eta)\nu = \gamma. \end{array} \right. \quad (1.11)$$

Quando $\alpha \geq 0$, o calor específico apresenta uma divergência quando atingimos a temperatura crítica ($T = T_c$). Por exemplo, o metamagneto uniaxial (Ising) tridimensional FeF_2 apresenta $\alpha = 0.14$. No caso de $\alpha = 0$ temos dois tipos de comportamentos, o logarítmico (Ising 2D) e a descontinuidade na aproximação de campo médio. Por outro lado,

no caso em que $\alpha < 0$, por exemplo, o metamagneto Heisenberg $RbMnF_3$ tem $\alpha \simeq -0.1$, o calor específico não diverge em $T = T_c$, apresentando apenas uma descontinuidade, caracterizando, assim, a transição de fase. Outros expoentes críticos também podem ser encontrados nos compostos magnéticos, que sofrem transição de fase contínua, e eles estão classificados dentro de uma classe de universalidade. Na tabela 1, apresentamos os expoentes críticos de modelos de spins e alguns compostos magnéticos com a finalidade de confirmar a classe de universalidade.

Modelo	β	γ	δ	α	ν	η
Ising 2d	1/8	7/4	15	0 (log)	1	1/4
Ising 3d	0.33	1.24	4.8	0.10	0.63	0.04
XY 3d	0.34	1.30	4.8	0.01	0.66	0.04
Heisenberg 3d	0.36	1.39	4.8	-0.12	0.71	0.04
Campo Médio	1/2	1	3	0 (dise)	1/2	0
Material	β	γ	δ	α	ν	η
<i>Fe</i>	0.39	1.33	4.35	-0.11	–	–
<i>Co</i>	0.44	1.23	3.35	-0.095	–	–
<i>Ni</i>	0.38	1.34	4.58	-0.10	–	–
<i>Gd_{0.67}Co_{0.33}</i>	0.41	1.16	3.60	0.02	–	–

Tabela I.1: Valores teóricos e experimentais dos expoentes críticos.

Analisando os expoentes críticos na tabela 1, obtidos teoricamente, observamos duas características fundamentais na dependência destes expoentes que definem a classe de universalidade: a dimensão (d) e a simetria do Hamiltoniano (n). No caso da dimensão é relevante apenas como se arranjam espacialmente os spins numa rede ($d = 1, 2, 3$), não importa a topologia. Por exemplo, em $d = 2$ não é relevante para os expoentes críticos se a rede tem uma topologia quadrática, triangular, hexagonal ("honeycomb") ou kagomé. Numa rede tridimensional ($d = 3$), não é relevante para os expoentes críticos se os spins estão arrançados topologicamente numa rede cúbica simples, cúbica de face centrada ou de corpo centrado. Desta maneira, o modelo de Ising ($n = 1$) 2d e 3d têm expoentes críticos diferentes, o que caracteriza muito bem a sua classe de universalidade, dependendo apenas da dimensão espacial (d) e não da topologia. Enquanto os modelos

de Ising $1d$ e $2d$ (sem campo) apresentam soluções exatas (modelos integráveis), outros modelos, como o caso tridimensional $d = 3$ e $2d$ com campo, ainda não apresentaram soluções exatas na literatura. Na rede $1d$ e na ausência de campo externo, o modelo de Ising em $T \neq 0$ não apresenta ordem de longo alcance (magnetização espontânea), e dizemos que a dimensão crítica inferior (d_l) é $d_l = 1$, ou seja, para $d > d_l$ o modelo de Ising tem ordem de longo alcance para $T < T_c \neq 0$. A dimensão crítica superior (d_c) acima do qual os expoentes críticos são tipo campo médio é $d_c = 4$. Portanto, os expoentes críticos clássicos são exatos para dimensões $d \geq d_c$.

Por outro lado, no caso dos modelos XY ($n = 2$) e Heisenberg ($n = 3$), a dimensão crítica inferior é $d_l = 2$ (simetria contínua), ou seja, em uma e duas dimensões os modelos com simetria contínua ($n \geq 2$) não suportam ordem de longo alcance em temperatura finita $T > 0$. Na ausência de campo externo o modelo de Ising ferromagnético (estado fundamental com spins antiparalelos) são equivalentes numa rede que pode ser decomposta em duas sub-redes interpenetrantes (ex: quadrada, cúbica simples, cúbica de corpo centrado), o modelo de Heisenberg não apresenta tal isomorfismo. Assim sendo, o modelo de Heisenberg ferromagnético apresenta propriedades termodinâmicas diferentes em baixas temperaturas, sem similares qualitativas. Por exemplo, numa rede unidimensional o estado fundamental do modelo de Heisenberg ferromagnético é ordenado com os spins orientados paralelamente, enquanto que o caso antiferromagnético é desordenado. Numa rede quadrada ($d = 2$), o modelo de Heisenberg ferromagnético ou antiferromagnético são ordenados (ordem de longo alcance) em $T = 0$, mas o estado fundamental antiferromagnético não corresponde a configuração dos spins orientados na rede antiparalelamente (estado clássico Néel), e sim uma configuração de estado com $S^z = \sum_i S_i^z = 0$. Esta combinação linear de estados de configuração de spins em $T = 0$, na rede quadrada do modelo de Heisenberg é a responsável pela existência de uma magnetização de sub-rede, digamos a subrede A com spins efetivos apontando para cima, inferior ao seu valor máximo (S), ou seja, $m_A(0) = S - \Delta$, onde Δ é um valor associado às flutuações quânticas. Em $T > 0$, as flutuações térmicas destroem a ordem magnética

do modelo de Heisenberg em duas dimensões. Portanto, na tabela 1 apresentamos apenas valores de expoentes críticos em $d = 3$ dos modelos XY e Heisenberg, que comparados com o modelo de Ising $3d$ vemos claramente valores diferentes, mostrando a dependência com a simetria do Hamiltoniano (n).

1.2.2 Transição de Fase Quântica

Da mesma forma que as transições de fase clássicas, as transições de fases quânticas [14] podem ser classificadas como de primeira ou de segunda ordem. Seja g algum parâmetro contido no Hamiltoniano que descreve o sistema e δ a distância até a instabilidade presente em uma transição de fase quântica dado por

$$\delta = g - g_c. \tag{1.12}$$

No sistema ferromagnético, a magnetização é o parâmetro de ordem. Entretanto, no sistema antiferromagnético o parâmetro de ordem é a diferença das magnetizações das sub-redes A e B, ou seja, $m_s = (m_A - m_B)/2$.

Vamos considerar um Hamiltoniano $H(g)$, com graus de liberdade nos sítios da rede, variando em função de um parâmetro adimensional g . A principal possibilidade de uma exceção vem do caso em que o parâmetro g é conservado, isto é, $H(g) = H_0 + gH_1$, onde H_0 e H_1 comutam. Dessa forma, significa que H_0 e H_1 podem ser simultaneamente diagonalizados, e, assim, as autofunções são independentes de g , embora os autovalores variem com g : então não pode haver um cruzamento de níveis, onde um nível excitado se torna um estado fundamental em $g = g_c$, criando um ponto de não-analiticidade da energia do estado fundamental, como uma função de g .

Um ponto de não-analiticidade na energia do estado fundamental do sistema para a rede infinita numa transição de fase quântica evita o cruzamento de níveis, ou um cruzamento do nível atual. A transição de fase é geralmente acompanhada por uma alteração qualitativa na natureza das correlações no estado fundamental. Atualmente, o

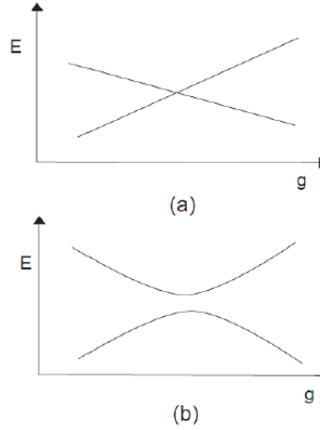


Figura 1.4: Níveis de energia E em função de um parâmetro g . Na figura (a) temos o cruzamento dos níveis de energia e na figura (b) os níveis de energia se repelem conforme o valor de g se aproxima de g_c [14].

foco deve ser o limite clássico das transições de fase quânticas que são de segunda ordem. Dependendo da forma do Hamiltoniano, pode ocorrer que nas transições de primeira ordem um comportamento não analítico na energia do estado fundamental que pode ser alcançado através de uma variação no parâmetro g , produzindo um cruzamento entre os níveis desses dois estados (fundamental e primeiro estado excitado). Isto é, para um valor $g = g_c$ o primeiro estado excitado se torna o estado fundamental do sistema. No caso das transições de segunda ordem, a escala característica das flutuações acima do estado fundamental se anula à medida que g se aproxima de g_c , na forma $J|g - g_c|^{z\nu}$, onde J é a escala de energia e z é o expoente dinâmico. Neste caso não há cruzamento de níveis, que se repelem no ponto de transição. Na figura (1.4), apresentamos esquematicamente o que acontece em cada um dos casos mencionados.

As transições de fase quânticas possuem divergências com um comprimento de correlação característico

$$\xi \sim \delta^{-\nu} \quad (1.13)$$

e analogamente ao caso especial, existem as flutuações no parâmetro de ordem no tempo.

Nas proximidades do ponto crítico essa correlação diverge na forma

$$\tau \sim \xi^z \sim \delta^{-z\nu}. \quad (1.14)$$

As correlações divergem quando $z \neq 1$ de forma diferente espacialmente e no tempo, gerando uma anisotropia entre essas direções.

Transições de fase à temperatura finita em sistemas quânticos desse tipo podem ser perfeitamente explicadas pela mecânica estatística clássica, pois as transições de fase são usualmente acompanhadas por um comprimento e um tempo de correlação divergentes. Neste caso, as correlações de grande comprimentos de onda são bem capturadas classicamente quando a "temperatura" excede as "frequências" de interesse, isto é,

$$\hbar w^* \ll k_B T_c \quad (1.15)$$

onde w^* é a frequência associada às flutuações quânticas. A transição é acompanhada por um tempo de correlação divergente $w^* \rightarrow 0$ quando $T \rightarrow T_c$, sendo que para qualquer transição com $T \neq 0$ existe uma temperatura suficientemente próxima de T_c tal que a relação é satisfeita. Dessa forma, sempre encontramos uma temperatura suficientemente próxima de T_c para qual o sistema se comporta quase classicamente. Dessa forma, as flutuações quânticas na energia possuem a relação:

$$\hbar w \sim \delta^{z\nu}. \quad (1.16)$$

Quando $T_c \neq 0$, podemos supor que seja possível encontrar uma temperatura suficientemente próxima de T_c , onde a Eq. (1.15) é satisfeita e o sistema apresenta um comportamento clássico, apesar de apresentar na modelagem física características intrinsecamente quânticas. Quando $T = 0$, a Eq. (1.15) não é satisfeita e a mecânica quântica será fundamental para descrever o comportamento crítico do sistema.

1.3 Teoria de Escala e Universalidade em $T=0$

As regiões próximas aos pontos críticos apresentam um interessante comportamento na apresentação das grandezas termodinâmicas existentes. Este comportamento característico é apresentado em uma região crítica, e suas divergências assintóticas podem ser descritas através de um conjunto de expoentes críticos.

As teorias clássicas para os diversos sistemas contribuem com um caráter universal, fornecendo um conjunto de valores para os expoentes críticos. Tanto os dados experimentais quanto diversos resultados teóricos apontavam, no entanto, para a existência de classes de universalidade, definidas por pouquíssimos parâmetros (como a dimensionalidade dos sistemas sob consideração), com expoentes críticos definitivamente distintos do conjunto de expoentes clássicos.

Uma característica importante dos expoentes críticos é a relação dos aspectos da universalidade. Isto reflete o fato de que, sistemas físicos com características micro e macroscópicas completamente diferentes, possuem o mesmo conjunto de expoentes críticos, isto é, podem ser incorporados a uma mesma categoria ou classe, chamada de classe de universalidade. Na criticalidade, a forma das interações microscópicas dos constituintes de uma mesma classe de universalidade torna-se irrelevante.

Os parâmetros podem ser relacionados através de uma lei de escala g com as distâncias aos valores críticos associados à região de instabilidade, δ e τ , através do fator de escala $b = L/L'$, ou seja

$$g' = b^{-y}g, \tag{1.17}$$

$$\delta' = b^a\delta \tag{1.18}$$

e

$$\tau' = b^z\tau, \tag{1.19}$$

onde L e L' são as dimensões lineares antiga e a nova simetria [15, 16].

O comprimento de correlação pode ser reescalado para encontrar a relação entre os

expoentes críticos ν e a , na seguinte forma

$$\xi'(|\delta'|) = \frac{\xi(|\delta|)}{b}. \quad (1.20)$$

O valor de b apresenta uma certa arbitrariedade, e com isso podemos fazer $b^a |\delta| = 1$, tal que $b = |\delta|^{-1/a}$, logo

$$\xi = |\delta|^{-1/a} \xi'. \quad (1.21)$$

Desta maneira encontramos

$$\nu = 1/a. \quad (1.22)$$

A relação de incerteza da energia nos dá

$$\Delta E \Delta \tau \geq \hbar, \quad (1.23)$$

que deve ser invariante em qualquer transformação de escala, ou seja,

$$\Delta E \Delta \tau = \Delta E' \Delta \tau', \quad (1.24)$$

o que nos permite encontrar uma relação entre o expoente dinâmico z e y , uma vez que $\Delta \tau' = b^z \Delta \tau$ e $\Delta E' = b^{-y} \Delta E$, obtendo assim

$$b^{(z-y)} \Delta E \Delta \tau = \Delta E \Delta \tau \quad (1.25)$$

onde a igualdade acima será satisfeita se $z = y$.

A dinâmica nas transições de fase quântica em regimes de baixas temperaturas apresenta equivalência com a relação de Josephson. Dessa forma, verificamos o comportamento singular da densidade de energia em $T = 0$, ou seja,

$$f_s = \frac{F_s}{L^d} = g f(\delta) \quad (1.26)$$

no qual podemos reescalar usando $L' = L/b$ obtendo

$$f'_s = \frac{F_s}{(L')^d} = b^d f_s = g' f(|\delta'|). \quad (1.27)$$

Com o auxílio das expressões para g' e δ' , e usando $b = |\delta|^{-1/a}$ obtemos

$$\frac{f_s}{g} = |\delta|^{\frac{y+d}{a}} f(1). \quad (1.28)$$

Usando $a = 1/\nu$ e $z = y$ obtemos a forma escalada da energia livre na forma

$$f_s \propto |\delta|^{\nu(d+z)}. \quad (1.29)$$

A singularidade da densidade de energia livre apresenta o seguinte comportamento¹

$$f_s \propto |\delta|^{2-\alpha}, \quad (1.30)$$

de modo que os expoentes satisfazem a seguinte igualdade

$$2 - \alpha = \nu(d + z), \quad (1.31)$$

definindo assim uma dimensão efetiva $d_{efetiva} = d + z$. Uma característica importante da transição de fase quântica é o mapeamento dos expoentes críticos através da transição de natureza clássica. Isto é, quando $z = 1$ existe uma isotropia entre o espaço e o tempo, com isso a natureza do modelo quântico em d dimensões é identificada pelo modelo equivalente clássico em $d + 1$ dimensões, dimensão na qual as relações de escala são verificadas.

¹Sendo o calor específico $c \approx \frac{\partial^2 f_s}{\partial t^2} \approx |t|^{-\alpha}$, integrando obtemos $f_s \approx |t|^{2-\alpha}$. Por certa analogia em $T=0$, substituímos t por δ , podemos então expressar a singularidade da energia livre por $f_s \approx |\delta|^{2-\alpha}$.

1.4 Apresentação da Dissertação

A organização deste trabalho de dissertação é feita com o conhecimento prévio das características de uma transição de fase quântica, onde investigaremos os efeitos dos parâmetros que causam frustração e afeta a dimensionalidade espacial (*crossover*).

No segundo capítulo, apresentaremos um estudo sistemático de modelos de spins, e os seus conceitos referentes ao objetivo principal do estudo, como explorar conceitos de anisotropias e suas frustrações magnéticas.

Nosso objetivo específico é estudar o estado fundamental do modelo de Heisenberg antiferromagnético com interações entre primeiros (J_1 e J'_1) e segundos (J_2) vizinhos com spin-1 numa rede quadrada anisotrópica.

No terceiro capítulo, desenvolvemos a teoria de ondas de spin, limitando-se a uma abordagem de aproximação linear dos operadores de spin, e aplicaremos este formalismo no modelo proposto comparando com outros resultados encontrados na literatura.

O objetivo principal proposto nesta dissertação é apresentado no capítulo 4, quando abordamos o modelo através dos operadores de Sachdev, conhecido na literatura como operadores de enlace (*bond operator*).

Finalmente, no capítulo 5 apresentaremos as conclusões e perspectivas futuras.

Capítulo 2

Modelos de Spins

2.1 Hamiltoniano de Heisenberg

O modelo de Heisenberg foi amplamente estudado nos últimos anos e consiste de um sistema de spins localizados nos sítios de uma rede cristalina e acoplados via uma interação de origem eletrostática. A descrição desse modelo pode ser aplicada a um cristal que consiste de N átomos idênticos localizados nos sítios da rede [17].

Modelos físicos representados por Hamiltonianos de Heisenberg são resolvidos exatamente apenas para casos simplificados, e, em geral, não representariam um sistema real. Para solucionar questões como essas são utilizados métodos aproximativos, capazes de descrever corretamente um modelo físico e que permita uma solução adequada ao sistema em estudo.

Para entendermos a natureza da interação de troca entre spins, vamos considerar um sistema de dois elétrons descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_e} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_e} + V_L(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + V_{1,2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (2.1)$$

onde as duas primeiras parcelas correspondem à energia cinética dos elétrons e o restante, à energia potencial ao qual os elétrons estão submetidos. O primeiro termo da energia

potencial $V_L(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ é simplesmente a energia de ligação (coulombiana) de cada elétron com seu núcleo e $V_{1,2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ é o potencial coulombiano responsável pela interação entre os elétrons.

O Hamiltoniano dado pela Eq. (2.1) não contém termos que envolvam explicitamente os operadores de spin, sendo, assim, a função de onda espacial é obtida apenas por meio da solução da equação de Schrödinger independente do tempo

$$\mathcal{H}\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E(1, 2)\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2.2)$$

onde $\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ é a autofunção orbital e $E_{1,2}$ a autoenergia dos dois elétrons.

As características de simetria das partículas são estabelecidas experimentalmente. Os sistemas descritos por partículas com número quântico de spin inteiro devem ser descritos por autofunções totais simétricas, enquanto que sistemas com spins semi-inteiros são descritos por autofunções totais anti-simétricas. A autofunção total espacial de um sistema é obtida pelo produto de todas as autofunções espaciais de cada partícula, que constitui o sistema. Da mesma maneira a autofunção total de spin de cada partícula. Assim sendo, a autofunção total que descreve o sistema é o produto entre a autofunção total espacial e a autofunção total de spin. Os espinores que descrevem estes estados são dados por um singlete (anti-simétrico)

$$\chi_S(0, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi(\uparrow, \downarrow) - \chi(\downarrow, \uparrow)], \quad (2.3)$$

que é caracterizado por spin total $S = 0$ e o estado tripleto (simétrico)

$$\chi_t(1, m) = \begin{cases} \chi(\uparrow, \uparrow), m = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi(\uparrow, \uparrow) + \chi(\downarrow, \downarrow)], m = 0 \\ \chi(\downarrow, \downarrow), m = -1 \end{cases} \quad (2.4)$$

que é caracterizado por spin total $S=1$.

Para o caso em que $V_{1,2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = 0$ e desprezando as interações tipo spin-órbita,

podemos desmembrar $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0$ (solúvel) para cada partícula, respectivamente \mathcal{H}_{01} e \mathcal{H}_{02} , assim chegamos às expressões independentes para equações de Schrodinger das duas partículas não interagentes

$$\mathcal{H}_{01}\phi_n(\mathbf{r}_1) = E_{0n}(1)\phi_n(\mathbf{r}_1) \quad (2.5)$$

e

$$\mathcal{H}_{02}\phi_m(\mathbf{r}_2) = E_{0m}(2)\phi_m(\mathbf{r}_2) \quad (2.6)$$

onde m e n identificam os estados orbitais quânticos de cada partícula. Dessa forma, a função de onda espacial será dada pelo produto das funções de onda de cada partícula, podendo ter duas configurações diferentes com mesma energia $E = E_{0n}(1) + E_{0m}(2)$,

$$\phi_{n,m}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_n(\mathbf{r}_1)\phi_m(\mathbf{r}_2) = \phi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (2.7)$$

ou

$$\phi_{n,m}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_m(\mathbf{r}_1)\phi_n(\mathbf{r}_2) = \phi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2.8)$$

dizemos então que o sistema é degenerado.

A fim de resolver (aproximado) o caso do sistema interagente, Eq. (2.2), usaremos a teoria de perturbação degenerada de primeira ordem, que nos leva a equação secular

$$\begin{vmatrix} \langle H \rangle_{11} - E_{n,m}(1,2) & \langle H \rangle_{12} \\ \langle H \rangle_{21} & \langle H \rangle_{22} - E_{n,m}(1,2) \end{vmatrix} = 0 \quad (2.9)$$

onde o elemento de matriz é dado por

$$\langle H \rangle_{ij} = \int \Psi_i^{0*}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \left(\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) \Psi_j^0(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (2.10)$$

sendo

$$\langle H \rangle_{11} = \langle H \rangle_{22} = E_n^0(1) + E_m^0(2) + K \quad (2.11)$$

e

$$\langle H \rangle_{12} = \langle H \rangle_{21} = J. \quad (2.12)$$

Resolvendo o determinante dado pela Eq. (2.9), encontramos

$$E_1(1, 2) = E_n^0(1) + E_m^0(2) + K + J = \tilde{E} + J \quad (2.13)$$

e

$$E_2(1, 2) = E_n^0(1) + E_m^0(2) + K - J = \tilde{E} - J, \quad (2.14)$$

tal que K e J são definidas como

$$K = \int \phi_n^*(\mathbf{r}_1) \phi_m^*(\mathbf{r}_2) \left(\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) \phi_n(\mathbf{r}_2) \phi_m(\mathbf{r}_1) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \quad (2.15)$$

e

$$J = \int \phi_n^*(\mathbf{r}_1) \phi_m^*(\mathbf{r}_2) \left(\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) \phi_m(\mathbf{r}_2) \phi_n(\mathbf{r}_1) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2. \quad (2.16)$$

Podemos ter conhecimento sobre o comportamento das partículas quando utilizamos a física clássica, registrando seus movimentos e posições mesmo sendo idênticas. No entanto, isto não é possível na física quântica, pois partículas quânticas possuem posição e momento incertos e não podem ser monitoradas, sendo assim indistinguíveis. A indistinguibilidade de partículas idênticas é um princípio fundamental da partícula quântica, que dá origem a fenômenos que não têm análogo clássico.

A indistinguibilidade de partículas idênticas leva a uma função de onda com simetria de troca definitiva. Ainda temos que considerar as circunstâncias que determinam se a função de onda é simétrica ou anti-simétrica. Estas condições dependem das partículas de

spin, mas para entender o papel do spin na determinação da simetria de troca, precisamos ampliar nossa representação de um estado quântico de modo que inclua uma descrição do spin da partícula. Desta maneira teremos as funções simétrica

$$\Psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_n(\mathbf{r}_1)\phi_m(\mathbf{r}_2) + \phi_n(\mathbf{r}_2)\phi_m(\mathbf{r}_1)] \quad (2.17)$$

e anti-simétrica

$$\Psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_n(\mathbf{r}_1)\phi_m(\mathbf{r}_2) - \phi_n(\mathbf{r}_2)\phi_m(\mathbf{r}_1)] \quad (2.18)$$

que são as autofunções correspondentes as autoenergias $E_1(1, 2)$ e $E_2(1, 2)$, respectivamente.

Um estado quântico descreve as propriedades espaciais e de spin de partículas idênticas e devem possuir duas possíveis simetrias de troca determinada na forma simétrica ou anti-simétrica. Apesar disso, as partículas idênticas não possuem liberdade na escolha entre as opções de simetria, podendo ser partículas quânticas chamadas de bósons¹ e férmions².

Como as autofunções totais dos dois elétrons devem ser anti-simétricas, os produtos correspondentes serão:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \begin{cases} \Psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \chi_s(S = 0, m = 0) \\ \Psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \chi_t(S = 1, m = -1, 0, 1) \end{cases} \quad (2.19)$$

Os elétrons com spin-1/2 são indistinguíveis na forma de férmions. Esses estados anti-simétricos dos elétrons são muito relevantes para a nossa compreensão do mundo que nos rodeia, pois as propriedades dos átomos e sólidos são em grande parte determinada pela mecânica quântica dos elétrons. Aplicando o operador \mathbf{S}^2 na Eq. (2.19), obtemos

¹Bósons são partículas com spin inteiro e em um sistema de bósons idênticos os estados quânticos são simétricos quando duas partículas são trocadas.

²Férmions são partículas com spin semi-inteiro e em sistemas de férmions idênticos os estados quânticos são anti-simétricos quando duas partículas são trocadas.

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}^2\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \mathbf{S}(\mathbf{S} + 1)\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\
&= (\mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)
\end{aligned} \tag{2.20}$$

onde temos usado $\hbar \equiv 1$.

Lembrando que os operadores de spin \mathbf{S}_1^2 e \mathbf{S}_2^2 possuem autovalores $S_1(S_1 + 1)$ e $S_2(S_2 + 1)$, respectivamente, obtemos a expressão:

$$\mathbf{S}^2\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = [S_1(S_1 + 1) + S_2(S_2 + 1) + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2] \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \tag{2.21}$$

Sendo $S_1 = S_2 = 1/2$, a Eq. (2.21) ficará reescrita na forma

$$\mathbf{S}^2\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = S(S + 1)\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left(\frac{3}{2} + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2\right) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \tag{2.22}$$

onde temos que o operador $\hat{O} = \left(\frac{3}{2} + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2\right)$ tem autovalores 0 ($S=0$) e 2 ($S=1$), conforme a solução da Eq. (2.22). Podemos definir outro operador $\hat{A} \equiv \left(\frac{1}{2} + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2\right)$ que tem autovalores 1 e -1 para $S=1$ (estado tripleto) e $S=0$ (estado singleto), respectivamente. Como $[\mathbf{S}^2, H] = 0$, a autofunção $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ é comum aos operadores H e \mathbf{S}^2 , sendo que para o Hamiltoniano H , em teoria de perturbação de primeira ordem, temos as autoenergias $E(S = 0) \equiv E_1(1, 2) = \tilde{E} + J$ e $E(S = 1) \equiv E_2(1, 2) = \tilde{E} - J$. Ou seja, os operadores \hat{A} e H , que comutam, têm as seguintes equações de autofunções e autovalores dados por

$$\begin{cases} \hat{A}\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \pm\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ H\Psi = (\tilde{E} \mp J)\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \end{cases} \tag{2.23}$$

onde (+) e (-) correspondem às soluções com $S=1$ e $S=0$, respectivamente. Combinando as duas expressões dadas na Eq. (2.23), podemos expressar o Hamiltoniano na forma

$$H = \tilde{E} - J \left(\frac{1}{2} + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \right) \quad (2.24)$$

onde $J = \frac{1}{2} [E(S = 0) - E(S = 1)]$ é a energia de troca. Redefinindo a energia de "ponto zero", $\tilde{E} - \frac{J}{2} = 0$, podemos reescrever o Hamiltoniano (2.24) por

$$H = -2J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (2.25)$$

que ficou conhecido como modelo de Heisenberg. Se $J > 0$ ($J < 0$) o estado fundamental corresponde à configuração com spins paralelos (antiparalelos), ou numa linguagem do magnetismo temos o estado ferromagnético (antiferromagnético).

O modelo de Heisenberg pode ser expandido para um sistema de N spins [18], resultando no Hamiltoniano

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (2.26)$$

onde o índice $\langle i, j \rangle$ representa a soma sobre os primeiros vizinhos, e quando a interação entre os spins em uma cadeia ferromagnética ($J_{ij} < 0$) ou antiferromagnética ($J_{ij} > 0$). A soma é feita sobre todos os pares de partículas (i, j) e os vetores \mathbf{S}_i e \mathbf{S}_j denotam os momentos angulares de spin das partículas do par interagente. Os valores de J_{ij} são constantes de acoplamento e diminuem seus valores rapidamente à medida que a distância de separação i e j aumenta e dizemos ser esta uma interação de curto alcance. A constante de acoplamento J_{ij} apresenta invariância translacional, podemos supor, portanto, uma escala de energia J utilizada para descrever o maior valor de J_{ij} . Por natureza, o Hamiltoniano de Heisenberg é isotrópico, devido a interação de troca não depender das direções espaciais dos spins. Introduzindo anisotropia no modelo, podemos reescrever o Hamiltoniano na forma

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} (J_{ij}^x S_i^x S_j^x + J_{ij}^y S_i^y S_j^y + J_{ij}^z S_i^z S_j^z). \quad (2.27)$$

Alguns limites podem ser avaliados para este modelo:

(i) Modelo de Ising

No limite em que as interações predominantes acontecem na direção z temos o modelo de Ising, ou seja, $J_{ij}^z \gg J_{ij}^{x,y}$. Neste caso, o Hamiltoniano de Heisenberg é apresentado na forma

$$\mathcal{H}_I = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i^z S_j^z \quad (2.28)$$

No caso unidimensional [19] e bidimensional [20], neste limite $1d$ o sistema na ausência de campo externo não possui magnetização espontânea em $T > 0$. Acreditava-se que através de cálculos aproximados que este modelo não exibiria ordem de longo alcance em duas e três dimensões, frustrando assim, Lenz e Ising, por não conseguirem descrever o ferromagnetismo. Anos depois Peierls, em 1936, mostrou que esse modelo apresenta uma magnetização espontânea em duas dimensões, ressurgindo, assim, o interesse pelo modelo de Ising.

(ii) Modelo Planar

O limite que corresponde interações predominantes $J_{ij}^{x,y} \gg J_{ij}^z$, é reduzida à expressão

$$\mathcal{H}_{XY} = - \sum_{\langle i,j \rangle} (J_{ij}^x S_i^x S_j^x + J_{ij}^y S_i^y S_j^y). \quad (2.29)$$

Este modelo também pode ser encontrado na literatura como modelo planar ou XY [21], e possui solução exata em uma dimensão [22], porém em duas dimensões não apresenta ordem magnética, ou magnetização espontânea em temperatura finita ($T > 0$).

O estado fundamental do modelo de Heisenberg ferromagnético é bem caracterizado com a configuração dos spins orientados paralelamente. Por outro lado, o estado fundamental antiferromagnético não é conhecido exatamente.

2.2 Estado Fundamental Antiferromagnético

O modelo de Heisenberg ferromagnético clássico e quântico apresenta em seu estado fundamental um alinhamento paralelo dos spins ao longo do eixo de fácil magnetização (normalmente é escolhido como sendo o eixo z). Quando $T = 0$, definimos o estado $|0\rangle = |S, S, \dots, S\rangle$ como sendo o estado fundamental ferromagnético F, onde todos os spins da rede na maior componente do operador de spin estejam alinhados e paralelos ao longo do eixo de mais fácil magnetização [23].

O estado fundamental clássico do antiferromagneto corresponde a configurações dos spins com orientações antiparalelas ao longo de todo o eixo de fácil magnetização, existindo assim duas sub-redes com momentos iguais e opostos, o que faz com que a magnetização total seja zero, mesmo abaixo da temperatura de ordenação, conhecida como temperatura de Néel.

Os Hamiltonianos de spin que envolvem interações de troca possuem poucos casos particulares com soluções exatas, pois são constituídos por sistemas de muitos corpos interagentes. No entanto, para o modelo de Heisenberg a análise do comportamento termodinâmico com base nas excitações elementares do tipo mágnons não interagentes só é aplicável a baixas temperaturas, quando a magnetização de sub-rede não se afasta muito de seu valor máximo.

No magnetismo, um sistema é bipartido se todos os sítios podem ser divididos em dois sistemas distintos A e B de tal forma que $J_{ij} = 0$ se $i(j) \in A$ ou se $i(j) \in B$. As interações são apenas entre sítios de subsistemas diferentes, e em nossos estudos iremos considerar uma rede quadrada com interações entre primeiros vizinhos. Se algum J_{ij} é negativo, os estados totalmente polarizados ainda são autoestados de H , mas geralmente não são mais estado fundamental. Praticamente quase nada se sabe com rigor sobre o estado fundamental do modelo de Heisenberg antiferromagnético. Uma subclasse importante para que os resultados rigorosos existem são antiferromagnéticos em sistemas bipartidos em sub-redes A e B, conforme a figura (2.1).

Uma suposição óbvia seria a de que, para $J_{ij} < 0$ numa rede bipartida, todos os

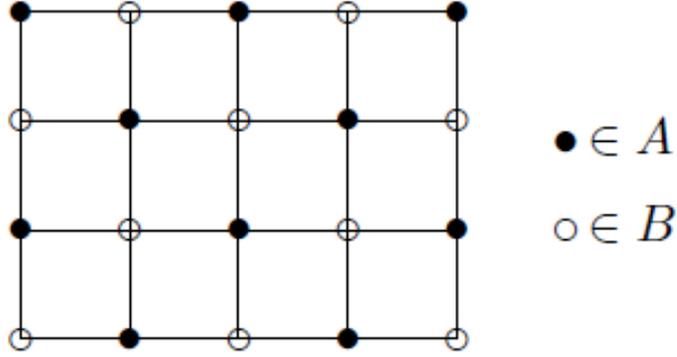


Figura 2.1: Divisão da estrutura cristalina em sub-redes A e B. As magnetizações na sub-rede A, m_A , correspondem aos spins orientados para cima \uparrow e as magnetizações na sub-rede B, m_B , correspondem aos spins orientados para baixo \downarrow , e a magnetização total m é nula pois no antiferromagnetismo $m_A = -m_B$ [23].

spins estão totalmente polarizados em direções contrárias nas duas sub-redes. Este é o chamado estado de Néel. Consideramos o estado fundamental

$$|\psi\rangle = \prod_{i \in A} |S, S\rangle_i \prod_{j \in B} |S, -S\rangle_j \quad (2.30)$$

então

$$H |\psi\rangle = - \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} J_{ij} \left(\frac{1}{2} S_i^+ S_j^- |\psi\rangle + \frac{1}{2} S_i^- S_j^+ |\psi\rangle + S_i^z S_j^z |\psi\rangle \right) \quad (2.31)$$

tal que $S_i^+ S_j^- |\psi\rangle = 0$. Neste caso, $|\psi\rangle$ é um autoestado do primeiro e do terceiro termo, mas não do segundo. Nesse caso, temos que

$$H |\psi\rangle = - \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} J_{ij} \left(\frac{1}{2} [S(S+1) - S(S-1)] \times \dots \right. \\ \left. |S, S-1\rangle_i \dots |S, -S+1\rangle_j \dots - S^2 |\psi\rangle \right) \quad (2.32)$$

não é apresentado na forma $E |\psi\rangle$, ou seja, $|\psi\rangle$ não é um autoestado de H . O teorema de

Marshall (estendido por Lieb e Mattis) afirma que para o modelo de Heisenberg, numa rede bipartida com sub-redes de igual tamanho, com $J_{ij} \leq 0$ para todo $i \in A$ e $j \in B$, ou $i \in B$ e $j \in A$, cada par de sítios i (j) estão conectados por uma cadeia de enlaces com $J_{kl} \neq 0$, então o estado fundamental $|\psi_0\rangle$ é não degenerado e é um singlete de spin total:

$$\mathbf{S}^2 |\psi_0\rangle = 0 \quad (2.33)$$

onde $\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{S}_i$.

O estado fundamental do sistema é apresentado mais facilmente para o estado fundamental ferromagnético, mas devido aos problemas conceituais necessita de argumentos adicionais para que um autoestado descreva de forma satisfatória um estado fundamental antiferromagnético [24]. Podemos escolher um autoestado fundamental de forma que seja um autoestado simultâneo de \mathbf{S}^2 tal que $[\mathbf{S}^2, H] = 0$. O estado de Néel é um autovetor do Hamiltoniano de Ising, correspondendo ao estado de menor energia, mas não é um autovetor do Hamiltoniano de Heisenberg (e, portanto, não é o estado fundamental), pois os termos transversais (com S^+ e S^-) invertem as orientações de pares de spins vizinhos.

2.3 Anisotropia Magnética

A interação de troca é a responsável pelo ordenamento magnético na matéria e possui natureza isotrópica, incapaz de definir alguma orientação dos momentos magnéticos com respeito aos eixos estruturais do material, produzindo um alinhamento dos spins nos sítios da rede. A natureza das interações entre os momentos magnéticos dos íons determina o tipo de estrutura cristalina do material.

O sentido de mais fácil magnetização em material cristalino definirá a distribuição e orientação dos spins ao longo do eixo, mas outras interações podem ocorrer tornando este material de natureza anisotrópica. As energias magnéticas (Zeeman, dipolar, quadrupolar, etc.) são responsáveis pela existência da anisotropia magnetocristalina que se manifesta com a dependência da energia do cristal nas orientações dos momentos magnéticos

dos íons com relação ao eixo cristalino.

O composto La_2CuO_4 na figura (2.2), representa um óxido metálico com ordem anti-ferromagnética, sendo descrito por um Hamiltoniano de Heisenberg quasi-bidimensional [25]. Os portadores de cargas nos planos, juntamente com as interações elétricas e magnéticas, determinam as propriedades supercondutoras destes compostos.

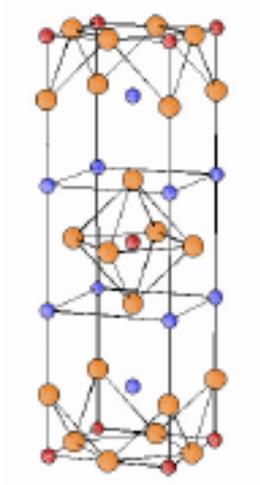


Figura 2.2: Estrutura cristalina La_2CuO_4 . As esferas vermelhas representam Cu , em laranja são O , e em azul La . Os íons Cu são os vértices da rede quadrada que se estendem no plano horizontal [26].

Um material magnetizado gera um campo magnético ao redor de sua estrutura [27], e este campo pode ser visto como a soma de campos devido a regiões macroscópicas da amostra, ordenadas magneticamente pela ação das interações de troca, manifestando o comportamento de ímãs. Na parte interna, se a magnetização é uniforme, diferentes regiões da amostra estarão orientadas de forma energeticamente desfavorável em relação ao campo criado pelas outras regiões. Neste caso, devido à interação dipolar magnética, que desprezamos diante de interação de troca no caso de momentos magnéticos microscópicos à distâncias interatômicas típicas, mas que possui efeito importante quando se consideram momentos macroscópicos. A interação dipolar favorece o ordenamento paralelo de momentos magnéticos ao longo da linha que os une, e antiparalelo na direção

perpendicular a essa linha. A energia magnetostática é reduzida se o sistema se subdivide em domínios com magnetizações opostas.

A anisotropia é uma característica muito frequente nos elementos da natureza, isto é, a variabilidade ou distribuição espacial de tais elementos ocorre mais intensamente numa direção e menos intensamente em outra direção. A anisotropia magnética é um dos fatores que caracterizam as ligas amorfas, e tem grande influência sobre a maioria de suas propriedades e é facilmente modificável por relaxação estrutural. A anisotropia é normalmente considerada como uniaxial e pode apresentar as seguintes formas [28, 29]:

(i) anisotropia de superfície: os campos efetivos de anisotropia são resultados da soma dos campos efetivos da porção volumétrica e da porção de superfície de um determinado ferromagneto, e estão associadas à energias distintas quando as partículas portadoras de momento encontram-se na superfície ou no interior de um material.

(ii) anisotropia de forma: os campos desmagnetizantes que resultam da formação de pólos magnéticos num material, por sua vez decorrente de interações dipolares entre os momentos de dipolo magnéticos elementares, dependem da forma específica das amostras e a intensidade da sua magnetização.

(iii) anisotropia magnetocristalina: existe diferentes energias em um material cristalino devido às distintas energias associadas a cada direção assumida pela magnetização em relação aos eixos cristalinos, e neste caso, quando um campo externo tenta reorientar o spin de um elétron, sua órbita também o faz pois esta anisotropia é ligada ao acoplamento spin-órbita. Estando a órbita fortemente acoplada à rede haverá uma maior resistência a uma orientação.

(iv) anisotropia magnetoelástica ou magnetostritiva: este fenômeno também é uma consequência do acoplamento spin-órbita, e quando as dimensões de uma amostra são alteradas em função da alteração da direção de sua magnetização podendo gerar anisotropias magnéticas. Mas mesmo em materiais elasticamente isotrópicos e com uma magnetostricção isotrópica podem surgir anisotropias magnéticas, basta que exista uma tensão mecânica aplicada numa determinada direção.

2.4 Frustração Magnética

A palavra frustração foi introduzida para descrever a situação onde um sistema não pode simultaneamente minimizar as energias da interação entre seus componentes. Os sistemas frustrados foram descobertos e estudados por mais de 50 anos. Em sistemas quânticos a configuração de frustração e de flutuações quânticas podem levar a um estado líquido de spins (LS) ou a uma quebra espontânea de simetria. A origem da frustração é a competição entre tipos diferentes de interações e/ou os diferentes tipos de geometria da rede (redes geometricamente frustradas) [30].

No antiferromagnetismo, os spins se alinham em um padrão regular, com os spins vizinhos antiparalelos, como apresenta a figura (2.3-a). Para os elétrons situados em uma estrutura triangular, entretanto, esta configuração é frustrada, porque a combinação com os spins antiparalelos não apresenta uma única configuração (degenerescência), como está esquematizado na figura (2.3-b). Por exemplo, em $T = 0$, o modelo de Ising ferromagnético apresenta uma entropia nula significando a existência de um único estado de configuração dos spins. Porém, no caso antiferromagnético, temos a presença de uma entropia residual que caracteriza esta multiplicidade (degenerescência) de estados fundamentais.

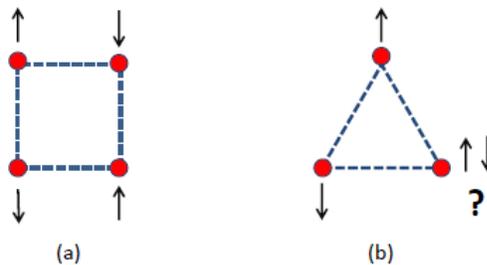


Figura 2.3: Configuração de Spins Ising com interações antiferromagnéticas em (a) uma rede quadrada e (b) uma rede triangular.

Uma mudança estrutural no sólido magnético altera o ordenamento entre os spins levando à frustração e como consequência gera estados fundamentais diferentes. Em

consequência, no estado fundamental todas as interações não são completamente satisfeitas e o sistema é fortemente degenerado. No caso clássico, as flutuações quânticas são desprezadas, porém, no caso quântico as flutuações têm papel importante em conjunto com a frustração para o aparecimento de estados fundamentais incomuns. Nos sistemas antiferromagnéticos, as flutuações quânticas são significativas para pequenos valores de spin, enquanto em sistemas ferromagnéticos são menos afetados. A dimensionalidade do sistema influencia nas propriedades críticas de um sistema de spins com frustração, e as flutuações quânticas levam a estados fundamentais diferenciados com propriedades incomuns a baixas temperaturas.

A presença da interação de segundos vizinhos antiferromagnética induz forte frustração para destruir a ordem antiferromagnética, e juntamente com as flutuações em regiões de pontos críticos exibem uma fase paramagnética quântica LS [31]. O estado líquido de spin é caracterizado pela existência de estados singletos distribuídos aleatoriamente sobre uma rede cristalina, e a presença de gap (diferença de energia entre o primeiro estado excitado e estado fundamental). O desconhecimento da fase LS é a motivação de muitos estudos, pois poderia explicar o fenômeno físico responsável pelo emparelhamento dos pares de Cooper nos compostos supercondutores a altas temperaturas formados por planos de CuO_2 , por exemplo, o composto La_2CuO_4 quando dopado com elemento alcalino (Ba , Sr), como mostra a figura (2.2).

O modelo de Heisenberg de spin-1/2 antiferromagnético é capaz de descrever as transições de fase quânticas ocasionadas por competições de interações e flutuações quânticas, onde o teorema de Mermin-Wagner [32] afirma não apresentar ordem magnética em temperatura finita ($T > 0$), pois o ordenamento é afetado pelas flutuações quânticas.

Em sistemas antiferromagnéticos, a frustração tende a reduzir as correlações antiferromagnéticas levando à ordem de Néel, quando os spins primeiros vizinhos alinham, predominantemente, antiparalelos. Desse modo, o estado fundamental de sistemas clássicos antiferromagnéticos é do tipo de Néel apenas quando a frustração é pequena, e quando aumentada o estado fundamental passa a exibir um estado helicoidal ordenado.

2.5 Invariância e Quebra de Simetria

A simetria é associada a uma invariância no sistema nas distintas transformações impostas [33, 34]. A teoria de Landau trata da transição entre fases que possuem simetrias distintas, em uma fase de maior simetria denominamos fase desordenada e em outra de menor simetria denominamos fase ordenada. A transição entre as fases ordenada e desordenada corresponde a uma quebra de simetria. As cadeias de spins semi-inteiros que possuem simetria rotacional e translacional não possuem gap, ou têm o estado fundamental degenerado levando a uma quebra de simetria translacional. No caso de cadeias de spins inteiros, apresentam um gap de excitação do espectro.

A simetria é maior na fase desordenada e menor na fase ordenada, havendo uma quebra espontânea de simetria na temperatura crítica. A fase ordenada é constituída por várias fases ordenadas distintas em coexistências que possuem estruturas similares, as estruturas não são arbitrárias mas estão ligadas umas às outras por certas operações de simetria as quais constituem um grupo de simetria (G). Para descrever a fase ordenada introduzimos um parâmetro de ordem, ou seja, uma variável termodinâmica que toma valores não nulos na fase ordenada e se anula na fase desordenada. Quando a quebra de simetria não é induzida por nenhum campo externo, associamos a transição a uma quebra espontânea de simetria.

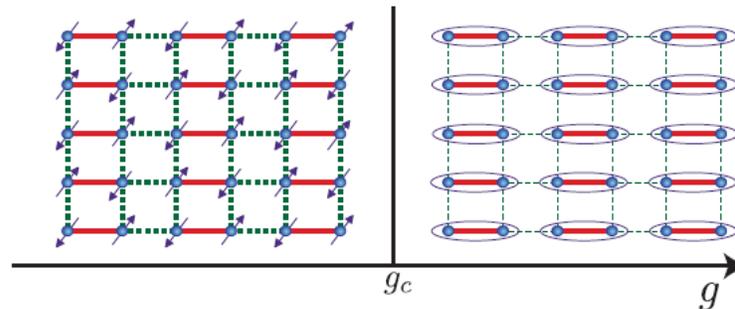


Figura 2.4: Configuração de dímeros antiferromagnéticos. As linhas vermelhas representam a interação de troca J , enquanto as linhas verdes tracejadas têm interação J/g , as elipses representam o enlace dos estados singletos dos spins [35].

A ordem antiferromagnética na figura (2.4) apresenta uma quebra de simetria entre um estado de Néel e um estado dimerizado, com interação de troca entre vizinhos mais próximos J ou J/g . Acima do valor g_c o sistema possui estados dimerizados no estado fundamental clássico, e quando $g = 1$ o modelo tem simetria completa na rede quadrada, e este caso é conhecido como estado fundamental de Néel com quebra de simetria de rotação do spin [35]. Quando $g = 1$ e $g \gg 1$, o sistema é induzido à uma transição de fase quântica no estado fundamental deste modelo, os estados são distintos com uma transição de fase quântica quando $g = g_c$.

O estado VBS (*valence-bond solid*) é similar aos dímeros do estado singleto, onde os spins formam ligações virtuais com os vizinhos mais próximos do sítio. No entanto, por causa da simetria na rede quadrada o modelo possui quatro estados colunares equivalentes, como visto na figura (2.5), com uma degenerescência diferente de zero devido a uma quebra espontânea de simetria. Uma transição direta em $g = g_c$ entre os estados de Néel e VBS envolve duas distintas quebras de simetria: a simetria de rotação do spin, que é quebrado apenas no estado de Néel para $g < g_c$, e a simetria de rotação da rede, que é quebrado apenas no estado VBS para $g > g_c$.

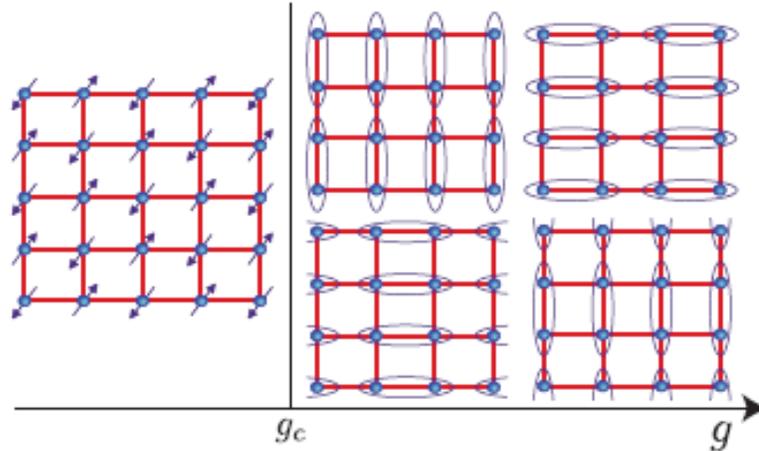


Figura 2.5: Representação de uma rede quadrada antiferromagnética frustrada, preservando o grupo de simetria de uma rede quadrada. Quando $g > g_c$, o estado VBS é quatro vezes degenerado e depende do padrão de cristalização dos singletos [35].

2.6 Modelo $J_1 - J_2$

Este modelo tem sido estudado desde a década de 90, e desperta na atualidade um novo interesse em pesquisas decorrente da descoberta dos supercondutores em altas temperaturas [36]. O modelo $J_1 - J_2$ é descrito pelo Hamiltoniano:

$$H = J_1 \sum_{\langle r,i \rangle} \mathbf{S}_r \cdot \mathbf{S}_i + J_2 \sum_{\langle r,l \rangle} \mathbf{S}_r \cdot \mathbf{S}_l, \quad (2.34)$$

onde a primeira (segunda) soma é feita entre primeiros (segundos) vizinhos com interações J_1 (J_2).

O modelo apresentado na Eq. (2.34) representa um caminho para o entendimento da fase desordenada LS, através da análise do Hamiltoniano de Heisenberg com spin-1/2 numa rede quadrada com interações entre primeiros (J_1) e segundos (J_2) vizinhos, conforme ilustrado na figura (2.6).

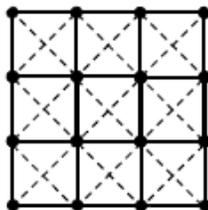


Figura 2.6: Modelo $J_1 - J_2$. Na direção x e y (—) temos a interação J_1 e ao longo das diagonais (- -) temos a interação J_2 .

O sistema possui o parâmetro de frustração $\alpha = J_2/J_1$, existindo duas fases magneticamente ordenadas para pequenos ($\alpha < \alpha_{1c}$) e grandes ($\alpha > \alpha_{2c}$) valores, e separadas por uma fase sem ordem de longo alcance na região intermediária $\alpha_{1c} < \alpha < \alpha_{2c}$. Quando $\alpha < \alpha_{1c}$, o sistema possui ordem antiferromagnética na fase AF (π, π) , e uma ordem colinear antiferromagnética na fase CAF $(\pi, 0)$, ou $(0, \pi)$, quando $\alpha > \alpha_{2c}$. Muitos estudos têm sido realizados para o entendimento da transição de fase quântica deste modelo de spin-1/2 frustrado [37, 38, 39, 40], e, assim, poder avaliar a natureza da transição de

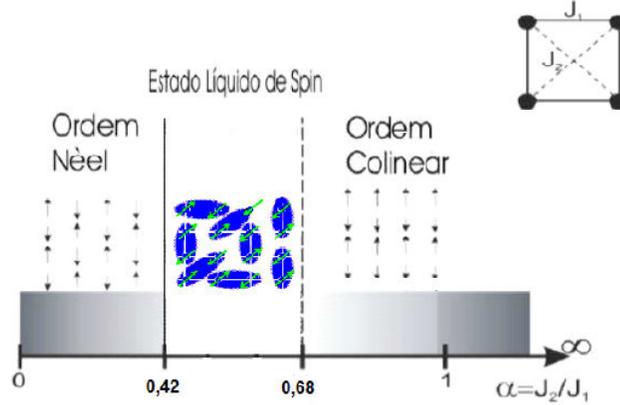


Figura 2.7: Diagrama de fase em $T = 0$ do modelo $J_1 - J_2$ com spin-1/2 numa rede quadrada.

fase nos pontos $\alpha = \alpha_{1c}$ (destruição da fase AF) e $\alpha = \alpha_{2c}$ (destruição da fase CAF), sendo aceito, atualmente, como uma transição de segunda e primeira ordem, respectivamente, no qual podemos confirmar a existência (ou não) da região de estado desordenado, descrito através do estado LS.

O modelo canônico $J_1 - J_2$ tem sido utilizado para descrever as propriedades magnéticas dos compostos formados por óxido de vanádio, como, por exemplo, o composto $Li_2VO Si O_4$, onde medidas de ressonância magnética nuclear (RMN) [38] estimaram que $J_1 \simeq 1.1J_2$. Outros compostos, formados por planos de óxido de vanádio, tipos $Li_2VO G_l O_4$, $VOMo Si O_4$ e $BaCdVO(PO_4)_2$ também são descritos por este modelo $J_1 - J_2$ frustrado, onde todos apresentam em comum um estado fundamental colinear (CAF). Do ponto de vista teórico, podemos esquematizar o diagrama de fase em $T = 0$ do modelo $J_1 - J_2$ numa rede quadrada com spin-1/2 conforme mostrado na figura (2.7).

O estado CAF é caracterizado por uma configuração dos spins orientados paralelamente na descrição do eixo x (y) e alternados em direções opostas ao longo do eixo y (x). Notemos que o estado CAF é degenerado possuindo as duas configurações de spins em linha e coluna com a mesma energia. O estado intermediário desordenado, aqui de-

notado por estado líquido de spin (LS), tem uma característica bem diferente do estado desordenado canônico paramagnético, pois o estado LS tem a presença de gap que reflete no comportamento das propriedades termodinâmicas no limite de $T \rightarrow 0$. Por exemplo, o calor específico nesta fase LS tem o comportamento $c(T \rightarrow 0) \approx e^{-\Delta/T}$, onde Δ representa o gap assemelhando-se bastante com o comportamento dos supercondutores, sendo Δ a energia correspondente ao emparelhamento dos pares de Cooper. Note que nos supercondutores tradicionais (baixa temperatura, $T_c \lesssim 25K$) o gap $\Delta \simeq \hbar w_D$ (energia fônon) e, portanto, estimativas de T_c ($K_B T_c \simeq \Delta \simeq \hbar w_D$, w_D é a frequência de Debye), usando valores característicos para w_D , encontra o limite de $T_c \simeq 25K$. Desta maneira, todos os supercondutores tradicionais ($T_c \leq 25K$) são descritos por uma teoria (BCS) microscópica capaz de explicar todas as suas propriedades. Por outro lado, nos novos supercondutores com altos valores de T_c as propriedades de uma maneira geral não são explicadas usando esta teoria BCS, pois o valor máximo do gap é limitado pelo valor máximo da frequência de Debye, sendo assim não podemos estimar os altos valores para T_c . Estes novos compostos supercondutores de altas temperaturas, em especial os formados por planos de CuO_2 , como, por exemplo, o composto $La_{2-x}Ba_xCuO_4$, que tem um valor $T_c \simeq 36K$ (máximo) e em comum são magnéticos. Especula-se que na fase supercondutora, mesmo não existindo ordem magnética de longo alcance, o estado desordenado é do tipo líquido de spin, onde o gap $\Delta \simeq J$ (energia de troca) podendo, assim, estimar estes altos valores para T_c ($k_B T_c \simeq \Delta \simeq J$). O mecanismo microscópico que descreve estes novos compostos supercondutores em altas temperaturas não é compreendido, mas certamente a interação entre os pares de Cooper são devida a energia de troca. Por esta razão, compreender as características do estado LS pode ser fundamental para modelagem do mecanismo destes compostos supercondutores de altas temperaturas.

Do ponto de vista experimental, a maioria dos compostos formados por óxidos de vanádio, como, por exemplo, o Li_2VOGeO_4 apresentam um ordenamento CAF $3d$ com $\alpha (= J_2/J_1) \simeq 1$. Recentemente, este composto colocado sob a ação de pressão na direção do eixo de fácil magnetização reduz em até 40% do valor do parâmetro de frustração α ,

o que de certa forma podemos obter parte do diagrama de fase em $T \simeq 0$ e analisar a estrutura dos aglomerados no estado LS experimental. Os dados experimentais ainda não foram capazes de estabilizar o cristal sobre pressão elevada e encontrar o estado LS experimentalmente, mas pesquisas em andamento têm-se mostrado promissoras e motivadores para o real entendimento deste estado quântico desordenado.

O modelo $J_1 - J_2$ com interações de primeiros vizinhos ferromagnéticas $J_1 < 0$ e de segundos vizinhos antiferromagnéticas $J_2 > 0$ foi muito menos estudado que o modelo antiferromagnético. Podemos citar alguns trabalhos importantes dentro do contexto de sistemas ferromagnéticos frustrados. O sistema ferromagnético sem a presença de frustração apresenta um estado fundamental ferromagnético, onde todos os spins estão orientados numa mesma direção com uma magnetização total diferente de zero. Quando a frustração se torna apreciável em relação às interações ferromagnéticas e as flutuações crescem, podem surgir novos estados fundamentais como o estado colinear e ainda a fase paramagnética quântica intermediária entre as fases ferro e colinear. No caso clássico para $J_2/J_1 = 0.5$ existe uma transição de fase de primeira ordem entre a fase ferromagnética, com magnetização diferente de zero, e a fase colinear que tem magnetização total nula.

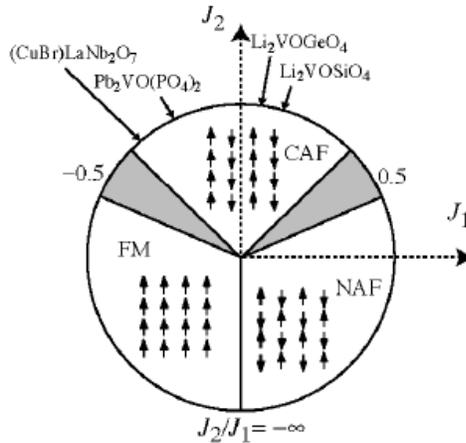


Figura 2.8: Diagrama de fase para o Modelo $J_1 - J_2$ numa rede quadrada, onde estão representados os estados: $(0,0)$ ferromagnético FM, (π, π) antiferromagnético de Néel NAF, ou AF, e $(\pi, 0)$ colinear antiferromagnético CAF [41].

Na ausência de interações entre segundos vizinhos, isto é, $J_2 = 0$, o estado fundamental ($T = 0$) tem ordenamento AF que é caracterizado classicamente pelos spins alternados em sentidos opostos sobre toda a rede quadrada (Estado de Néel). A presença da interação $J_2 > 0$ induz no sistema frustração magnética que destrói esta ordem AF (ou Néel). Quando o parâmetro de frustração $\alpha = J_2/J_1$ é aumentado, o sistema sofre uma mudança de fase quando atinge um valor crítico nas fases AF e CAF, como apresentado na figura (2.9) através do método de ondas de spin linear para spin-1/2 e 1 numa rede quadrada. Notamos que a medida que o valor do spin cresce, a fase desordenada (LS) na região $\alpha_{1c} < \alpha < \alpha_{2c}$ diminui gradativamente, de modo que, no limite clássico ($S \rightarrow \infty$) a fase LS desaparece e teremos uma transição de fase (primeira ordem) direta entre os estados AF e CAF no ponto $\alpha_c = 1/2$.

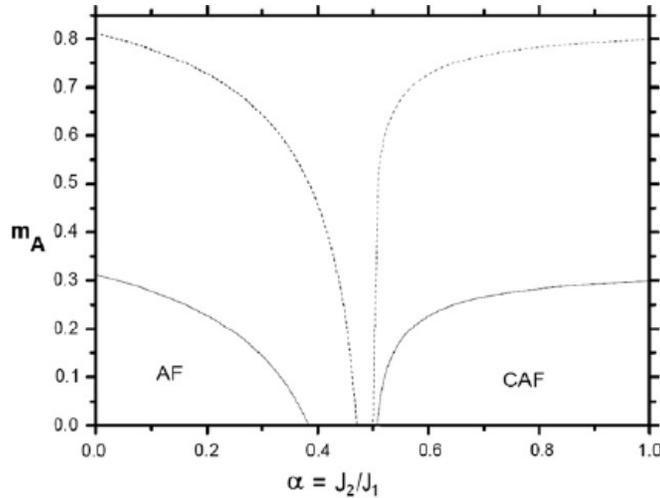


Figura 2.9: Comportamento das magnetizações de sub-rede m_A em função do parâmetro α para o modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$ antiferromagnético com $S = 1/2$ (linhas sólidas) e $S = 1$ (linhas tracejadas), obtido pelo método de ondas de spin linear [42].

Quando $J_1 = 0$, as duas sub-redes estão desacopladas e individualmente ordenadas antiferromagneticamente. No estado fundamental, a relação de α , com valores não-nulos e menores que o valor crítico, mantém as duas sub-redes livres para rotacionar. No entanto, flutuações quânticas elevam esta degenerescência com o estado ordenado colinear,

levando a uma quebra na simetria de rotação do spin como em um antiferromagneto, e, adicionalmente, a simetria rotacional da rede quadrada [43].

O estudo do diagrama de fase de antiferromagnetos permite a compreensão das flutuações quânticas e a diminuição da ordem de longo alcance, que neste caso, pode ser estabilizado quando a dimensionalidade da rede (d), a simetria do Hamiltoniano (n) e valor do spin (S) são reduzidos. As propriedades críticas com frustrações dos spins são apresentadas quando a desordem de um sistema com spins interagentes é aumentada. Um consenso existe sobre a não-existência do estado líquido de spin LS no modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$ ($n = 3$) no limite $S \rightarrow \infty$, quando somente uma transição de primeira ordem ocorre. Porém, flutuações quânticas podem modificar drasticamente o estado fundamental, diminuindo ordem AF do sistema e induzindo o estado LS no modelo de Heisenberg quântico $J_1 - J_2$ de spin-1/2 numa rede quadrada [44].

2.7 Modelo $J_1 - J'_1 - J_2$

Além da frustração, representada pelo parâmetro α , outros fatores influenciam na destruição do estado LS neste modelo $J_1 - J_2$ como, por exemplo, anisotropia no exchange (η), dimensionalidade (λ) e valor do spin (S). No limite Ising que corresponderá ao limite $\eta = 0$, este estado intermediário LS está ausente apresentando apenas uma transição de fase de primeira ordem independente da dimensionalidade [38, 39]. O aumento da dimensionalidade (λ) tem como consequência a diminuição das flutuações quânticas, assim sendo, é verificado que o modelo $J_1 - J_2$ em redes tridimensionais, também não apresenta este estado LS [40]. Uma forma de estudar o comportamento de crossover entre as dimensionalidades $2d$ e $3d$ tem sido feita usando planos com simetria de uma rede quadrada (modelo $J_1 - J_2$) interagindo através de um acoplamento λ ($\lambda = 0$ corresponde aos planos desacoplados), onde foi mostrado, utilizando diversas metodologias [44, 45, 46], que existe um certo valor característico λ_c no qual, para $\lambda < \lambda_c$ temos um comportamento tipo $2d$ com presença de fase intermediária (LS), enquanto que para $\lambda > \lambda_c$

temos um comportamento tipo 3d não existindo assim o estado LS, apresenta apenas uma transição de fase (primeira ordem) direta entre os estados CAF e AF.

Uma outra generalização do modelo $J_1 - J_2$ foi proposto por Nersesyan e Tsvelik [47], considerando que o Hamiltoniano na Eq. (2.34) seria apenas um caso particular de outro ainda mais geral. Além da competição antiferromagnética de frustração dos segundos vizinhos, existe também agora uma competição entre cadeias lineares de spin e por isso este modelo é atribuído a compostos com uma estrutura quasi-unidimensional, e é dado por

$$H = J_1 \sum_{\langle r,i \rangle} \mathbf{S}_r \cdot \mathbf{S}_i + J'_1 \sum_{\langle r,j \rangle} \mathbf{S}_r \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle r,l \rangle} \mathbf{S}_r \cdot \mathbf{S}_l, \quad (2.35)$$

onde a primeira soma é entre primeiros vizinhos ao longo do eixo x, e a segunda ao longo do eixo y.

A configuração dos spins no modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ é essencialmente antiferromagnética, sendo que na figura (2.10) haverá uma interação J_1 ao longo da direção x , J'_1 ao longo da direção y e J_2 ao longo da direção diagonal da rede.

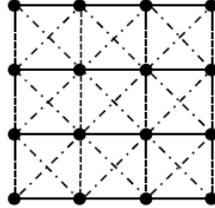


Figura 2.10: Modelo $J_1 - J'_1 - J_2$. Na direção x (—) J_1 , na direção y (- - -) J'_1 e ao longo das diagonais (- · -) J_2 .

Os sistemas de spin são sempre muito interessantes pois são capazes de descrever através das mais variadas ferramentas, diversas informações devido principalmente à forte influência das flutuações quânticas nos sistemas fortemente correlacionados. As flutuações quânticas podem ser reduzidas variando tanto os termos anisotrópicos no Hamiltoniano

quanto o número quântico de spin \mathbf{S} . Assim, os problemas de spin quântico numa rede mantêm uma importante regra no estudo das transições de fase quântica.

As três interações distintas apresentadas na figura (2.10) resultam nas três configurações possíveis entre spins apresentadas na figura (2.11) para sistema antiferromagnético, tal que a representação antiferromagnética é alterada para uma representação colinear antiferromagnética na ocorrência da frustração de spins.

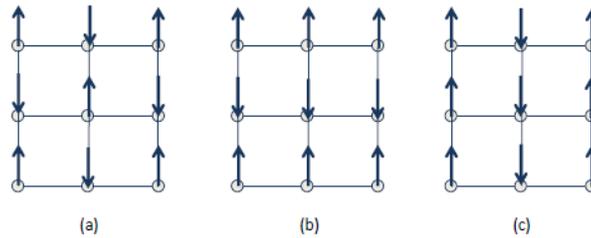


Figura 2.11: Representação dos spins na configuração (a) antiferromagnética, (b) colinear antiferromagnética em linha e (c) colinear antiferromagnética em coluna.

Alguns trabalhos têm explorado o modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ para o caso de spin-1/2, no qual podemos citar o artigo publicado por Bishop e colaboradores [48] no qual abordou seu estudo através do método do cluster acoplado (CCM), onde para o limite $J_1 = J'_1$ obteve os parâmetros críticos³ $\alpha_{1c} \simeq 0.3$ e $\alpha_{2c} \simeq 0.6$, com transição de segunda ordem e uma região intermediária.

Esta generalização do modelo $J_1 - J_2$ tem sido usada em cálculo de estruturas de bandas [49]. Para descrever os compostos de fosfato de vanádio $ABVO(PO_4)$ ($AB = Pb_2, SrZn$ e $BaCd$), onde quatro inequivalências nos acoplamentos J_1 e J'_1 entre primeiros vizinhos e J_2 entre segundos vizinhos (diagonais). Por exemplo, no caso particular do composto $SrZnVO(PO_4)_2$ foram estimados os valores $J'_1/J_1 \simeq 0.7$ e $J_2/J_1 \simeq 0.4$, causando, assim, uma distorção na rede de spins.

³Os parâmetros críticos α_{1c} e α_{2c} representam os valores correspondentes a uma transição de fase antiferromagnética e colinear antiferromagnética, respectivamente.

O limite clássico ($S \rightarrow \infty$) do modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ apresenta dois estados ordenados (AF e CAF), onde para $\lambda(= J'_1/J_1) > 2\alpha$ e $\lambda < 2\alpha$ temos os estados CAF e AF, respectivamente. Ou seja, existe uma linha de coexistência $\lambda = 1/2$ entre estes dois estados ordenados. Por outro lado, flutuações quânticas ($S < \infty$) têm um papel significativo no diagrama de fase no plano $\lambda - \alpha$ em $T = 0$. No caso particular de spin-1/2, devido a fortes flutuações quânticas combinadas ao efeito da frustração magnética induze-se o estado intermediário LS. O método da diagonalização exata [50] apresentou duas linhas críticas em $\alpha_{CAF} = \alpha_c + \frac{5\lambda^2}{8\pi^2}$ para a transição entre as fases CAF e LS e, em $\alpha_{AF} = \alpha_c - \frac{\lambda^2}{8\pi^2}$ entre as fases AF e LS, onde $\alpha_c = \lambda/2$ é o valor clássico. Este resultado preliminar indica que o estado LS existe para todo valor de $0 < \lambda \leq 1$. A variação do parâmetro intercadeia λ tem o papel de caracterizar o crossover entre as dimensões $2d$ e $1d$ (quasi- $1d$). O diagrama de fase no plano $\lambda - \alpha$ obtido através do método da diagonalização exata está qualitativamente equivalente aos resultados encontrados por Starykh e Balents [51] usando teoria de campo, conforme mostra o diagrama de fase na figura (2.12).

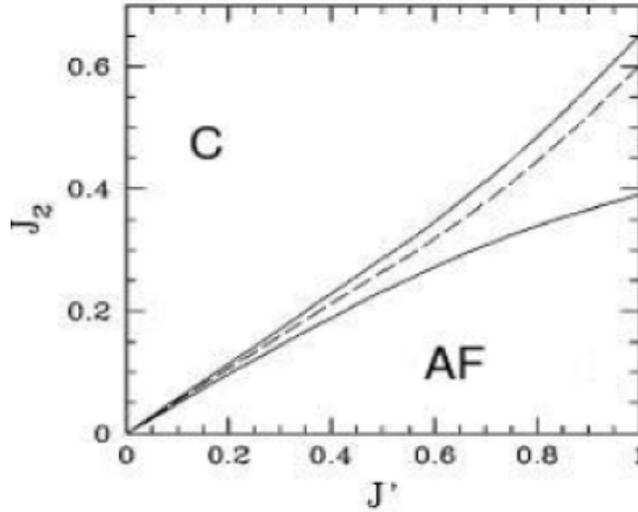


Figura 2.12: Diagrama de fase em $T = 0$ no plano $J' - J_2$ para o modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético na rede quadrada de spin-1/2 obtido pelo método da diagonalização exata [51].

Por outro lado, no trabalho dos autores de Bishop e colaboradores, usando CCM, foi observado um diagrama de fase diferente do apresentado na figura (2.12). Um *crossover* de dimensionalidade tem sido encontrado com a diminuição do parâmetro entre cadeias λ , de tal modo que para $\lambda > \lambda_1 \simeq 0.6$ temos um comportamento tipo $2d$ com presença do estado intermediário LS entre as fases ordenadas CAF e AF, que diminui monotonicamente com o decréscimo do valor de λ , desaparecendo quando é atingido no ponto multicrítico em $\lambda = \lambda_1$. Estes autores definiram erroneamente o ponto multicrítico como sendo um QTP ("*quantum triple point*"), mas o termo adequado é chamado de QCE ("*quantum critical endpoint*") [52]. A fim de desvendar o verdadeiro comportamento do diagrama de fase, ou seja, investigar se existe ou não o QCE, outras técnicas aproximativas devem ser aplicadas. Recentemente, duas técnicas diferentes: teoria de campo efetivo [53] e método variacional [54] foram aplicadas e observaram a existência de um QTP no diagrama de fase, conforme mostrado na figura (2.13).

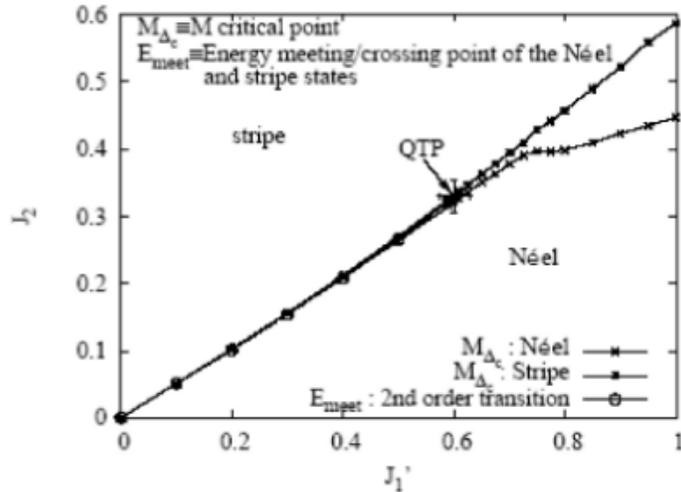


Figura 2.13: Diagrama de fase em $T = 0$ no plano $J_1' - J_2$ do modelo $J_1 - J_1' - J_2$ antiferromagnético de spin-1/2 numa rede quadrada obtido pelo CCM [48].

Devido às limitações dos métodos de diagonalização exata em redes pequenas e à teoria de campo renormalizada, acreditamos que o verdadeiro diagrama de fase do modelo

$J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético de spin-1/2 numa rede quadrada deve apresentar o QCE, conforme mostrado na figura (2.13).

O estudo de sistemas de baixa dimensionalidade é um problema interessante tanto teoricamente como experimentalmente na física da matéria condensada. Do ponto de vista experimental temos as propriedades magnéticas nos compostos quasi-2d tais como Rb_2MnF_4 , K_2NiF_4 , K_2MnF_4 , K_2CuF_4 , $NiCl_2$, $BaNi(PO_4)_2$, filmes magnéticos, etc. Outros exemplos, temos os compostos quasi-1d Sr_2CuO_3 , $CaCuO_3$, $Sr_2V_3O_9$, $BaCu_2Si_2O_7$, $Sr_2Cu(PO_4)_2$ e $Ba_2Cu(PO_4)_2$, onde as propriedades magnéticas são bem descritas teoricamente por um modelo de Heisenberg antiferromagnético com spin-1/2 quasi-1d.

Do ponto de vista teórico, diversos autores [55, 56, 57, 58, 59] têm estudado o modelo (2.35) com $J_2 = 0$ (sem frustração) a fim de analisar a influência da anisotropia espacial λ no comportamento da magnetização de sub-rede (ou magnetização alternada m_s) m_A , no estado fundamental.

Em $T = 0$ temos que $m_A(\lambda) = 1/2 - \Gamma(\lambda)$ que decresce monotonicamente com a diminuição de λ . No limite da rede quadrada ($\lambda = 1$), mesmo devido as flutuações quânticas, representadas pela função $\Gamma(\lambda)$, o sistema apresenta uma ordem de longo alcance com $m_A(\lambda = 1) \simeq 0.31$. Sendo o parâmetro λ medindo a mudança da dimensionalidade, de modo que a sua diminuição reduz a dimensão $2d$ para $1d$ ("crossover") o que faz aumentar as flutuações quânticas. Desta maneira, no limite unidimensional ($\lambda = 0$) as flutuações quânticas são tão fortes que destroem a ordem de longo alcance do sistema, ou seja, $m_A(\lambda = 0) = 0$. Uma questão básica que tem sido estudada é analisar a partir de qual valor de λ ($\lambda > \lambda_c$) o modelo de Heisenberg antiferromagnético com spin-1/2 quasi-1d apresenta ordem de longo alcance, $m_A(\lambda) \neq 0$. A existência de um $\lambda_c > 0$ significa que em $\lambda = \lambda_c$ temos uma transição de fase quântica, onde para $\lambda > \lambda_c$ temos ordem de longo alcance AF e $\lambda < \lambda_c$ temos um estado desordenado tipo líquido de spin. Por exemplo, a teoria de ondas de spin tem encontrado $\lambda_c \simeq 0.034$ e a análise de grupo de renormalização em um *loop* [60] obteve $\lambda_c \simeq 0.047$. A expansão em série [61] tem estimado que $\lambda_c \lesssim 0.02$. Outros resultados têm encontrado o valor nulo, $\lambda_c = 0$, que é mais plausível por causa do

estado fundamental deste modelo quasi-1d não apresentar gap, indicando um comportamento assintótico quase $\lambda \rightarrow 0$ tipo lei de potência $m_A(\lambda) \approx \lambda^x$. Os tratamentos tipo campo médio [62, 63, 64] encontram a potência característica $x = 1/2$. Usando teoria de ondas de spin renormalizada [65] quando $\lambda \rightarrow 0$ foi previsto o comportamento logaritmo $m_A(\lambda) \approx 1/\ln(1/\lambda)$.

O problema do pequeno acoplamento entre cadeias de Heisenberg antiferromagnética com spin-1/2 é fundamental para ser estudado, e por isto ainda tem recebido atenção para desvendar o verdadeiro comportamento em $T = 0$ das grandezas termodinâmicas quando $\lambda \rightarrow 0$. Podemos citar o resultado mais recente usando método variacional [66] que indica $\lambda_c = 0$ com comportamento assintótico $m_A(\lambda) \approx \lambda^{1/2}$ ($\lambda \rightarrow 0$).

A priori, o resultado para $\lambda_c = 0$ no modelo de Heisenberg antiferromagnético quasi-1d é aceito para o caso de spin-1/2. Por outro lado, existem poucos estudos no modelo (2.35) com spin-1. Há grande diferença do comportamento das grandezas termodinâmicas numa cadeia de Heisenberg antiferromagnética quando usamos spin inteiro ou semi-inteiro. No caso de spin semi-inteiro ($S = 1/2, 3/2, \dots$) o sistema não apresenta gap e apresenta comportamento assintótico das suas grandezas termodinâmicas com lei de potência, como, por exemplo, o calor específico $c(T) \approx T^n$ ($T \rightarrow 0$). Para spin inteiro ($S = 1, 2, \dots$) temos gap e isto é refletido diretamente no comportamento das grandezas termodinâmicas em baixa temperatura, sendo do tipo $c(T) \simeq T^n \exp(-\Delta/T)$ ($T \rightarrow 0$), onde Δ é o gap do sistema, para o calor específico. Assim sendo, não devemos esperar o mesmo comportamento, necessariamente, do sistema com spin-1 em comparação ao caso de spin-1/2 descrito anteriormente.

O primeiro estudo do modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ numa rede quadrada com spin-1 foi feito por Bishop e colaboradores [67] usando CCM ("*cluster coupled method*"). O diagrama de fase no plano $\lambda - \alpha$ não apresenta o estado intermediário desordenado (LS) entre os estados ordenados AF e CAF, e sim uma transição de fase direta entre os estados AF e CAF. Para λ acima de um certo valor característico $\lambda_1 \simeq 0.7$ temos transição de fase de segunda ordem, e $\lambda < \lambda_1$ uma transição de primeira ordem com a presença de um ponto

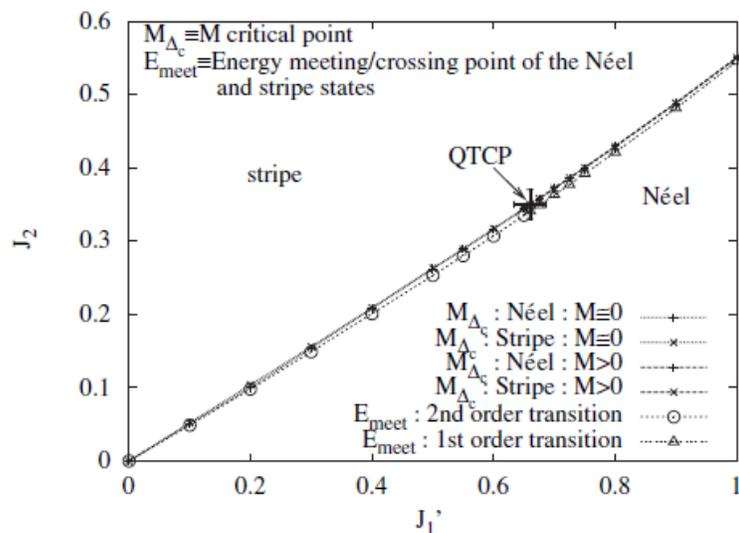


Figura 2.14: Diagrama de fases no plano $J_1' - J_2$ do modelo antiferromagnético com $S=1$ obtido pelo método CCM numa rede quadrada [67].

tricrítico (PTC) separando as duas linhas de transição. Na figura (2.14) apresentamos o resultado obtido neste modelo frustrado com spin-1 usando CCM. Mesmo sabendo que o aumento no valor do spin (S) reduz as flutuações quânticas, esperamos que na rede quadrada isotrópica ($\lambda = 1$) exista ainda o estado LS que deve desaparecer apenas no limite clássico ($S \rightarrow \infty$). Especulamos, assim, que estes resultados usando CCM não são conclusivos e necessitam de futuras investigações usando outros métodos. Este será o objetivo deste trabalho, onde aplicaremos os métodos de ondas de spin linear e operador de Sachdev. Outro objetivo deste presente trabalho será investigar o comportamento da magnetização de sub-rede m_A como uma função do parâmetro de frustração λ para o estado AF e comparar com o resultado de spin-1/2.

Capítulo 3

Teoria de Ondas de Spin

3.1 Introdução

A teoria de ondas de spin é provavelmente uma das ferramentas mais poderosas utilizada na descrição do magnetismo. Originalmente proposta por Bloch [68, 69] e Holstein e Primakoff [70] como uma teoria para o estado ferromagnético, foi mais tarde estendida para o estado antiferromagnético por Anderson [71], Kubo [72] e Oguchi [73].

O comportamento físico dos ferromagnetos em baixas temperaturas atraiu grande atenção por apresentar no estado fundamental ($T = 0K$) um alinhamento paralelo dos spins. Em 1930, Bloch introduziu o conceito de ondas de spin como uma forma de estudar o comportamento físico dos materiais ferromagnéticos no estado fundamental.

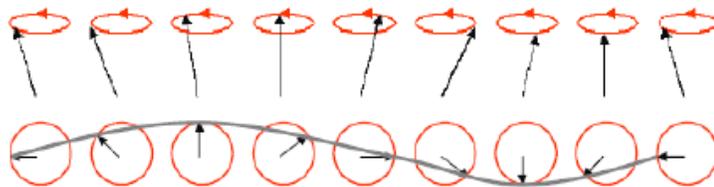


Figura 3.1: Onda de spin unidimensional com propagação ao longo de uma rede cristalina com uma vista (a) em perspectiva e (b) de topo.

O tratamento matemático feito por Bloch para o estudo de ondas de spin nos ferromagnetos foi semi-clássico, onde utilizou a equação de movimento na descrição da dinâmica dos spins (segunda lei de Newton do movimento de rotação) através do Hamiltoniano de Heisenberg que descreve microscopicamente as interações entre os spins localizados numa rede cristalina. Numa primeira aproximação, Bloch descreve que é fisicamente aceitável no regime de baixas temperaturas ($T \ll T_c$) obter uma dinâmica de spins correspondentes à precessão dos spins em torno da posição de equilíbrio (eixo z), acoplados através da energia de troca. A relação de dispersão apresenta um comportamento quadrático com o vetor de onda ($w \approx k^2$).

Bloch mostrou que os estados excitados próximos do estado fundamental podem ser descritos pela superposição de ondas desse tipo, e o comportamento da magnetização espontânea que é dada por

$$M \simeq M_0 - aT^{3/2} \quad (3.1)$$

onde $M_0 = M(T = 0)$ é a magnetização de saturação e a constante a , bem como M_0 , depende do material ferromagnético estudado. A expressão (3.1) representa o comportamento em baixas temperaturas de um ferromagneto típico, confirmado experimentalmente e conhecido na literatura como lei $T^{3/2}$ de Bloch.

A superposição linear das ondas de spin de Bloch possui duas idéias importantes:

1) o número de spins na rede é "finito" e, portanto, deve ser considerado algum tipo de interação que limite o número de ondas excitáveis. Essa interação local foi denominada por Dyson de "interação cinemática";

2) por outro lado, a energia para a inversão de spins localizados na vizinhança de um spin invertido é menor do que a energia para a inversão de spins alinhados e isso dá origem à "interação dinâmica".

Algumas características das ondas de spins não aparecem no tratamento semi-clássico porque são de natureza intrinsecamente quântica, mas outras propriedades, como a relação de dispersão, podem descrever as duas situações. A abordagem quântica pode ser

feita de várias maneiras, aqui utilizaremos o formalismo da segunda quantização, onde a energia do sistema é escrita em termos de operadores de criação e destruição de quanta (mágnon) de ondas de spins.

No ferromagnetismo, Dyson argumentou que estas aproximações levariam a resultados que são corrigidos assintoticamente em baixas temperaturas (T) para todas as ordens. No entanto, para o caso antiferromagnético, a situação é menos resolvida devido ao movimento de ponto zero, ou seja, as flutuações quânticas de spin no estado de Néel. O método de Dyson foi generalizado por Harris e colaboradores [74] para calcular de forma sistemática correlações spin-spin, amortecimento de ondas de spin, e várias propriedades termodinâmicas de antiferromagnetos.

O tratamento quântico das ondas de spin no ferromagneto de Heisenberg foi desenvolvido na década de 1940 por Holstein e Primakoff [70], onde é possível descrever o estado quântico do sistema, com uma transformação de operadores de spin, denominada transformação de Holstein-Primakoff (HP), em termos das amplitudes das ondas de spin que são representados por operadores bosônicos de criação e destruição. A presença desses operadores de spins não permite desvios maiores que $2S$ (S é a magnitude do spin), reduzindo também as interações cinemáticas associadas na segunda quantização.

As transformações de HP permitem escrever o Hamiltoniano em termos quadráticos na amplitude das ondas de spins, e nesta forma foi deduzida a superposição linear de Bloch a lei $T^{3/2}$, onde os termos de ordem superiores representam as interações dinâmicas. As correções dinâmicas não foram exploradas de imediato, quando em 1954 Schafrothf [75] e em 1955 Kranendonckf [76] apresentaram termos da ordem de T^2 e de $T^{7/4}$.

Uma análise feita por Dyson para as interações de ondas de spin [77] demonstrou a possibilidade de serem usadas expansões assintóticas das funções termodinâmicas do ferromagneto de Heisenberg em baixas temperaturas, onde apresentou em seu trabalho um cálculo rigoroso da energia livre em termos das ondas de Bloch, levando em consideração as interações cinemáticas e dinâmicas, num tratamento análogo ao da teoria de campo com interações fracas na eletrodinâmica quântica. Foi, então, estabelecido a inexistência

dos termos $T^{7/2}$ e T^2 na magnetização espontânea, cuja origem estaria no tratamento inadequado da interação cinemática. Segundo o trabalho de Dyson, a contribuição dessa interação é desprezível e a contribuição da interação dinâmica é da ordem em T^4 , obtendo assim uma expansão assintótica do tipo

$$M = M_0 - A_1 T^{3/2} - A_2 T^{5/2} - A_3 T^{7/2} - A_4 T^4 \quad (3.2)$$

onde as potências semi-inteiras da temperatura são devidas às ondas de spins livres (cinemática) e a quarta potência é devida às interações ente elas (dinâmica).

3.2 Transformação de Holstein e Primakoff

Assim como revisamos na seção (2.2), precisamos dividir o sistema antiferromagnético em duas sub-redes (A e B) interpenetrantes e independentes entre si. No caso antiferromagnético, a magnetização total da rede é nula, $m_A + m_B = 0$, onde m_A (m_B) é a magnetização por spin da sub-rede A (B). No subespaço dos spins na sub-rede A (spins apontando no sentido positivo do eixo z), a ação do operador levantamento no sítio $i \in A$, S_i^+ , sobre o estado $|m_i\rangle$ é alterar para o estado $|m_i + 1\rangle$, e na representação dos operadores de bósons, $n_i = S - S_i^z = a_i^\dagger a_i$ teremos um decréscimo de uma unidade, ou seja, temos uma mudança no estado $|n_i\rangle$ para o estado $|n_i - 1\rangle$.

Para N sítios na rede, com idênticas magnitudes de spin S , o Hamiltoniano de Heisenberg é dado por

$$H = \sum_{\langle i, \delta \rangle} J_{i, i+\delta} \left[\frac{1}{2} (S_i^- \cdot S_{i+\delta}^+ + S_i^+ \cdot S_{i+\delta}^-) + S_i^z \cdot S_{i+\delta}^z \right], \quad (3.3)$$

onde J_{ij} é a energia de interação de troca entre os primeiros vizinhos, com um vetor primeiros vizinhos δ e os operadores de spin de levantamento S_i^+ e de abaixamento S_i^- .

Podemos construir operadores em cada sítio da rede cujos autovalores (números que variam de zero a $2S$ desvios) representam os desvios dos spins em relação ao seu autovalor

máximo. A componente z dos operadores de spin é escolhida como eixo de referência e o conjunto de operadores de desvios é definido por

$$\hat{n}_i = S - S_i^z, i = 1, \dots, N \quad (3.4)$$

e que obedece as seguintes relações de comutação:

$$[n_i, S_i^z] = [n_i, \mathbf{S}_i^2] = 0 \quad (3.5)$$

gerando um conjunto de observáveis compatíveis $\{n_i, S_i^z, \mathbf{S}_i^2\}$ e base de autoestados comuns de n_i de dimensão $2S + 1$.

Os operadores S^+ e S^- não comutam com o operador S^z , não formando uma base comum de autoestados quânticos acessíveis ao sistema, portanto, temos os novos estados

$$S_i^+ |n_i\rangle = \sqrt{n_i(2S + n_i - 1)} |n_i - 1\rangle, \quad (3.6)$$

$$S_i^- |n_i\rangle = \sqrt{(n_i - 1)(2S - n_i)} |n_i + 1\rangle \quad (3.7)$$

e

$$S_i^z |n_i\rangle = (S - n_i) |n_i\rangle, \quad (3.8)$$

que representam a atuação destes operadores em uma base $\{|n_i\rangle; i = 1, \dots, N\}$.

Na mecânica quântica, a transformada de Fourier é uma ferramenta essencial para a solução e a interpretação da equação de Schrödinger, relacionando as propriedades de localização e de distribuição de momento da partícula através da função de onda [78].

Devido à simetria de translação numa estrutura cristalina, um sítio particular possui a mesma probabilidade de apresentar um desvio para todos os sítios, onde podemos caracterizar o primeiro estado excitado de um conjunto de N spins pela combinação linear dos estados de desvio único nos sítios. A partir das transformadas de Fourier nos

operadores S_i^+ , S_i^- e S_i^z , definimos os operadores de spins

$$S_k^+ = \frac{1}{\sqrt{2SN}} \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} S_j^-, \quad (3.9)$$

$$S_k^- = \frac{1}{\sqrt{2SN}} \sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} S_j^+ \quad (3.10)$$

e

$$S_k^z = \frac{1}{N} \sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} S_j^z, \quad (3.11)$$

que não satisfazem as regras de comutação da mecânica quântica.

Entretanto, este tipo de transformação modifica a Física do problema original, pois esperávamos que a relação de comutação tivesse a forma

$$[S_k^+, S_{k'}^-] = C\delta_{k,k'} S_k^z, \quad (3.12)$$

já que no espaço das coordenadas temos

$$[S_i^+, S_j^-] = 2S_i^z \delta_{ij} \quad (3.13)$$

e

$$[S_i^z, S_j^\pm] = \pm S_i^\pm \delta_{ij} \quad (3.14)$$

que são as relações de comutação originais. Desta maneira dizemos que as transformadas de Fourier não são canônicas, e, portanto, devemos encontrar um outro tipo de representação para tratar o modelo.

As transformações das componentes dos operadores \mathbf{S}_j em operadores de construção e destruição de bósons (teoria quântica de campo) são transformadas canônicas com uma estatística bem definida no espaço dos momentos. A fim de satisfazer os operadores de

spins (3.9) e (3.10), Holstein e Primakoff propuseram as seguintes transformações

$$S_i^+ = \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}} a_i, \quad (3.15)$$

$$S_i^- = \sqrt{2S} a_i^\dagger \sqrt{1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}} \quad (3.16)$$

e

$$S_i^z = S - a_i^\dagger a_i \quad (3.17)$$

onde os operadores bosônicos de criação a_i^\dagger e destruição a_i criam e aniquilam magnóns nos sítios i da rede, satisfazendo as relações de comutação:

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad (3.18)$$

e

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger] = [a_i, a_j] = 0. \quad (3.19)$$

3.3 Aproximação Linear

A teoria de ondas de spins linear surge, portanto, a partir da expansão binomial de $\sqrt{1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}}$ até primeira ordem, assumindo que $1 \gg \frac{a_i^\dagger a_i}{4S}$. No caso de um sistema antiferromagnético a rede é dividida em duas sub-redes, como foi revisado na seção (2.2), temos os operadores de spin para a sub-rede A

$$\begin{cases} S_{A_i}^+ \approx \sqrt{2S} a_i \\ S_{A_i}^- \approx \sqrt{2S} a_i^\dagger \\ S_{A_i}^z \approx S - a_i^\dagger a_i \end{cases} \quad (3.20)$$

e para a sub-rede B

$$\left\{ \begin{array}{l} S_{B_j}^+ \approx \sqrt{2S}b_j^\dagger \\ S_{B_j}^- \approx \sqrt{2S}b_j \\ S_{B_j}^z \approx -S + b_j^\dagger b_j. \end{array} \right. \quad (3.21)$$

A transformação HP transforma um espaço de spins com métrica finita em um espaço de bósons com métrica infinita. Porém, o erro originado na mudança de espaços foi estudado por Dyson e verificou que é desprezível em baixas temperaturas ($T \ll T_c$) [79].

Usando as transformações (3.20) e (3.21) em (3.3), respeitando a ordem de atuação dos operadores para as sub-redes A_i ($A_{i+\delta}$) e B_i ($B_{i+\delta}$), obtemos

$$H = \sum_{i,i+\delta} J_{i,i+\delta} \left[S \left(a_i^\dagger a_i + b_{i+\delta}^\dagger b_{i+\delta} \right) + S \left(a_i b_{i+\delta} + a_i^\dagger b_{i+\delta}^\dagger \right) \right] + H_0 \quad (3.22)$$

definindo $H_0 = -NS^2J(0)$ a energia de ponto zero com interação $J(0)$.

Os operadores de criação e destruição de bósons são transformados nos operadores

$$\left\{ \begin{array}{l} a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} a_k \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \\ b_{i+\delta} = \frac{1}{\sqrt{N}} b_{k'} \sum_{k'} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_{i+\delta}} \end{array} \right. \quad (3.23)$$

que levam a uma transformada de Fourier no espaço recíproco k .

Os operadores (3.23) e seus respectivos adjuntos atuam na forma

$$\sum_i a_i^\dagger a_i = \frac{1}{N} \sum_{k,k'} a_{k'}^\dagger a_k \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_i} = z \sum_k a_k^\dagger a_k, \quad (3.24)$$

$$\sum_{i+\delta} b_{i+\delta}^\dagger b_{i+\delta} = \frac{1}{N} \sum_{k,k'} b_k^\dagger b_{k'} \sum_{i+\delta} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_{i+\delta}} = z \sum_k b_k^\dagger b_k, \quad (3.25)$$

$$\sum_{i,i+\delta} a_i b_{i+\delta} = \frac{1}{N} \sum_{k,k'} a_k b_{k'} \sum_{i,i+\delta} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_{i+\delta}} = z\delta_k \sum_k a_k b_k \quad (3.26)$$

e

$$\sum_{i,i+\delta} a_i^\dagger b_{i+\delta}^\dagger = \frac{1}{N} \sum_{k,k'} a_{k'}^\dagger b_k^\dagger \sum_{i,i+\delta} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{i+\delta}} = z\delta_k \sum_k a_k^\dagger b_k^\dagger, \quad (3.27)$$

satisfazendo as mesmas relações de comutação (3.18) e (3.19), onde apresentamos o número de primeiros vizinhos z com o parâmetro de coordenação $\delta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\delta} e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta}$.

A zona de Brillouin é uma formulação de grande importância na física da matéria condensada, definida como uma célula primitiva de Wigner-Seitz na rede recíproca. A célula central da rede recíproca é conhecida como primeira zona de Brillouin, que corresponde ao menor volume limitado por planos perpendiculares ao ponto médio de vetores da rede recíproca traçados a partir da origem [79], como mostra a figura (3.2).

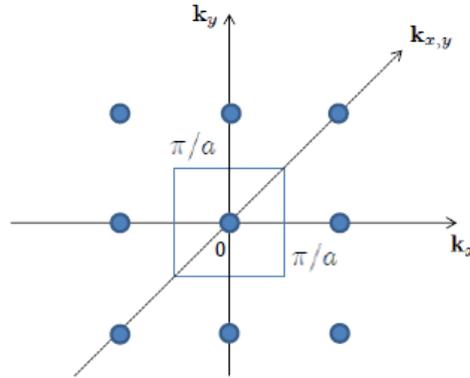


Figura 3.2: Rede recíproca na primeira zona de Brillouin para uma rede quadrada bidimensional com os vetores de primeiros vizinhos em linha (\mathbf{k}_x) e em coluna (\mathbf{k}_y), e de segundos vizinhos nas diagonais ($\mathbf{k}_{x,y}$).

Substituindo (3.24)-(3.27) em (3.22) obtemos

$$H = \sum_k zS J_k \left[\left(a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k \right) + \delta_k \left(a_k b_k + a_k^\dagger b_k^\dagger \right) \right] + H_0 \quad (3.28)$$

sendo apresentadas neste processo o número de primeiros vizinhos z na rede e o parâmetro de coordenação δ_k .

3.4 Transformada de Bogoliubov

O Hamiltoniano (3.28) obtido na aproximação de campo médio é não diagonal e não conserva o número de partículas, portanto, não está escrito na forma de produto das energias das partículas pelos seus operadores número de ocupação. Estados fisicamente possíveis devem ser autoestados do Hamiltoniano, mas sistemas com um número definido de partículas nos vários níveis de energia não são autoestados.

O Hamiltoniano (3.28) é apresentado em termo dos operadores de bósons, na forma

$$H = H_0 + \sum_k [\Lambda_k (a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k) + \Delta_k (a_k b_k + a_k^\dagger b_k^\dagger)] \quad (3.29)$$

com a definição dos termos $\Lambda_k = zS J_k$ e $\Delta_k = zS \delta_k J_k$, e para o caso de uma rede quadrada ($z = 4$) temos os parâmetros de coordenação $\delta_{k_x} = \cos(k_x a)$, $\delta_{k_y} = \cos(k_y a)$ e $\delta_{k_x, y} = \cos(k_x a) \cos(k_y a)$.

O Hamiltoniano (3.29) pode ser transformado em termos dos operadores diagonais $(a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k)$ através do procedimento desenvolvido originalmente por Bogoliubov [80].

Das relações de comutações temos

$$[a_k, a_k^\dagger] = [b_k, b_k^\dagger] = 1 \quad (3.30)$$

e

$$[a_k, b_k] = [a_k, b_k^\dagger] = [a_k^\dagger, b_k] = [a_k^\dagger, b_k^\dagger] = 0, \quad (3.31)$$

e, assim, desejamos encontrar combinações lineares do tipo

$$\begin{cases} a_k = \alpha_k \tilde{a}_k + \beta_k \tilde{b}_k^\dagger \\ b_k = \alpha_k \tilde{b}_k + \beta_k \tilde{a}_k^\dagger \end{cases} \quad (3.32)$$

que preservam a natureza canônica das relações de comutação para estes novos operadores de campo, ou seja,

$$[\tilde{a}_k, \tilde{a}_k^\dagger] = [\tilde{b}_k, \tilde{b}_k^\dagger] = 1 \quad (3.33)$$

e

$$[\tilde{a}_k, \tilde{b}_k^\dagger] = [\tilde{b}_k, \tilde{a}_k^\dagger] = 0. \quad (3.34)$$

Os únicos operadores que devem aparecer no Hamiltoniano são $a_k^\dagger a_k$ e $b_k^\dagger b_k$. Em outras palavras, vamos diagonalizar o Hamiltoniano e os resultantes serão os estados físicos observáveis. Inserindo (3.32) nas expressões (3.30) e (3.31), e utilizando (3.33) e (3.34) assumindo que α_k e β_k sejam reais, temos que:

$$\alpha_k^2 - \beta_k^2 = 1. \quad (3.35)$$

Agora, substituindo os adjuntos de (3.32) no Hamiltoniano (3.29) e reorganizando os termos algébricos, obtemos uma nova expressão:

$$\begin{aligned} H = H_0 + \sum_k \{ & 2\beta_k^2 \Lambda_k + 2\alpha_k \beta_k \Delta_k + [\Lambda_k (\alpha_k^2 + \beta_k^2) + 2\alpha_k \beta_k \Delta_k] (\tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k + \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k) \\ & + [\Delta_k (\alpha_k^2 + \beta_k^2) + 2\alpha_k \beta_k \Lambda_k] (\tilde{a}_k \tilde{b}_k + \tilde{a}_k^\dagger \tilde{b}_k^\dagger) \}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

O Hamiltoniano (3.36) ainda não possui forma diagonalizada, e para isso torna-se necessário eliminar o último termo da expressão anterior, ou seja,

$$\Delta_k (\alpha_k^2 + \beta_k^2) + 2\alpha_k \beta_k \Lambda_k = 0. \quad (3.37)$$

Combinando (3.35) e (3.37) temos

$$\alpha_k^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda_k}{w_k} + 1 \right) \quad (3.38)$$

e

$$\beta_k^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda_k}{w_k} - 1 \right), \quad (3.39)$$

sendo

$$w_k = \sqrt{\Lambda_k^2 - \Delta_k^2}. \quad (3.40)$$

Substituindo este resultado em (3.36) teremos o Hamiltoniano

$$H = w_k \left(\tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k + \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k \right) + (w_k - \Lambda_k) + H_0 \quad (3.41)$$

que consiste a energia do estado fundamental e uma soma de osciladores de energia w_k (relação de dispersão), mostrando que existe um gap de energia para essas excitações.

O valor médio da magnetização [44] é obtida através da expressão

$$m_A = \frac{1}{N} \sum_{i \in A} \langle S_i^z \rangle = S - \frac{1}{N} \sum_{i \in A} \langle a_i^\dagger a_i \rangle, \quad (3.42)$$

cuja transformada de Fourier permite encontrar

$$m_A = S - \frac{1}{N} \sum_k \langle a_k^\dagger a_k \rangle. \quad (3.43)$$

Considerando um Hamiltoniano escrito na forma diagonal com as sub-redes desacopladas, temos o seguinte valor para o número de ocupação:

$$\langle \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k \rangle = \langle \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta w_k} - 1} \quad (3.44)$$

onde o valor médio do número de ocupação é dado pela distribuição de Bose-Einstein com quantum de energia w_k . A natureza quântica do sistema é apreciada quando o número de mágnons em cada vetor \mathbf{k} é pequeno. Quando o número de mágnons é grande ($n_k \gg 1$), a Eq. (3.44) corresponde ao limite de altas temperaturas e o sistema passa a apresentar comportamento clássico.

Para que seja possível avaliar o valor da energia média por spin na região de baixas temperaturas $\mathcal{E}(T) \equiv \langle H \rangle / N$ devemos transformar o somatório dos momentos em uma integral na primeira zona de Brillouin(ZB), ou seja,

$$\frac{2}{N} \sum_k F(\mathbf{k}) = v_0 \int_{1^{\text{a}} ZB} F(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \quad (3.45)$$

onde v_0 é o volume de célula unitária, no caso da rede quadrada $v_0 = a^2$.

A transformação de Holstein-Primakoff leva a uma separação da estrutura em sub-redes, pois aqui tratamos de sistemas antiferromagnéticos, logo temos em $T = 0$ que

$$m_A(0) = S - \Delta m_A, \quad (3.46)$$

sendo m_A a magnetização de sub-rede, S o valor de spin e

$$\Delta m_A = \frac{1}{N} \sum_k \left(-1 + \frac{\Lambda_k}{w_k} \right) \quad (3.47)$$

é a redução da magnetização de sub-rede m_A .

Os antiferromagnetos bidimensionais têm sido amplamente estudados para que houvesse um maior entendimento do estado quântico desordenado de líquido de spin. Quando as interações entre primeiros vizinhos J_1 e J_2 são positivos, o sistema é antiferromagnético, porém duas formas distintas de ordenamento são apresentadas no estado fundamental, como foi visto anos atrás por Chandra e Dacout [82, 83] utilizando o método de ondas de spin linear. O desenvolvimento quantitativo nesta seção pode ser utilizado para avaliar os casos de sistemas antiferromagnéticos [44, 85, 86] $S = 1/2$ e $S = 1$.

3.5 O Modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ Antiferromagnético

O modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ é uma generalização do modelo (2.34), abordado na literatura através de diversas metodologias [87, 88]. O método de ondas de spin linear é utilizado nesta seção para a solução do modelo, assim como apresentado na seção (3.3), com os parâmetros $\lambda = J'_1/J_1$ e $\alpha = J_2/J_1$. Os resultados quantitativos são resolvidos separadamente para as fases AF e CAF para os valores de spin $S = 1/2$ e $S = 1$.

Fase Antiferromagnética (AF)

O estudo da fase AF é iniciado com a divisão do sistema em sub-redes A e B, no qual efetuamos o desacoplamento dos operadores de spin para que seja minimizada a energia nas interações antiferromagnéticas J_2 , conforme apresentamos a seguir:

$$H^{AF} = J_1 \sum_{\langle r,i \rangle} \mathbf{S}_r^A \cdot \mathbf{S}_i^B + J'_1 \sum_{\langle r,j \rangle} \mathbf{S}_r^A \cdot \mathbf{S}_j^B + \frac{J_2}{2} \sum_{\langle r,l \rangle} (\mathbf{S}_r^A \cdot \mathbf{S}_l^A + \mathbf{S}_r^B \cdot \mathbf{S}_l^B). \quad (3.48)$$

A atuação dos operadores de spins em (3.48) geram os termos escalares, na forma

$$\begin{aligned} H^{AF} = & J_1 \sum_{\langle r,i \rangle} \left[\left(S_r^{Ax} S_i^{Bx} + S_r^{Ay} S_i^{By} \right) + S_r^{Az} S_i^{Bz} \right] \\ & + J'_1 \sum_{\langle r,j \rangle} \left[\left(S_r^{Ax} S_j^{Bx} + S_r^{Ay} S_j^{By} \right) + S_r^{Az} S_j^{Bz} \right] \\ & + \frac{J_2}{2} \sum_{\langle r,l \rangle} \left[\left(S_r^{Ax} S_l^{Ax} + S_r^{Ay} S_l^{Ay} \right) + S_r^{Az} S_l^{Az} \right] \\ & + \frac{J_2}{2} \sum_{\langle r,l \rangle} \left[\left(S_r^{Bx} S_l^{Bx} + S_r^{By} S_l^{By} \right) + S_r^{Bz} S_l^{Bz} \right]. \end{aligned} \quad (3.49)$$

As componentes de operadores de spin em x e y não comutam com o operador de Heisenberg, então substituímos estes por operadores de spin de levantamento

$$S_p^+ = S_p^x + iS_p^y \quad (3.50)$$

e de abaixamento

$$S_p^- = S_p^x - iS_p^y \quad (3.51)$$

e aplicando em H^{AF} a atuação identificada em cada sub-rede p , temos que

$$\begin{aligned} H^{AF} = & J_1 \sum_{\langle r,i \rangle} \left[\frac{1}{2} (S_{A,r}^+ S_{B,i}^- + S_{A,r}^- S_{B,i}^+) + S_r^{A_z} S_i^{B_z} \right] \\ & + J_1' \sum_{\langle r,j \rangle} \left[\frac{1}{2} (S_{A,r}^+ S_{B,j}^- + S_{A,r}^- S_{B,j}^+) + S_r^{A_z} S_j^{B_z} \right] \\ & + \frac{J_2}{2} \sum_{\langle r,l \rangle} \left[\frac{1}{2} (S_{A,r}^+ S_{A,l}^- + S_{A,r}^- S_{A,l}^+) + S_r^{A_z} S_l^{A_z} \right] \\ & + \frac{J_2}{2} \sum_{\langle r,l \rangle} \left[\frac{1}{2} (S_{B,r}^+ S_{B,l}^- + S_{B,r}^- S_{B,l}^+) + S_r^{B_z} S_l^{B_z} \right]. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Em seguida, utilizamos as transformações HP no Hamiltoniano (3.52), sendo que

$$\begin{aligned} H^{AF} = & J_1 \sum_{\langle r,i \rangle} S \left[a_r b_i + a_r^\dagger b_i^\dagger + a_r^\dagger a_r + b_i^\dagger b_i \right] \\ & + J_1' \sum_{\langle r,j \rangle} S \left[a_r b_j + a_r^\dagger b_j^\dagger + a_r^\dagger a_r + b_j^\dagger b_j \right] \\ & + \frac{J_2}{2} \sum_{\langle r,l \rangle} S \left[a_r a_l^\dagger + a_r^\dagger a_l - a_r^\dagger a_r - a_l^\dagger a_l \right] \\ & + \frac{J_2}{2} \sum_{\langle r,l \rangle} S \left[b_r^\dagger b_l + b_r b_l^\dagger - b_r^\dagger b_r - b_l^\dagger b_l \right] + E_0^{AF} \end{aligned} \quad (3.53)$$

apresenta uma expressão constituída por operadores bosônicos da teoria de ondas de spin linear, no qual encontramos o valor correspondente à energia de ponto zero

$$E_0^{AF} = -2J_1 N S^2 (1 + \lambda - 2\alpha). \quad (3.54)$$

Aplicando uma transformada de Fourier em (3.53), obtemos a expressão

$$\begin{aligned}
H_1^{AF} &= \sum_k S [z_x + \lambda z_y + \alpha z_{x,y} (\delta_{k_{x,y}} - 1)] \left(a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k \right) \\
&+ \sum_k S [z_x \delta_{k_x} + \lambda z_y \delta_{k_y}] \left(a_k b_k + a_k^\dagger b_k^\dagger \right) + \sum_k [S \alpha z_{x,y} \delta_{k_{x,y}} + E_0^{AF}]
\end{aligned} \tag{3.55}$$

definida por $H_1^{AF} = H^{AF}/J_1$, com os parâmetros de frustração (λ e α), e os parâmetros de rede δ_{k_x} , δ_{k_y} e $\delta_{k_{x,y}}$ (definidas para as interações J_1 , J_1' e J_2 , respectivamente). As interações em linha e coluna (J_1 e J_1') possuem os números de vizinhos $z_x = 2$ e $z_y = 2$, respectivamente, e nas diagonais (J_2) o número de vizinhos é $z_{x,y} = 4$.

Após a transformada de Bogoliubov em (3.55), obtemos o Hamiltoniano

$$\begin{aligned}
\tilde{H}_1^{AF} &= \sum_k [\Lambda_k^{AF} (\alpha_k^2 + \beta_k^2) + 2\Delta_k^{AF} \alpha_k \beta_k] \left(\tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k + \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k \right) \\
&+ \sum_k [\Delta_k^{AF} (\alpha_k^2 + \beta_k^2) + 2\Lambda_k^{AF} \alpha_k \beta_k] \left(\tilde{a}_k \tilde{b}_k + \tilde{a}_k^\dagger \tilde{b}_k^\dagger \right) + H_0^{AF}
\end{aligned} \tag{3.56}$$

onde inserimos uma expressão com os termos independentes de operadores

$$H_0^{AF} = \sum_k [S (2\beta_k^2 \Lambda_k^{AF} + 2\alpha_k \beta_k \Delta_k^{AF} + \alpha z_{x,y} \delta_{k_{x,y}}) + E_0^{AF}], \tag{3.57}$$

sendo as constantes que diagonalizam o modelo definidas por

$$\Lambda_k^{AF} \equiv S [z_x + \lambda z_y + \alpha z_{x,y} (\delta_{k_{x,y}} - 1)] \tag{3.58}$$

e

$$\Delta_k^{AF} \equiv S [z_x \delta_{k_x} + \lambda z_y \delta_{k_y}]. \tag{3.59}$$

Fase Colinear Antiferromagnética (CAF)

O modelo é dividido em sub-redes para obter o mínimo de energia na fase colinear antiferromagnética, desacoplando os termos de interação em coluna (J'_1), ou seja,

$$H^{CAF} = J_1 \sum_{\langle r,i \rangle} \mathbf{S}_r^A \cdot \mathbf{S}_i^B + \frac{J'_1}{2} \sum_{\langle r,j \rangle} (\mathbf{S}_r^A \cdot \mathbf{S}_j^A + \mathbf{S}_r^B \cdot \mathbf{S}_j^B) + J_2 \sum_{\langle r,l \rangle} \mathbf{S}_r^A \cdot \mathbf{S}_l^B. \quad (3.60)$$

Dividimos o Hamiltoniano em termos dos seus elementos escalares, na forma a seguir:

$$\begin{aligned} H^{CAF} = & J_1 \sum_{\langle r,i \rangle} \left[(S_r^{Ax} S_i^{Bx} + S_r^{Ay} S_i^{By}) + S_r^{Az} S_i^{Bz} \right] \\ & + \frac{J'_1}{2} \sum_{\langle r,j \rangle} \left[(S_r^{Ax} S_j^{Ax} + S_r^{Ay} S_j^{Ay}) + S_r^{Az} S_j^{Az} \right] \\ & + \frac{J'_1}{2} \sum_{\langle r,l \rangle} \left[(S_r^{Bx} S_l^{Bx} + S_r^{By} S_l^{By}) + S_r^{Bz} S_l^{Bz} \right] \\ & + J_2 \sum_{\langle r,l \rangle} \left[(S_r^{Ax} S_l^{Bx} + S_r^{Ay} S_l^{By}) + S_r^{Az} S_l^{Bz} \right]. \end{aligned} \quad (3.61)$$

E como apresentado anteriormente, aplicamos os operadores de spin (3.50) e (3.51) no Hamiltoniano (3.61), onde obtemos para a fase CAF

$$\begin{aligned} H^{CAF} = & J_1 \sum_{\langle r,i \rangle} \left[\frac{1}{2} (S_{A,r}^+ S_{B,i}^- + S_{A,r}^- S_{B,i}^+) + S_r^{Ax} S_i^{Bx} \right] \\ & + \frac{J'_1}{2} \sum_{\langle r,j \rangle} \left[\frac{1}{2} (S_{A,r}^+ S_{A,j}^- + S_{A,r}^- S_{A,j}^+) + S_r^{Az} S_j^{Az} \right] \\ & + \frac{J'_1}{2} \sum_{\langle r,j \rangle} \left[\frac{1}{2} (S_{B,r}^+ S_{B,j}^- + S_{B,r}^- S_{B,j}^+) + S_r^{Bz} S_j^{Bz} \right] \\ & + J_2 \sum_{\langle r,l \rangle} \left[\frac{1}{2} (S_{A,r}^+ S_{B,l}^- + S_{A,r}^- S_{B,l}^+) + S_r^{Az} S_l^{Bz} \right] \end{aligned} \quad (3.62)$$

e, assim, encontramos uma expressão em termos de operadores de bósons, apresentada na forma

$$\begin{aligned}
H^{CAF} &= J_1 \sum_{\langle r,i \rangle} S \left[a_r^\dagger a_r + b_i^\dagger b_i + a_r b_i + a_r^\dagger b_i^\dagger \right] \\
&+ \frac{J_1'}{2} \sum_{\langle r,j \rangle} S \left[a_r a_j^\dagger + a_r^\dagger a_j - a_r^\dagger a_r - a_j^\dagger a_j \right] \\
&+ \frac{J_1'}{2} \sum_{\langle r,j \rangle} S \left[b_r^\dagger b_j + b_r b_j^\dagger - b_r^\dagger b_r - b_j^\dagger b_j \right] \\
&+ J_2 \sum_{\langle r,l \rangle} S \left[a_r b_l + a_r^\dagger b_l^\dagger + a_r^\dagger a_r + b_l^\dagger b_l \right] + E_0^{CAF}
\end{aligned} \tag{3.63}$$

onde a energia de ponto zero é descrita como

$$E_0^{CAF} = -2J_1 N S^2 (1 - \lambda + 2\alpha). \tag{3.64}$$

As transformadas de Fourier são aplicadas no Hamiltoniano (3.63), e, com o uso das relações de comutação entre operadores de bósons conseguimos gerar os elementos diagonais, apresentados na expressão

$$\begin{aligned}
H_1^{CAF} &= \sum_k S \left[z_x + \lambda z_y (\delta_{k_y} - 1) + \alpha z_{x,y} \right] \left(a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k \right) \\
&+ \sum_k S \left[z_x \delta_{k_x} + \alpha z_{x,y} \delta_{k_{x,y}} \right] \left(a_k b_k + a_k^\dagger b_k^\dagger \right) \\
&+ \sum_k \left[S \lambda z_y \delta_{k_y} + E_0^{CAF} \right]
\end{aligned} \tag{3.65}$$

onde realizamos a normalização do Hamiltoniano $H_1^{CAF} = H^{CAF}/J_1$, com os parâmetros de frustração (λ e α) e os parâmetros de rede (δ_{k_x} , δ_{k_y} e $\delta_{k_{x,y}}$) com os mesmos números de primeiros ($z_x = z_y = 2$) e segundos vizinhos ($z_{x,y} = 4$), organizando os termos em comum aos operadores.

Aplicando a transformada de Bogoliubov no Hamiltoniano (3.65) encontramos

$$\begin{aligned} \tilde{H}_1^{CAF} = & \sum_k [\Lambda_k^{CAF}(\alpha_k^2 + \beta_k^2) + 2\Delta_k^{CAF}\alpha_k\beta_k] \left(\tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k + \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k \right) \\ & + \sum_k [\Delta_k^{CAF}(\alpha_k^2 + \beta_k^2) + 2\Lambda_k^{CAF}\alpha_k\beta_k] \left(\tilde{a}_k \tilde{b}_k + \tilde{a}_k^\dagger \tilde{b}_k^\dagger \right) + H_0^{CAF}, \end{aligned} \quad (3.66)$$

onde foi definida uma expressão composta por termos independentes de operadores

$$H_0^{CAF} = \sum_k [S(2\beta_k^2\Lambda_k^{CAF} + 2\alpha_k\beta_k\Delta_k^{CAF} + \lambda z_y \delta_{k_y}) + E_0^{CAF}] \quad (3.67)$$

com as constantes que permitem diagonalizar o modelo, dadas por

$$\Lambda_k^{CAF} \equiv S [z_x + \lambda z_y (\delta_{k_y} - 1) + \alpha z_{x,y}] \quad (3.68)$$

e

$$\Delta_k^{CAF} \equiv S [z_x \delta_{k_x} + \alpha z_{x,y} \delta_{k_{x,y}}]. \quad (3.69)$$

As expressões (3.58) e (3.59) para a fase AF são utilizadas para estudar as transições de fase, juntamente com as expressões (3.68) e (3.69) para a fase CAF, assim como foi revisado na seção (3.4). Com estas expressões, vamos construir resultados qualitativos para explorar graficamente as relações entre o parâmetro de ordem m_A e os parâmetros de frustração λ e α , onde a expressão (3.46) permite associar cada uma das fases à uma magnetização de sub-rede através da relação de dispersão w_k (para cada fase é utilizado os fatores $\Lambda_k^{AF,CAF}$ e $\Delta_k^{AF,CAF}$ identificados após a transformada de Bogoliubov).

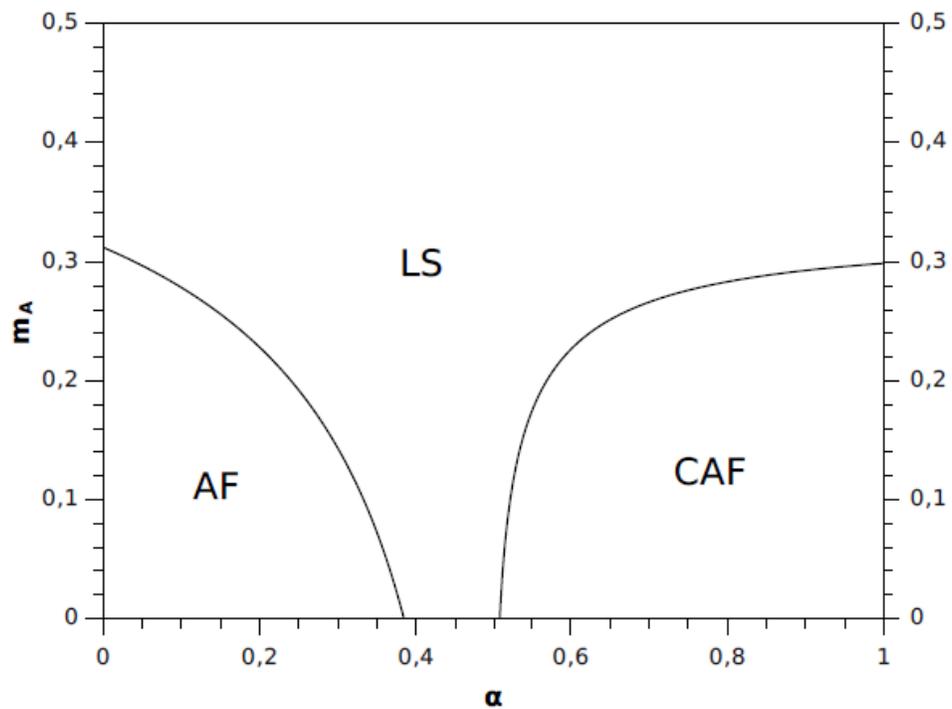


Figura 3.3: Comportamento das magnetizações de sub-rede m_A em função do parâmetro de frustração α para o modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$ antiferromagnético de spin-1/2. As fases AF e CAF possuem transições de fase de segunda ordem entre a fase intermediária LS com parâmetros críticos em $\alpha_{1c} \simeq 0.37$ e $\alpha_{2c} \simeq 0.51$.

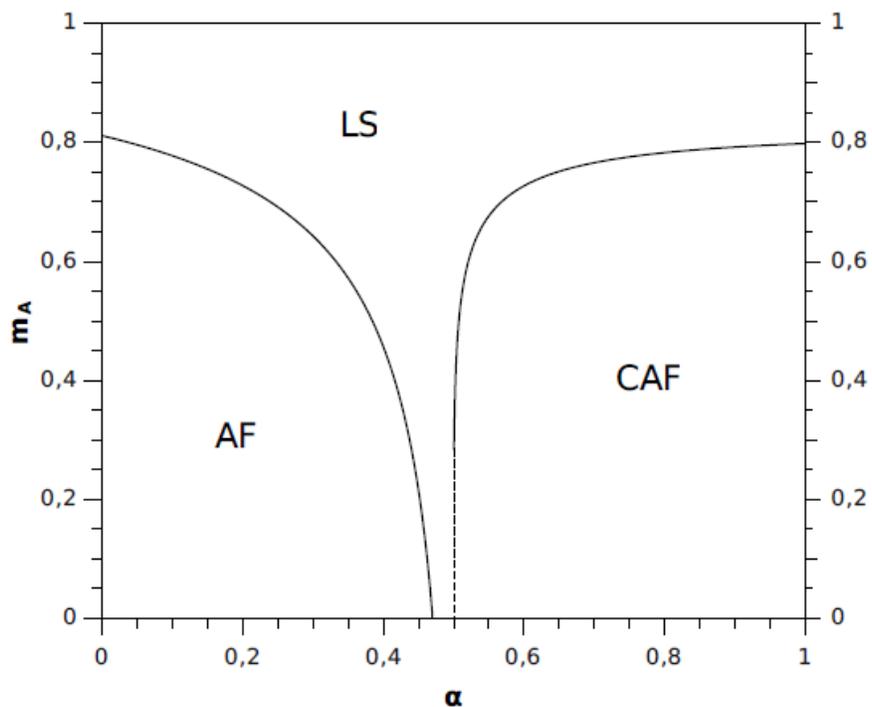


Figura 3.4: Comportamento das magnetizações de sub-rede m_A na fase AF e CAF em função do parâmetro de frustração α do modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$ com spin-1. As curvas sólidas são de transições de segunda ordem, com uma descontinuidade na fase CAF, representada pela curva tracejada, no valor $m_A \simeq 0.28$ com parâmetro $\alpha_{2c} \simeq 0.50$.

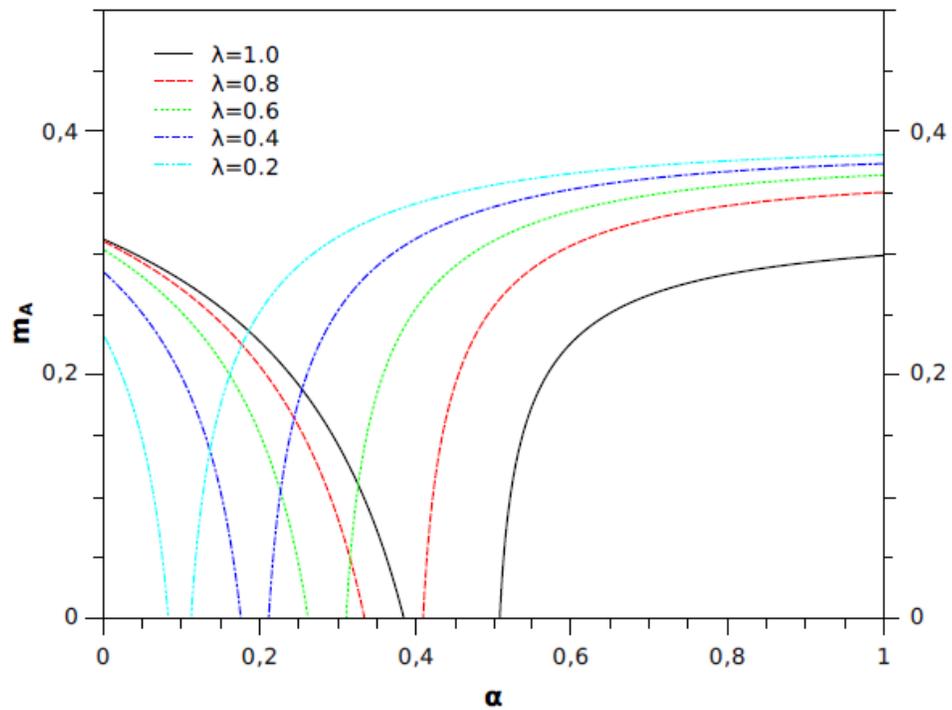


Figura 3.5: Comportamento dos parâmetros de ordem das fases AF e CAF como uma função do parâmetro de α e vários valores de λ , indicados nas curvas para o modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético de spin-1/2 obtido por ondas de spin linear.

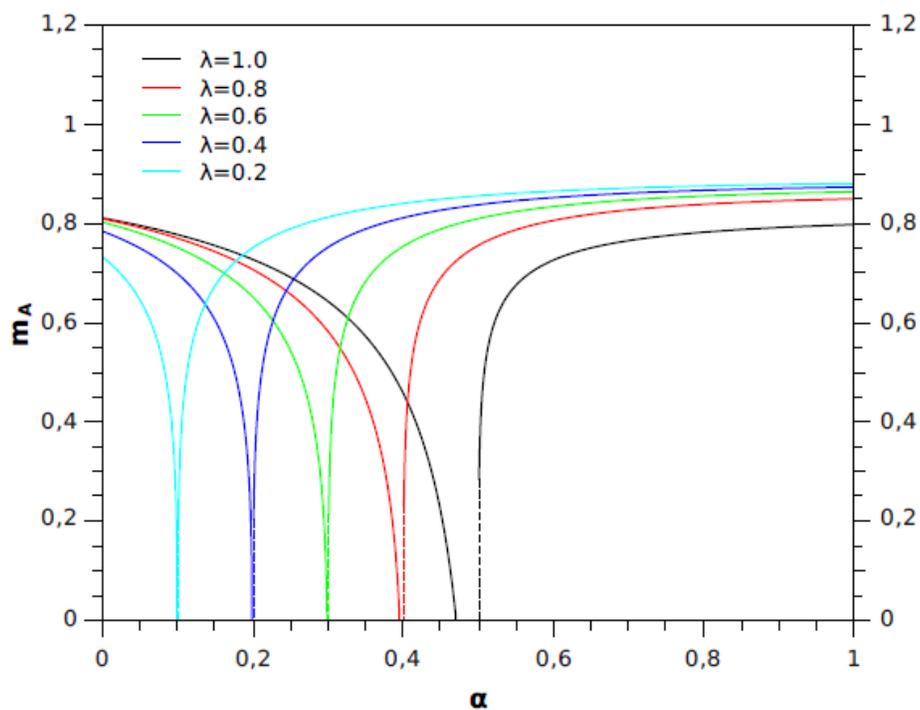


Figura 3.6: Comportamento dos parâmetros de ordem das fases AF e CAF como uma função do parâmetro de α e vários valores de λ , indicados nas curvas para o modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético de spin-1 obtido por ondas de spin linear.

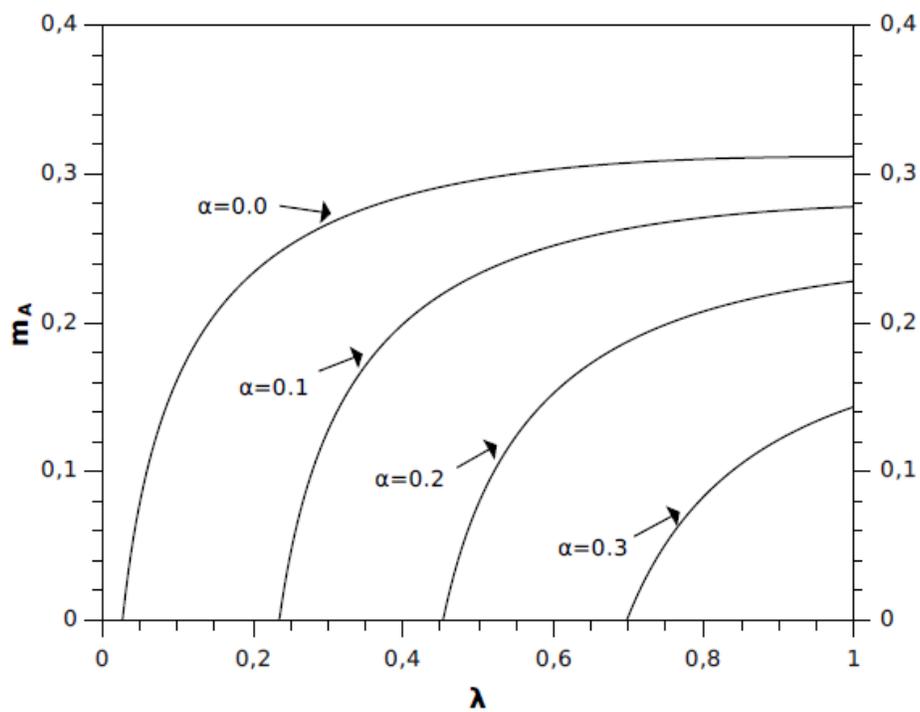


Figura 3.7: Comportamento da magnetização de sub-rede do estado AF como uma função do parâmetro de λ e alguns valores de α , indicados nas curvas para o modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético de spin-1/2 obtido por ondas de spin linear.

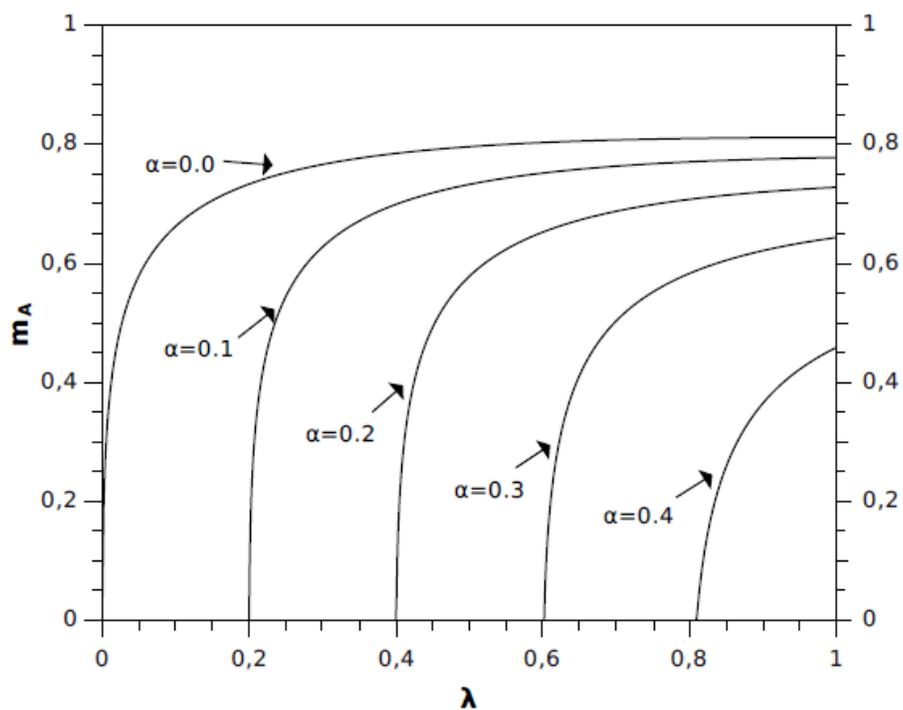


Figura 3.8: Comportamento da magnetização de sub-rede do estado AF como uma função do parâmetro de λ e alguns valores de α , indicados nas curvas para o modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético de spin-1 obtido por ondas de spin linear.

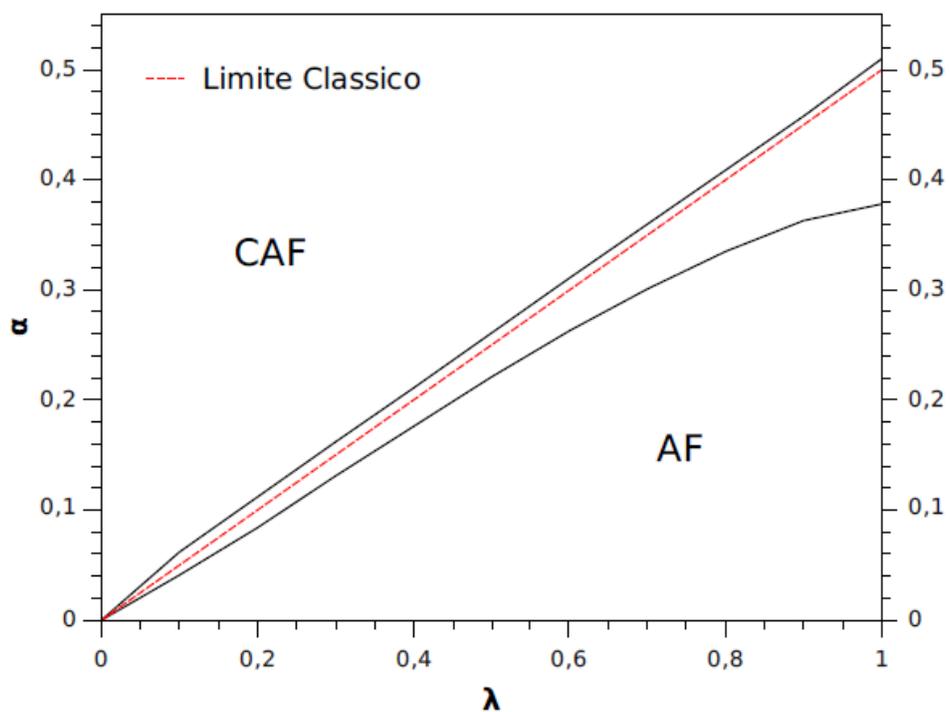


Figura 3.9: Diagrama de fase no plano $\lambda - \alpha$ para o modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ com spin-1/2. As fases AF e CAF possuem transições de segunda ordem entre a fase intermediária LS, onde a linha tracejada representa o limite clássico $\alpha/\lambda = 0.5$.

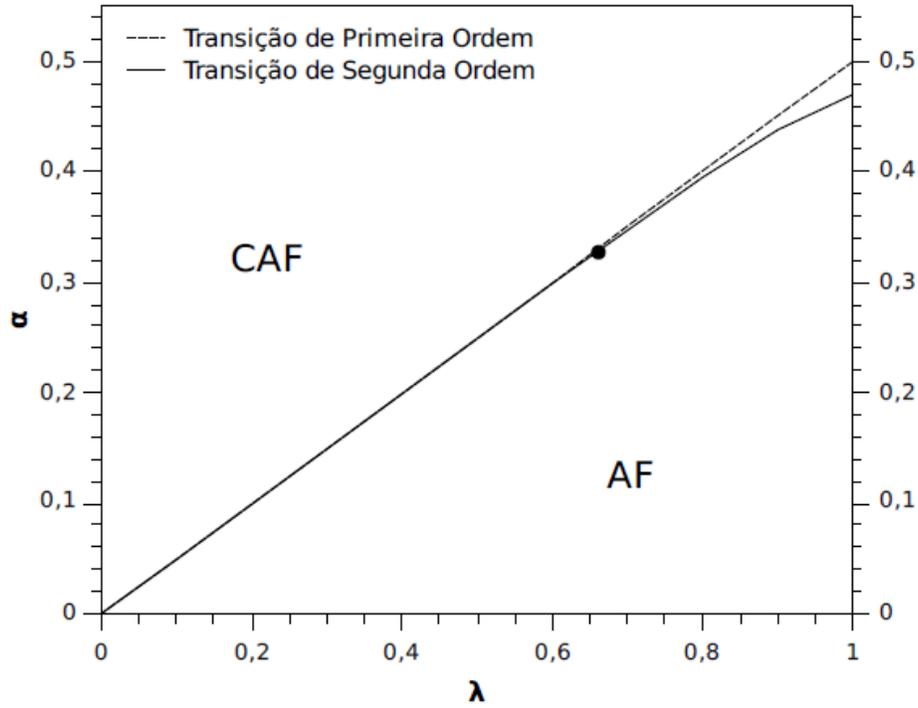


Figura 3.10: Diagrama de fase no plano $\lambda - \alpha$ para o estado fundamental do modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético com spin-1. Um ponto crítico quântico terminal ocorre no valor de $\lambda \simeq 0.66$ e $\alpha \simeq 0.33$, e uma fase intermediária LS entre as fases AF e CAF. Uma transição de segunda ordem ocorre entre a fase AF e LS, quando o parâmetro de ordem $m_A = 0$, como ocorre também entre as fases AF e CAF para valores abaixo do ponto crítico. Para valores acima do ponto entre as fases CAF e LS, apresentamos uma transição de primeira ordem, quando $m_A \neq 0$.

Os resultados obtidos neste capítulo são aplicações específicas do modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético anisotrópico através da teoria de ondas de spin linear para spin-1/2 e spin-1. Utilizamos resultados conhecidos na literatura [42, 66] para que fossem tratados como parâmetros comparativos.

Primeiramente, desenvolvemos os resultados quantitativos para o caso da rede quadrada isotrópica ($\lambda = 1$) com valor de spin $S = 1/2$ e $S = 1$, onde descrevemos o comportamento dos parâmetros de ordem das fases AF e CAF como uma função de α .

Na figura (3.3) encontramos os valores críticos dos parâmetros de frustração de $\alpha_{1c} \simeq 0.37$ na fase AF e $\alpha_{2c} \simeq 0.51$ na fase CAF, ambas com transição de segunda ordem quando $S = 1/2$. No gráfico (3.4) aplicamos o valor de spin $S = 1$ e obtivemos os valores críticos $\alpha_{1c} \simeq 0.47$ na fase AF e $\alpha_{2c} \simeq 0.50$ na fase CAF, sendo que no caso da fase CAF temos uma transição de primeira ordem. Notemos que a medida que o valor de S cresce, a região do estado desordenado diminui.

Analisado preliminarmente o caso isotrópico, agora expandimos os resultados para a rede quadrada anisotrópica. Da mesma forma, desenvolvemos os resultados para o modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético anisotrópico, aplicando os valores de spin $S = 1/2$ e $S = 1$, nas figuras (3.5) e (3.6) temos o comportamento do parâmetro de ordem para diversos valores de λ , onde, notamos que para $\lambda < 1$ temos transições de segunda ordem apenas na fase AF, e na fase CAF todas as curvas sofrem uma transição de fase de primeira ordem. No caso do spin 1/2, a região desordenada existe para qualquer valor de λ , e que o parâmetro de ordem da fase AF é definido apenas para $\lambda > \lambda_c \simeq 0.032$. No caso de spin-1, teremos a região desordenada para $\lambda \gtrsim \lambda_c \simeq 0.66$, enquanto que para $\lambda \lesssim 0.66$ esta região é destruída com a presença de uma transição de primeira ordem direta entre as fases AF e CAF.

Nas figuras (3.7) e (3.8), respectivamente, apresentamos o comportamento do parâmetro de ordem da fase AF como uma função de λ e vários valores de α para $S = 1/2$ e $S = 1$. Notamos que à medida que o efeito de frustração aumenta, a ordem é monotonicamente decrescente, coerente fisicamente. Ou seja, o valor de $\lambda_c(\alpha)$ onde $m_A(\lambda)$ vai a zero grada-

tivamente com o aumento de α . No caso particular $\alpha = 0$ (modelo $J - J'$) e spin-1/2 foi encontrado o valor $\lambda_c \simeq 0.032$, enquanto que para spin-1 temos $\lambda_c = 0$. Devido ao aspecto do campo médio, o comportamento assintótico $\lambda \rightarrow \lambda_c(\alpha)$ é do tipo universal $m_A(\lambda) \approx (\lambda - \lambda_c)^{1/2}$. Resultados recentes usando um método variacional [66], foi mostrado que $\lambda_c = 0$ para spin-1/2 e $\alpha = 0$, o que de certa maneira indica resultado contraditório $\lambda_c \neq 0$ encontrado por ondas de spin [55]. Os resultados aqui apresentados para $\alpha \neq 0$ não têm sido discutidos na literatura usando ondas de spin, apenas o caso particular $\alpha = 0$ foi estudado preliminarmente.

A partir dos resultados dos comportamentos dos parâmetros de ordem como uma função de α para diversos valores de λ , encontramos $\alpha_{1c}(\lambda)$ e $\alpha_{2c}(\lambda)$ onde m_A das fases AF e CAF, respectivamente, cai a zero, tanto continuamente (2^a ordem) como descontinuamente. Desta maneira podemos construir os diagramas de fase no plano $\lambda - \alpha$ para os casos $S = 1/2$ e $S = 1$. Na figura (3.9) temos o caso $S = 1/2$, onde observamos o estado desordenado para todo valor de λ . Sendo $\lambda_c \simeq 0.032$ para $\alpha = 0$, e sendo este valor muito pequeno, prolongamos a linha $\lambda_{1c}(\alpha)$ para zero. Por outro lado, na figura (3.10) apresentamos o caso spin-1, onde temos estado desordenado (pequena região) para $\lambda \gtrsim 0.66$ com transição de segunda ordem entre AF e LS, e primeira ordem entre CAF e LS. Para $\lambda \lesssim 0.66$ a região desordenada é destruída, com presença de uma transição de primeira ordem entre as fases AF e CAF. Os resultados encontrados para $S = 1/2$ estão descritos com o diagrama de fase obtido por diversos métodos, que é a existência do estado LS para $\lambda \gtrsim \lambda_1$. No caso $S = 1$ apenas disponibilizamos de um único resultado na literatura, e mais uma vez em contradição, pois o diagrama de fase encontrado, ver figura (2.14), não apresenta o estado desordenado para $0 \leq \lambda \leq 1$.

A teoria de ondas de spin linear comprovou ser um método eficiente no estudo de frustração do modelo de Heisenberg anisotrópico, pois todos os valores críticos apresentados estavam na margem do valor clássico. Porém, exhibe poucas informações quando os valores de frustração λ eram variados, pois não foi capaz de descrever completamente as transições de fase para valores de $\lambda < 1$.

Capítulo 4

Operadores de Sachdev

4.1 Considerações Gerais

Os supercondutores de altas temperaturas formados por planos de CuO_2 têm motivado o interesse em procurar compreender as propriedades do antiferromagneto de Heisenberg quântico bidimensional. Em $T = 0$, o modelo de Heisenberg antiferromagnético numa rede quadrada apresenta ordem de longo alcance, e presença de dopagem, frustração, campo, etc., são parâmetros "competitivos" que podem destruir este ordenamento. Em $T > 0$, flutuações térmicas destroem a ordem de longo alcance.

Muitos métodos aproximativos, assim como os métodos perturbativos, têm sido utilizados como ferramentas para explorar os diferentes modelos quânticos, a fim de explorar os efeitos de flutuações quânticas, levando a uma destruição da ordem magnética no estado fundamental. Existem ainda evidências de que em um sistema com interações de primeiros vizinhos e segundos vizinhos num antiferromagneto de Heisenberg na rede quadrada possui três possíveis estados fundamentais:

- (i) um estado ordenado de Néel,
- (ii) um estado desordenado quântico que é espontaneamente dimerizado
- (iii) e um estado colinear.

O estado fundamental de Néel não representa o estado de mais baixa energia do modelo de Heisenberg antiferromagnético, criando assim uma indeterminação na forma correta de solucionar sistemas de spins com estas características físicas, levando à consideração de representações aproximativas como possíveis soluções para o modelo, sendo aceito o estado de Néel como um pseudo-estado fundamental.

Em 1990, Sachdev e Bhatt [89] desenvolveram um novo método, como uma forma de solucionar a incoerência na consideração do estado fundamental do modelo de Heisenberg antiferromagnético, introduzindo operadores de campo. A utilidade desses novos operadores consiste no mapeamento da rede em estados singletos formados por pares de spins, e, assim, estudar as propriedades do estado dimerizado.

A maioria dos métodos (ondas de spins, função de Green, método variacional, campo efetivo) tem como ponto de partida o uso do estado de Néel como sendo o estado antiferromagnético do modelo, onde as propriedades termodinâmicas são calculadas adequadamente devido às flutuações quânticas. Posteriormente, seguiram-se diversos outros métodos e teorias de bosonização para o magnetismo, como, por exemplo, a representação de bósons de Schwinger [90].

O método dos operadores de Sachdev possui grande utilidade ao abordar sistemas onde existe um estado fundamental natural desordenado, imposto pelo Hamiltoniano do modelo físico ou por quebra espontânea de simetria, permitindo a investigação da energia do estado fundamental e a obtenção das propriedades termodinâmicas do sistema.

4.2 Os Operadores de Sachdev para Spin-1/2

Uma teoria quântica de campo trata de sistemas com infinitos graus de liberdade. De fato, o número de partículas não é conservado em tais sistemas. Um sistema da matéria condensada possui, em geral, um número muito grande de graus de liberdade (de ordem de 10^{24}) e, portanto, deve guardar similaridades com uma teoria de campo. Na representação de segunda quantização, o estado de um campo quântico é representado

pelo número de partículas idênticas que ocupam os vários estados quânticos possíveis para elas [91].

O spin do elétron é uma propriedade puramente quântica e que não possui nenhum similar clássico, previsto a partir de um tratamento relativístico da teoria quântica de Schrödinger. Similarmente ao caso do momento angular \mathbf{L} do elétron, escolhe-se a direção do eixo z para considerar estados do elétron com componentes S_z conhecidas com incerteza nula. Os autovalores de S_z serão dados em termos de um novo número quântico m_s . Os operadores \mathbf{S}^2 e S_z possuem autovalores quantizados¹ $S(S+1)$ e m_s , respectivamente. Somente a componente S_z de \mathbf{S} pode ser especificada exatamente, como deve ser o caso para qualquer vetor momento angular. As duas orientações de S_z descrevem os denominados, estados "*spin-up*" e "*spin-down*" do elétron. Refere-se ao elétron como sendo uma partícula de spin-1/2 para resumir suas propriedades de quantização contidas nessa descrição, teremos então $m_s = \pm 1/2$.

Na descrição da mecânica quântica um spin é um operador vetorial cujas componentes são os geradores do grupo SU(2). Uma partícula com spin-1/2 está associada a operadores de spin \mathbf{S} e que pode ser expresso em termos de suas componentes S_x, S_y e S_z na base de autovetores que representam as matrizes de Pauli, satisfazendo as regras de comutação de momento angular, dadas por

$$[S^2, S_x] = [S^2, S_y] = [S^2, S_z] = 0 \quad (4.1)$$

e

$$[S_\alpha, S_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_\gamma, \quad (4.2)$$

onde $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ é o tensor completamente anti-simétrico e os sub-índices α, β e γ referem-se às componentes x, y e z dos operadores de spin.

¹Neste formalismo será definido que $\hbar = \mu_\beta = 1$, sendo que \hbar é a constante de Planck e μ_β é o magneton de Bohr.

Os operadores bosônicos que criam novos estados quânticos estão sendo representados por operadores de criação e de destruição que criam novos estados quânticos². Os operadores de Sachdev são uma importante ferramenta no estudo na fase ordenada magneticamente e dimerizada de antiferromagnetos quânticos. Este novo caminho é usado para obter de forma aproximada a teoria de campo médio para o modelo de Heisenberg antiferromagnético quântico bidimensional frustrado, considerados anos atrás por Gelfand, Singh e Huse [92].

Cada partícula pode ter apenas duas orientações de spin possíveis, uma para cima e outra para baixo, em relação a um eixo z de referência, existindo quatro estados possíveis: $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$. Como revisamos no capítulo 2, no estado singlete ($S = 0$) os spins são antiparalelos e a autofunção de spin é anti-simétrica, e neste caso, o estado muda de sinal quando os spins das partículas são trocados, e quando no estado tripleto ($S = 1$) os spins são paralelos e as autofunções de spin são simétricas, e neste caso, o estado não muda de sinal quando os spins das partículas são trocados.

Os novos estados apresentados por Bath e Sachdev [89] são os estados acessíveis de sistema de partículas com spin-1/2, o estado singlete e os três estados tripletos, onde foram definidos operadores que permitem a criação dos estados singlete

$$|s\rangle = s^\dagger |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \quad (4.3)$$

e os três estados tripletos

$$|t_x\rangle = t_x^\dagger |0\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|++\rangle - |--\rangle) \quad (4.4)$$

$$|t_y\rangle = t_y^\dagger |0\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|++\rangle + |--\rangle) \quad (4.5)$$

$$|t_z\rangle = t_z^\dagger |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \quad (4.6)$$

²Por convenção, iremos tratar os estados (+) como sendo "*spin up*", ou \uparrow , e os estados (-) como sendo "*spin down*", ou \downarrow .

originados a partir do estado do vácuo $|0\rangle$.

A representação dos operadores de Sachdev deve respeitar todas as regras de comutação necessárias para os operadores de spin \mathbf{S} , conforme apresentas nas expressões (4.1) e (4.2), e que pode ser verificada através da condição de restrição que assegura a existência de um único estado ocupado para cada par de spins

$$s^\dagger s + \sum_{\alpha} t_{\alpha}^{\dagger} t_{\alpha} = 1, \quad (4.7)$$

seja ele um estado singleto ($s^\dagger s$ representa a contagem dos estados singletos) ou um dos três estados tripletos ($t_{\alpha}^{\dagger} t_{\alpha}$ representa a contagem dos estados tripletos), onde $\alpha = x, y, z$.

As componentes dos operadores de spins \mathbf{S} atuam nos estados quânticos (+) e (-), na forma:

$$S_x |+\rangle = \frac{1}{2} |-\rangle, \quad (4.8)$$

$$S_y |+\rangle = \frac{i}{2} |-\rangle, \quad (4.9)$$

$$S_z |+\rangle = \frac{1}{2} |+\rangle \quad (4.10)$$

e

$$S_x |-\rangle = \frac{1}{2} |+\rangle, \quad (4.11)$$

$$S_y |-\rangle = -\frac{i}{2} |+\rangle, \quad (4.12)$$

$$S_z |-\rangle = -\frac{1}{2} |-\rangle. \quad (4.13)$$

Os operadores de Sachdev podem ser verificados através da atuação dos operadores s , t_x , t_y e t_z nos pares de spins \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_2 [93], e comparandos com as expressões apresentadas para o estado singleto (4.3) e para os estados tripletos (4.4), (4.5) e (4.6).

• **No estado singleto** $|s\rangle$:

Sendo

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle) \quad (4.14)$$

então teremos

$$\begin{aligned} S_{1x} |s\rangle &= S_{1x} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle) \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (S_{1x} |+-\rangle - S_{1x} |-+\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{2} |--\rangle - \frac{1}{2} |++\rangle \right) \\ &= \frac{1}{2} |t_x\rangle. \end{aligned} \quad (4.15)$$

E agora, revemos que o estado singleto é criado a partir de um operador no estado fundamental singleto, ou seja,

$$|s\rangle = s^\dagger |0\rangle. \quad (4.16)$$

E comparando os resultados, teremos

$$S_{1x} s^\dagger |0\rangle = \frac{1}{2} |t_x\rangle, \quad (4.17)$$

sendo

$$\frac{1}{2} t_x^\dagger s s^\dagger |0\rangle = \frac{1}{2} |t_x\rangle. \quad (4.18)$$

Podemos obter um valor proporcional para a componente x do operador na forma

$$S_{1x} \propto \frac{1}{2} t_x^\dagger s. \quad (4.19)$$

• **No estado excitado tripleto $|t_x\rangle$:**

Sendo

$$|t_x\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|++\rangle - |--\rangle) \quad (4.20)$$

então teremos

$$\begin{aligned} S_{1x}|t_x\rangle &= S_{1x}\left[-\frac{1}{\sqrt{2}}(|++\rangle - |--\rangle)\right] \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(S_{1x}|++\rangle - S_{1x}|--\rangle) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{2}| -+\rangle - \frac{1}{2}|+-\rangle\right) \\ &= \frac{1}{2}|s\rangle. \end{aligned} \quad (4.21)$$

O estado tripleto em x é a atuação do operador de Sachdev no estado de vácuo na seguinte forma

$$|t_x\rangle = t_x^\dagger |0\rangle. \quad (4.22)$$

E comparando os resultados, teremos

$$S_{1x}|t_x\rangle = S_{1x}t_x^\dagger |0\rangle. \quad (4.23)$$

Comparando as expressões (4.22) e (4.23), reescrevemos em (4.21) para obtermos

$$\frac{1}{2}s^\dagger t_x t_x^\dagger |0\rangle = \frac{1}{2}|s\rangle, \quad (4.24)$$

então teremos a seguinte relação de proporcionalidade:

$$S_{1x} \propto \frac{1}{2}s^\dagger t_x. \quad (4.25)$$

• **No estado excitado** $|t_y\rangle$:

Sendo

$$|t_y\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} (|++\rangle + |--\rangle) \quad (4.26)$$

então teremos

$$\begin{aligned} S_{1x} |t_y\rangle &= S_{1x} \left[\frac{i}{\sqrt{2}} (|++\rangle + |--\rangle) \right] \\ &= \frac{i}{\sqrt{2}} (S_{1x} |++\rangle + S_{1x} |--\rangle) \\ &= \frac{i}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{2} |-\+\rangle + \frac{1}{2} |+-\rangle \right) \\ &= \frac{i}{2} |t_z\rangle. \end{aligned} \quad (4.27)$$

O estado tripleto atuando na componente y , originando um novo estado será

$$|t_y\rangle = t_y^\dagger |0\rangle \quad (4.28)$$

no qual comparamos com o resultado obtido em (4.27), quando $t_z^\dagger |0\rangle$ (que corresponde ao estado tripleto $|t_z\rangle$), obtemos

$$S_{1x} |t_y\rangle = \frac{i}{2} |t_z\rangle. \quad (4.29)$$

Expandindo a atuação dos operadores, obtemos a expressão

$$\frac{i}{2} t_z^\dagger t_y t_y^\dagger |0\rangle = \frac{i}{2} |t_z\rangle, \quad (4.30)$$

então teremos a seguinte relação de proporcionalidade:

$$S_{1x} \propto \frac{i}{2} t_z^\dagger t_y. \quad (4.31)$$

• **No estado excitado** $|t_z\rangle$:

Sendo

$$|t_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) \quad (4.32)$$

então teremos

$$\begin{aligned} S_{1x} |t_z\rangle &= S_{1x} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (S_{1x} |+-\rangle + S_{1x} |-+\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{2} |--\rangle + \frac{1}{2} |++\rangle \right) \\ &= -\frac{i}{2} |t_y\rangle. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Podemos aplicar aqui o estado tripleto em z

$$|t_z\rangle = t_z^\dagger |0\rangle \quad (4.34)$$

no qual comparamos o resultado obtido em (4.33) com o estado tripleto $t_y^\dagger |0\rangle$ (que corresponde ao estado tripleto $|t_y\rangle$), obtemos

$$S_{1x} |t_z\rangle = -\frac{i}{2} |t_y\rangle. \quad (4.35)$$

Expandindo os operadores, obtemos a expressão

$$-\frac{i}{2} t_y^\dagger t_z t_z^\dagger |0\rangle = -\frac{i}{2} |t_y\rangle, \quad (4.36)$$

então teremos a seguinte relação de proporcionalidade:

$$S_{1x} \propto -\frac{i}{2} t_y^\dagger t_z. \quad (4.37)$$

Podemos agora somar os resultados nas Eqs. (4.19), (4.25), (4.31) e (4.37), obtemos

$$\begin{aligned}
S_{1x} &= \frac{1}{2}t_x^\dagger s + \frac{1}{2}s^\dagger t_x + \frac{i}{2}t_z^\dagger t_y - \frac{i}{2}t_y^\dagger t_z \\
&= \frac{1}{2} (t_x^\dagger s + s^\dagger t_x - it_y^\dagger t_z + it_z^\dagger t_y) \\
&= \frac{1}{2} [s^\dagger t_x + t_x^\dagger s - i(t_y^\dagger t_z - t_z^\dagger t_y)].
\end{aligned} \tag{4.38}$$

Podemos reescrever este resultado utilizando um tensor completamente anti-simétrico

$$\epsilon_{x\beta\gamma}t_\beta^\dagger t_\gamma = (\epsilon_{xyz}t_y^\dagger t_z + \epsilon_{xyz}t_z^\dagger t_y). \tag{4.39}$$

A relação entre o operador de spin S_{1x} e os operadores singleto e tripleto será:

$$S_{1x} = \frac{1}{2} (s^\dagger t_x + t_x^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_\beta^\dagger t_\gamma). \tag{4.40}$$

Definindo $x \equiv \alpha$ teremos uma relação generalizada para qualquer outra componente quando α também assume a representação de y e z :

$$S_{1,\alpha} = \frac{1}{2} (s^\dagger t_\alpha + t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_\beta^\dagger t_\gamma), \tag{4.41}$$

onde $\alpha = x, y, z$.

Utilizando o formalismo apresentado para o spin \mathbf{S}_2 temos a ação dos operadores de spin \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_2 nos estados singleto e tripleto na seguinte representação:

$$S_{1,\alpha} = \frac{1}{2} (s^\dagger t_\alpha + t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_\beta^\dagger t_\gamma) \tag{4.42}$$

e

$$S_{2,\alpha} = \frac{1}{2} (-s^\dagger t_\alpha - t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_\beta^\dagger t_\gamma). \tag{4.43}$$

Numa rede topologicamente triangular, os pontos de rede apresentam uma formação

de dímeros fortemente acoplados (dependendo do valor para o parâmetro de frustração) ao longo de toda a rede, caracterizando uma fase de líquido de spin LS (desordenado).

Os novos estados quânticos são apresentados no formalismo dos operadores de Sachdev, construídos a partir de uma nova representação que combinam os estados possíveis para duas partículas interagentes com spin-1/2.

Os operadores devem obedecer à uma condição, que seja respeitada a imposição de um único estado ocupado, relacionando os operadores de criação e destruição dos estados singleto e tripleto, expresso pela Eq. (4.7).

4.2.1 Relações de Comutação

A álgebra dos operadores de spin é satisfeita quando reproduz as relações de comutação entre os operadores bosônicos e fermiônicos. Nosso trabalho restringe ao estudo de operadores de bósons, pois este representa melhor o sistema descrito por aproximações. Portanto, os operadores de spins bosônicos devem obedecer as relações de comutação, permitindo uma construção algébrica para os operadores de Sachdev:

$$[s, s^\dagger] = 1, \quad (4.44)$$

$$[t_\alpha, t_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha\beta} \quad (4.45)$$

e

$$[s, t_\alpha^\dagger] = 0, \quad (4.46)$$

onde a última relação indica que os operadores s e t_α comutam, isto é, atuam em espaços diferentes. Por último, verificamos que a álgebra de \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_2 satisfaz as relações

$$[S_{1\alpha}, S_{1\beta}] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{1\gamma}, \quad (4.47)$$

$$[S_{2\alpha}, S_{2\beta}] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}S_{2\gamma} \quad (4.48)$$

e

$$[S_{1\alpha}, S_{2\beta}] = 0. \quad (4.49)$$

As relações de comutação são propriedades esperadas para os operadores de spin-1/2 do grupo de SU(2). Portanto, os operadores de spin que correspondem a sítios da rede podem ser agora expressos em termos dos novos operadores bosônicos singlete e tripleto.

4.2.2 Métodos Aproximativos

A condensação de Bose-Einstein (CBE) é um fenômeno capaz de descrever transições de fase quânticas nos regimes de baixas temperaturas. Este fenômeno físico está relacionado às partículas bosônicas (partículas com spin inteiro). Quando a temperatura é reduzida significativamente o sistema passa a se condensar no estado fundamental e sua ocorrência é uma manifestação macroscópica da natureza quântica da matéria [94].

No antiferromagnetismo, o fenômeno CBE é utilizado para caracterizar o estado fundamental dos estados singletos enlaçados, com um único estado ocupado. No caso de uma rede quadrada, e que é o foco principal deste trabalho, a formação dos dímeros também está fortemente ligado ao valor do parâmetro de frustração, esta formação permanece estável até que o valor de $\alpha = J_2/J_1$ esteja mais forte, em comparação com as outras interações.

A dimerização pode ser espontânea ou intrínseca, e apresentam uma quebra na simetria translacional ao longo da direção entre cadeias, e possuem padrões distintos em ordenamentos. As fases colineares antiferromagnéticas são espontaneamente dimerizadas e não possuem análogos clássicos [51].

No estado de líquido de spin, temos configurações de estados sem ordenamentos definidos, como mostra a figura (4.2), os enlaces de valência estão rodeados por diferentes

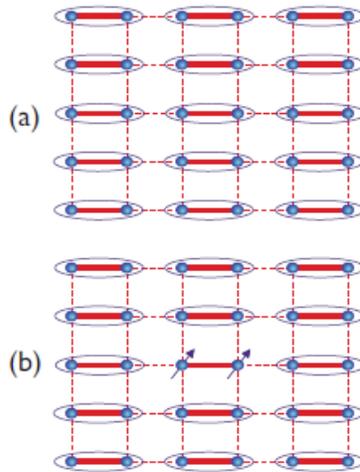


Figura 4.1: A configuração de dimeros acoplados em uma cadeia antiferromagnética. A figura apresenta (a) o estado fundamental de estados singletos enlaçados $(|+-\rangle - |-+\rangle)/\sqrt{2}$, e (b) a excitação de estados tripleto para spin-1 [95].

pareamentos de spins. Os dois spiniores não pareados podem se mover independente por esta fase por não haver um ordenamento entre si [96].

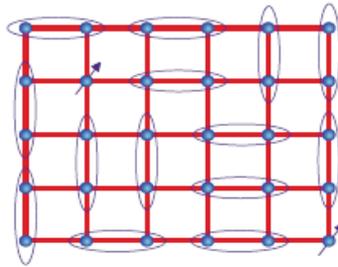


Figura 4.2: Configuração do estado de líquido de spins [95].

Uma interação entre a frustração geométrica e as flutuações quânticas leva a comportamentos incomuns, onde os métodos aproximativos são muito importantes para o desenvolvimento e solução de um modelo em que não é possível uma solução exata [95]. Algumas particularidades para as fases magnéticas [89, 97] são apresentadas:

(1) Fase Dimerizada: possui estados desordenados magneticamente com valores esperados:

$$\langle s \rangle \neq 0, \quad (4.50)$$

$$\langle t_\alpha \rangle = 0 \quad (4.51)$$

e

$$\langle t_\alpha t_\beta \rangle = C \delta_{\alpha\beta}, \quad (4.52)$$

onde C é uma constante diferente de zero. As relações implicam que bósons t_α têm condensados em pares, mas que não existe um único bóson condensado t_α .

(2) Fase Ordenada Magneticamente: os estados são obtidos de H no limite onde s_j pode ser tomado como c-números clássicos, e estes tomam um valor diferente de zero no estado fundamental. A simetria de rotação de spin de H é quebrada espontaneamente por valores diferentes (não-nulos) de zero de $\langle s_j \rangle$, os quais são escolhidos para minimizar a energia de H . Consideramos somente estados sem momentos ferromagnéticos quando

$$\sum_j \langle s_j \rangle = 0 \quad (4.53)$$

pois $J_{ij} > 0$ (antiferromagnético). O padrão de $\langle s_j \rangle$ não-nulos podem sobreviver até $s = 1/2$, e isto é frequentemente encontrado para este caso, embora flutuações quânticas não diminuam (reduzam) significativamente a magnitude de $\langle s_j \rangle$.

A condensação de bosóns singletos t_α possuem ordem de longo alcance, e neste caso, os valores esperados são

$$\langle s \rangle \neq 0 \quad (4.54)$$

e

$$\langle t_\alpha \rangle \neq 0. \quad (4.55)$$

Uma classe importante de estados ordenados magneticamente é caracterizado pela ordenação de um único estado de vetor de onda. O vetor de onda e polarização dos modos no qual s bósons t_α condensam determinam a natureza do ordenamento magnético. No entanto, a aproximação de campo médio neste trabalho não apresenta equivalência entre os enlaces conectados ao sítio, e levará sempre à uma coexistência da dimerização e ordem magnética.

Quando houver produto entre operadores passa a ser útil efetuar desacoplamentos, pois os termos de interação não podem ser tratados de forma exata, e esperamos uma mudança qualitativa na natureza do estado fundamental. A aproximação de campo médio é uma importante ferramenta na solução deste problema, o que consiste em considerar que são pequenos os desvios dos valores assumidos por uma variável em relação ao seu valor médio [98]. De forma geral, consideramos dois operadores Φ_1 e Φ_2 , em que podemos fazer $\Phi_i = \langle \Phi_i \rangle + \delta\Phi_i$, porém desprezando o termo quadrático nos desvios após efetuar o produto entre os operadores $\Phi_1\Phi_2$, substituímos novamente o termo $\delta\Phi_i$ por $\Phi_i - \langle \Phi_i \rangle$ após a aproximação, temos o desacoplamento do produto dos operadores

$$\Phi_1\Phi_2 \simeq \langle \Phi_1 \rangle \Phi_2 + \langle \Phi_2 \rangle \Phi_1 - \langle \Phi_1 \rangle \langle \Phi_2 \rangle \quad (4.56)$$

onde os valores médios dos operadores possibilitam uma possível solução para o problema através de expressões autoconsistentes.

4.3 Os Operadores de Sachdev para Spin-1

Nos trabalhos de Wang e colaboradores [99, 100, 101] foram propostos uma nova representação para os operadores de Sachdev para o tratamento de sistemas de spin 1. A construção destes novos operadores foi possível através das relações feitas para o caso de sistemas de spin-1/2.

Em mecânica quântica um estado fundamental, também chamado de estado esta-

cionário³, é aquele na qual a densidade de probabilidade não varia com o tempo. Uma partícula nunca tem energia igual a zero, pois assim ela teria uma velocidade e posição definida, contrariando o princípio de incerteza de Heisenberg. Mas, ela pode ter uma quantidade mínima de energia, chamado de estado fundamental, ou seja, ela teria denominadas flutuações de energia. Como consequência, os estados estacionários têm uma energia definida, ou seja, são autofunções do Hamiltoniano do sistema.

A álgebra dos spins-1/2 pode ser satisfeita usando os operadores de spin s e t_α satisfazendo as relações de comutação dadas na subseção (4.2.1). Agora, a energia do par formado pelos operadores de spins interagentes \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_2 , como vimos no Capítulo 2, a energia do sistema de dois spins é expressa por

$$H_2 = -\frac{3}{4}Js^\dagger s + \frac{1}{4}Jt_\alpha^\dagger t_\alpha \quad (4.57)$$

A energia do estado singleto vai para infinito quando $J \rightarrow -\infty$, com $J < 0$, portanto, o estado singleto pode ser excluído e obtemos uma para um spin-1 que definimos como S : $S_\alpha = -i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_\beta^\dagger t_\gamma$, e temos,

$$S_x = -i(t_y^\dagger t_z - t_z^\dagger t_y) \quad (4.58)$$

$$S_y = -i(t_z^\dagger t_x - t_x^\dagger t_z) \quad (4.59)$$

$$S_z = i(t_x^\dagger t_y - t_y^\dagger t_x) \quad (4.60)$$

onde a condição de único estado possível vem dada pela condição

$$t_x^\dagger t_x + t_y^\dagger t_y + t_z^\dagger t_z = 1 \quad (4.61)$$

desde que excluíssemos o número de estados singleto na Eq. (4.7). Neste caso podemos

³Um estado estacionário não caracteriza um estado apropriado de menor energia, pois consideramos irrelevante os pequenos efeitos perturbativos do sistema referentes às autofunções do Hamiltoniano de Heisenberg.

verificar as relações de comutação

$$[S_\alpha, S_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}S_\gamma \quad (4.62)$$

e

$$S^2 = 2. \quad (4.63)$$

Portanto, o sistema com spin-1 pode ser representado por três bósons t_α com $\alpha = x, y, z$, onde $t_z^\dagger |0\rangle$ corresponde ao autoestado $S_z = 0$, $t_x^\dagger |0\rangle$ e $t_y^\dagger |0\rangle$ aos autoestados $S_z = \pm 1$ com valor médio $\langle S_z \rangle = 0$, próprio de um estado fundamental desordenado.

Considerando a relação de spins temos o operador de levantamento definido por

$$\begin{aligned} S^+ &= S_x + iS_y \\ &= [-i(t_y^\dagger t_z - t_z^\dagger t_y)] + i[-i(t_z^\dagger t_x - t_x^\dagger t_z)] \\ &= -it_y^\dagger t_z + it_z^\dagger t_y + t_z^\dagger t_x - t_x^\dagger t_z \\ &= t_z^\dagger (t_x + it_y) - (t_x^\dagger + it_y^\dagger) t_z \end{aligned} \quad (4.64)$$

e o abaixamento por

$$\begin{aligned} S^- &= S_x - iS_y \\ &= [-i(t_y^\dagger t_z - t_z^\dagger t_y)] - i[-i(t_z^\dagger t_x - t_x^\dagger t_z)] \\ &= -it_y^\dagger t_z + it_z^\dagger t_y - t_z^\dagger t_x + t_x^\dagger t_z \\ &= t_z^\dagger (-t_x + it_y) + (t_x^\dagger - it_y^\dagger) t_z. \end{aligned} \quad (4.65)$$

No caso de operadores originados dos operadores de criação definidos para criar os estados singleto e tripleto a partir do vácuo, como foi visto anteriormente, não são os

autoestados apropriados de um campo magnético externo na direção de componente z , sendo estes transformados para operadores transversais u^\dagger e d^\dagger na direção do campo magnético. Os operadores são definidos por

$$u^\dagger = -\frac{1}{\sqrt{2}} (t_x^\dagger + it_y^\dagger) \quad (4.66)$$

e

$$d^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (t_x^\dagger - it_y^\dagger). \quad (4.67)$$

Os operadores transversais criam os novos estados

$$\begin{aligned} u^\dagger |0\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (t_x^\dagger + it_y^\dagger) |0\rangle \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \left[-\frac{1}{\sqrt{2}} (|++\rangle - |--\rangle) \right] - \frac{i}{\sqrt{2}} \left[\frac{i}{\sqrt{2}} (|++\rangle + |--\rangle) \right] \\ &= |++\rangle \end{aligned} \quad (4.68)$$

e

$$\begin{aligned} d^\dagger |0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (t_x^\dagger - it_y^\dagger) |0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-\frac{1}{\sqrt{2}} (|++\rangle - |--\rangle) \right] - \frac{i}{\sqrt{2}} \left[\frac{i}{\sqrt{2}} (|++\rangle + |--\rangle) \right] \\ &= |--\rangle, \end{aligned} \quad (4.69)$$

que substituem os autoestados gerados a partir do vácuo pelos operadores t_x^\dagger e t_y^\dagger .

Os operadores de Sachdev para $S = 1$ são dados por

$$S^+ = \sqrt{2}(u^\dagger t_z + t_z^\dagger d), \quad (4.70)$$

$$S^- = \sqrt{2}(t_z^\dagger u + d^\dagger t_z) \quad (4.71)$$

e

$$S_z = u^\dagger u - d^\dagger d, \quad (4.72)$$

onde temos conservada a condição de um único estado possível na forma

$$u^\dagger u + d^\dagger d + t_z^\dagger t_z = 1. \quad (4.73)$$

A condição de restrição para um único estado ocupado na representação dos operadores de Sachdev para spin-1 dada pela Eq. (4.73) poderia ter sido obtida da representação para spin-1/2 com campo magnético aplicado na direção- z , dada pela Eq. (4.7). Isto é possível excluindo simplesmente o operador s^\dagger , desde que como definimos, o fato de considerar um spin-1 por sítio significa fazer o par de spins-1/2 fortemente ligado por uma energia J . A nova representação para um operador de spin-1 é utilizado para estudar a condensação de Bose-Einstein.

O método dos operadores de Sachdev para o estudo de sistemas que abordam modelos quânticos de operadores bosônicos tem mostrado grande eficiência no estudo de sistemas que apresentam condensação de Bose-Einstein de magnons, assim como, o comportamento crítico dos antiferromagnetos frustrados quando $T = 0$, levando ao conhecimento do estado fundamental, e a análise dos parâmetros físicos.

A fase quântica de dímeros singletos existe no limite $S \rightarrow \infty$ (limite clássico) nas condições de fortes frustrações. A fase de dímeros em coluna apresenta estabilidade no limite $S \rightarrow \infty$ em acoplamentos de curto alcance em torno do valor $J_2/J_1 = 0.5$ para o modelo $J_1 - J_2$, como vimos na seção (2.6).

A literatura tem apresentado conclusões a respeito do limite $S \rightarrow \infty$, pois possui validade na vizinhança do limite fortemente dimerizado sugerindo uma possibilidade de se repensar sobre o limite clássico no antiferromagnetismo quântico [102].

4.4 Modelo $J_1 - J'_1 - J_2$

O método dos operadores de Sachdev permite que o modelo físico em estudo seja abordado diretamente a partir da aplicação dos operadores apresentados na seção (4.3). Neste contexto serão tratados apenas o estudo do modelo de Heisenberg antiferromagnético frustrado para spin-1, descrito pelo Hamiltoniano abaixo

$$H = \frac{J_1}{2} \sum_{\langle r,i \rangle} \mathbf{S}_r \cdot \mathbf{S}_i + \frac{J'_1}{2} \sum_{\langle r,j \rangle} \mathbf{S}_r \cdot \mathbf{S}_j + \frac{J_2}{2} \sum_{\langle r,l \rangle} \mathbf{S}_r \cdot \mathbf{S}_l \quad (4.74)$$

onde a primeira (segunda) soma é feita entre os primeiros vizinhos ao longo do eixo x (y) e a terceira é entre segundos vizinhos (diagonal) numa rede quadrada.

Os termos de interações entre spins são feitas aplicando os termos das coordenadas escalares em cada um dos operadores, ou seja,

$$\begin{aligned} H = & \frac{J_1}{2} \sum_{\langle r,i \rangle} [(S_r^x S_i^x + S_r^y S_i^y) + S_r^z S_i^z] + \frac{J'_1}{2} \sum_{\langle r,j \rangle} [(S_r^x S_j^x + S_r^y S_j^y) + S_r^z S_j^z] \\ & + \frac{J_2}{2} \sum_{\langle r,l \rangle} [(S_r^x S_l^x + S_r^y S_l^y) + S_r^z S_l^z]. \end{aligned} \quad (4.75)$$

Substituímos nesta expressão os operadores de levantamento e de abaixamento de spins, reescrevendo a Eq. (4.75) na forma

$$\begin{aligned} H = & \frac{J_1}{4} \sum_{\langle r,i \rangle} (S_r^+ S_i^- + S_r^- S_i^+) + \frac{J_1}{2} \sum_{\langle r,i \rangle} S_r^z S_i^z \\ & + \frac{J'_1}{4} \sum_{\langle r,j \rangle} (S_r^+ S_j^- + S_r^- S_j^+) + \frac{J'_1}{2} \sum_{\langle r,j \rangle} S_r^z S_j^z \\ & + \frac{J_2}{4} \sum_{\langle r,l \rangle} (S_r^+ S_l^- + S_r^- S_l^+) + \frac{J_2}{2} \sum_{\langle r,l \rangle} S_r^z S_l^z. \end{aligned} \quad (4.76)$$

O Hamiltoniano na forma (4.76) está adaptado para ser mapeado em função dos

novos operadores bosônicos, podemos então inserir os operadores de spin de Sachdev de spin-1, efetuando cada um dos produtos originados nesta aplicação. Substituindo as Eqs. (4.70)-(4.72) na Eq. (4.76), obtemos

$$\begin{aligned}
H &= \frac{J_1}{2} t^2 \sum_{\langle r,i \rangle} \left(d_r d_i^\dagger + d_r u_i + u_r^\dagger d_i^\dagger + u_r^\dagger u_i + d_r^\dagger d_i + d_r^\dagger u_i^\dagger + u_r d_i + u_r u_i^\dagger \right) \\
&+ \frac{J_1}{2} \sum_{\langle r,i \rangle} (u_r^\dagger u_r - d_r^\dagger d_r) (u_i^\dagger u_i - d_i^\dagger d_i) \\
&+ \frac{J'_1}{2} t^2 \sum_{\langle r,j \rangle} \left(d_r d_j^\dagger + d_r u_j + u_r^\dagger d_j^\dagger + u_r^\dagger u_j + d_r^\dagger d_j + d_r^\dagger u_j^\dagger + u_r d_j + u_r u_j^\dagger \right) \\
&+ \frac{J'_1}{2} \sum_{\langle r,j \rangle} (u_r^\dagger u_r - d_r^\dagger d_r) (u_j^\dagger u_j - d_j^\dagger d_j) \\
&+ \frac{J_2}{2} t^2 \sum_{\langle r,l \rangle} \left(d_r d_l^\dagger + d_r u_l + u_r^\dagger d_l^\dagger + u_r^\dagger u_l + d_r^\dagger d_l + d_r^\dagger u_l^\dagger + u_r d_l + u_r u_l^\dagger \right) \\
&+ \frac{J_2}{2} \sum_{\langle r,l \rangle} (u_r^\dagger u_r - d_r^\dagger d_r) (u_l^\dagger u_l - d_l^\dagger d_l) \\
&- \mu \sum_r (u_r^\dagger u_r + d_r^\dagger d_r + t^2 - 1)
\end{aligned} \tag{4.77}$$

onde temos usado $t_z \cong t$ e introduzimos um potencial químico dependente da temperatura ($\mu_{\mathbf{r}}$) para impor a condição de restrição de única ocupação e devido a invariância de deslocamento usamos $\mu_{\mathbf{r}} = \mu$. Através da teoria de campo médio podemos desacoplar os operadores em termos de suas médias, ou seja,

$$\begin{aligned}
(u_r^\dagger u_r - d_r^\dagger d_r)(u_a^\dagger u_a - d_a^\dagger d_a) &\cong \frac{1}{2}(1 - t^2 + m)(u_r^\dagger u_r + u_a^\dagger u_a) \\
&+ \frac{1}{2}(1 - t^2 - m)(d_r^\dagger d_r + d_a^\dagger d_a) \\
&- p_\kappa(u_r d_a + u_r^\dagger d_a^\dagger + d_r u_a + d_r^\dagger u_a^\dagger) \\
&- \frac{1}{2}(1 - t^2)^2 - \frac{1}{2}m^2 + 2p_\kappa^2,
\end{aligned} \tag{4.78}$$

onde foram definidas correlações entre os operadores⁴

$$\langle d_r u_a \rangle = \langle d_r^\dagger u_a^\dagger \rangle = p_\kappa \quad (4.79)$$

e a magnetização

$$m = \langle u_r^\dagger u_r \rangle - \langle d_r^\dagger d_r \rangle \quad (4.80)$$

tal que $a = i, j, l$ e $\kappa = 1, 2, 3$.

Aplicamos as relações de desacoplamento (4.78) no Hamiltoniano (4.77), no qual inserimos as expressões (4.79) e (4.80) efetuando uma transformada de Fourier. Em seguida, podemos reorganizar os termos em função dos operadores em comum na forma

$$\begin{aligned} H = & \frac{J_1}{2} \sum_k \{ [2t^2 z_x \delta_{k_x} + z_x (1 - t^2 + m)] a_k^\dagger a_k + [2t^2 z_x \delta_{k_x} + z_x (1 - t^2 - m)] b_k^\dagger b_k \\ & + (2t^2 z_x \delta_{k_x} - 2p_1 z_x \delta_{k_x}) a_k b_k + (2t^2 z_x \delta_{k_x} - 2p_1 z_x \delta_{k_x}) a_k^\dagger b_k^\dagger \} \\ & + \frac{J_1}{2} \sum_k \left[2t^2 z_x \delta_{k_x} - \frac{1}{2} (1 - t^2)^2 - \frac{1}{2} m^2 + 2p_1^2 \right] \\ & + \frac{J'_1}{2} \sum_k \{ [2t^2 z_y \delta_{k_y} + z_y (1 - t^2 + m)] a_k^\dagger a_k + [2t^2 z_y \delta_{k_y} + z_y (1 - t^2 - m)] b_k^\dagger b_k \\ & + (2t^2 z_y \delta_{k_y} - 2p_2 z_y \delta_{k_y}) a_k b_k + (2t^2 z_y \delta_{k_y} - 2p_2 z_y \delta_{k_y}) a_k^\dagger b_k^\dagger \} \\ & + \frac{J'_1}{2} \sum_k \left[2t^2 z_y \delta_{k_y} - \frac{1}{2} (1 - t^2)^2 - \frac{1}{2} m^2 + 2p_2^2 \right] \\ & + \frac{J_2}{2} \sum_k \{ [2t^2 z_{x,y} \delta_{k_{x,y}} + z_{x,y} (1 - t^2 + m)] a_k^\dagger a_k + [2t^2 z_{x,y} \delta_{k_{x,y}} + z_{x,y} (1 - t^2 - m)] b_k^\dagger b_k \\ & + (2t^2 z_{x,y} \delta_{k_{x,y}} - 2p_3 z_{x,y} \delta_{k_{x,y}}) a_k b_k + (2t^2 z_{x,y} \delta_{k_{x,y}} - 2p_3 z_{x,y} \delta_{k_{x,y}}) a_k^\dagger b_k^\dagger \} \\ & + \frac{J_2}{2} \sum_k \left[2t^2 z_{x,y} \delta_{k_{x,y}} - \frac{1}{2} (1 - t^2)^2 - \frac{1}{2} m^2 + 2p_3^2 \right] \\ & - \mu \sum_k (a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k) + \sum_k \mu (1 - t^2). \end{aligned} \quad (4.81)$$

⁴O desacoplamento entre os operadores bosônicos é uma conexão entre a mecânica estatística e a mecânica quântica.

O Hamiltoniano (4.81) é normalizado em função de J_1 , no qual podemos definir os parâmetros de frustração ($\lambda = J'_1/J_1$ e $\alpha = J_2/J_1$) e, assim, evidenciamos cada termo comum associado aos operadores, na forma

$$\begin{aligned}
H = & \sum_k \{ [t^2 z_x \delta_{k_x} + (1 - t^2 + m) - \mu] + \lambda [t^2 z_y \delta_{k_y} + (1 - t^2 + m)] \\
& + \alpha [t^2 z_{x,y} \delta_{k_{x,y}} + 2(1 - t^2 + m)] \} a_k^\dagger a_k \\
& + \sum_k \{ [t^2 z_x \delta_{k_x} + (1 - t^2 - m) - \mu] + \lambda [t^2 z_y \delta_{k_y} + 2(1 - t^2 - m)] \\
& + \alpha [t^2 z_{x,y} \delta_{k_{x,y}} + 2(1 - t^2 - m)] \} b_k^\dagger b_k \tag{4.82} \\
& + \sum_k [z_x \delta_{k_x} (t^2 - p_1) + \lambda z_y \delta_{k_y} (t^2 - p_2) + \alpha z_{x,y} \delta_{k_{x,y}} (t^2 - p_3)] (a_k b_k + a_k^\dagger b_k^\dagger) \\
& + \sum_k \{ 2t^2 (\delta_{k_x} + \lambda \delta_{k_y} + \alpha \delta_{k_{x,y}}) - \frac{1}{4} (1 + \lambda + \alpha) [(1 - t^2)^2 + m^2] \\
& + (p_1^2 + \lambda p_2^2 + \alpha p_3^2) - \mu(1 - t^2) \}.
\end{aligned}$$

Reescrevendo a Eq. (4.82) numa forma mais compacta, obtemos

$$H = \sum_k \left[C_1 a_k^\dagger a_k + C_2 b_k^\dagger b_k + C_3 (a_k b_k + a_k^\dagger b_k^\dagger) \right] + \sum_k C_4 \tag{4.83}$$

sendo

$$\begin{aligned}
C_1 = & [t^2 z_x \delta_{k_x} + (1 - t^2 + m) - \mu] + \lambda [t^2 z_y \delta_{k_y} + (1 - t^2 + m)] \\
& + \alpha [t^2 z_{x,y} \delta_{k_{x,y}} + 2(1 - t^2 + m)], \tag{4.84}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_2 = & [t^2 z_x \delta_{k_x} + (1 - t^2 - m) - \mu] + \lambda [t^2 z_y \delta_{k_y} + (1 - t^2 - m)] \\
& + \alpha [t^2 z_{x,y} \delta_{k_{x,y}} + 2(1 - t^2 - m)], \tag{4.85}
\end{aligned}$$

$$C_3 = z_x \delta_{k_x} (t^2 - p_1) + \lambda z_y \delta_{k_y} (t^2 - p_2) + \alpha z_{x,y} \delta_{k_{x,y}} (t^2 - p_3), \tag{4.86}$$

e

$$\begin{aligned}
C_4 = & \{2t^2(\delta_{k_x} + \lambda\delta_{k_y} + \alpha\delta_{k_{x,y}}) - \frac{1}{4}(1 + \lambda + \alpha) [(1 - t^2)^2 + m^2] \\
& + (p_1^2 + \lambda p_2^2 + \alpha p_3^2) - \mu(1 - t^2)\}. \tag{4.87}
\end{aligned}$$

Neste momento, utilizamos uma transformada de Bogoliubov em (4.83), da mesma forma como foi usado no desenvolvimento da teoria de ondas de spin linear neste modelo (capítulo 3), e, assim, obtemos que

$$\begin{aligned}
\tilde{H} = & \sum_k \{ [\alpha_k^2 C_1 + \beta_k^2 C_2 + 2\alpha_k \beta_k C_3] \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k + [\beta_k^2 C_1 + \alpha_k^2 C_2 + 2\alpha_k \beta_k C_3] \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k \\
& + [\alpha_k \beta_k C_1 + \alpha_k \beta_k C_2 + (\alpha_k^2 + \beta_k^2) C_3] (\tilde{a}_k \tilde{b}_k + \tilde{a}_k^\dagger \tilde{b}_k^\dagger) \} \\
& + \sum_k [\beta_k^2 (C_1 + C_2) + 2\alpha_k \beta_k C_3 + C_4]. \tag{4.88}
\end{aligned}$$

A expressão (4.88) pode ser vista também na forma:

$$\tilde{H} = H_0 + \sum_k \left[\chi_{1k} \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k + \chi_{2k} \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k + \chi_{3k} (\tilde{a}_k \tilde{b}_k + \tilde{a}_k^\dagger \tilde{b}_k^\dagger) \right] \tag{4.89}$$

onde foram definidas as expressões

$$\chi_{1k} = \alpha_k^2 C_1 + \beta_k^2 C_2 + 2\alpha_k \beta_k C_3, \tag{4.90}$$

$$\chi_{2k} = \beta_k^2 C_1 + \alpha_k^2 C_2 + 2\alpha_k \beta_k C_3, \tag{4.91}$$

$$\chi_{3k} = \alpha_k \beta_k (C_1 + C_2) + (\alpha_k^2 + \beta_k^2) C_3 \tag{4.92}$$

e

$$H_0 = \sum_k [\beta_k^2 (C_1 + C_2) + 2\alpha_k \beta_k C_3 + C_4]. \tag{4.93}$$

Entretanto, a expressão (4.89) ainda não representa a forma diagonalizada do modelo e para que isto ocorra torna-se necessário anular o seu último termo fazendo $\chi_{3k} = 0$. Em baixas temperaturas temos que a magnetização m é nula, e as expressões C_1 e C_2 tornam-se idênticas, e assim $\chi_{1k} = \chi_{2k}$. Através das expressões na seção (3.4) apresentamos um novo Hamiltoniano na forma diagonal

$$\tilde{H} = \sum_k w_k \left(\tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k + \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k \right) + H_0, \quad (4.94)$$

sendo

$$w_k = \sqrt{\Lambda_k^2 - \Delta_k^2} \quad (4.95)$$

a relação de dispersão, com as expressões definidas por

$$\Lambda_k \equiv C_1 = C_2 \quad (4.96)$$

e

$$\Delta_k \equiv C_3. \quad (4.97)$$

O parâmetro de ordem utilizado neste modelo é a magnetização, e quando esta é anulada temos o estado fundamental. Mas para que este valor faça algum sentido é preciso analisar as expressões para cada parâmetro, porém, numericamente estes parâmetros deverão assumir valores variáveis que associem cada valor obtido com um possível valor de magnetização com seus respectivos valores de parâmetro de frustração α (com λ previamente estabelecido). No antiferromagnetismo, a magnetização total m é nula no estado fundamental, sendo necessário, portanto, avaliar uma magnetização de sub-rede m_A , no entanto, através do método dos operadores de Sachdev este parâmetro de ordem é obtido de forma mais direta por meio da correlação dos spins em um eixo de referência.

Os parâmetros numéricos⁵ são apresentados nas expressões para $T = 0$ dados por

$$t^2 = 2 - n_0 - \frac{1}{N} \sum_k \frac{\Lambda_k}{w_k}, \quad (4.98)$$

$$p_1 = \frac{1}{2} \frac{\Delta_\pi}{\Lambda_\pi} n_0 - \frac{1}{2N} \sum_k \frac{\Delta_k}{w_k} \delta_{k_x}, \quad (4.99)$$

$$p_2 = \frac{1}{2} \frac{\Delta_\pi}{\Lambda_\pi} n_0 - \frac{1}{2N} \sum_k \frac{\Delta_k}{w_k} \delta_{k_y}, \quad (4.100)$$

$$p_3 = -\frac{1}{2} \frac{\Delta_\pi}{\Lambda_\pi} n_0 - \frac{1}{2N} \sum_k \frac{\Delta_k}{w_k} \delta_{k_{x,y}}, \quad (4.101)$$

$$\mu = -\frac{4}{N} \left(1 - \frac{\Delta_\pi}{\Lambda_\pi}\right) n_0 + \frac{1}{N} \sum_k \frac{\Lambda_k - \Delta_k}{w_k} f(k) \quad (4.102)$$

e

$$m_A = 2t\sqrt{n_0}, \quad (4.103)$$

onde definimos a expressão $f(k) = 2(\delta_{k_x} + \lambda\delta_{k_y} + 2\alpha\delta_{k_{x,y}})$ e o número de ocupação n_0 para a magnetização de sub-rede m_A .

Sem a presença de um campo magnético externo a magnetização m é zero, e em duas e três dimensões as correlações $p_{1,2,3}$ podem ser negligenciadas em temperaturas muito baixas, tal que seus efeitos sejam muito pequenos.

As equações (4.98)-(4.103) são resolvidas numericamente fixando um dos parâmetros de frustração (λ ou α) para o cálculo das soluções comuns que satisfazem simultaneamente todas as expressões.

As fases são apresentadas separadamente substituindo os valores dos parâmetros de rede (δ_{k_x} , δ_{k_y} e $\delta_{k_{x,y}}$), assim como foram aplicados nos resultados da teoria de ondas de spin linear. As expressões para Δ_π e Λ_π assumem os valores dos parâmetros de rede em (π, π) na fase antiferromagnética e $(\pi, 0)$ na fase colinear antiferromagnética.

⁵Uma demonstração alternativa para as expressões dos parâmetros numéricos é apresentada no Apêndice A.

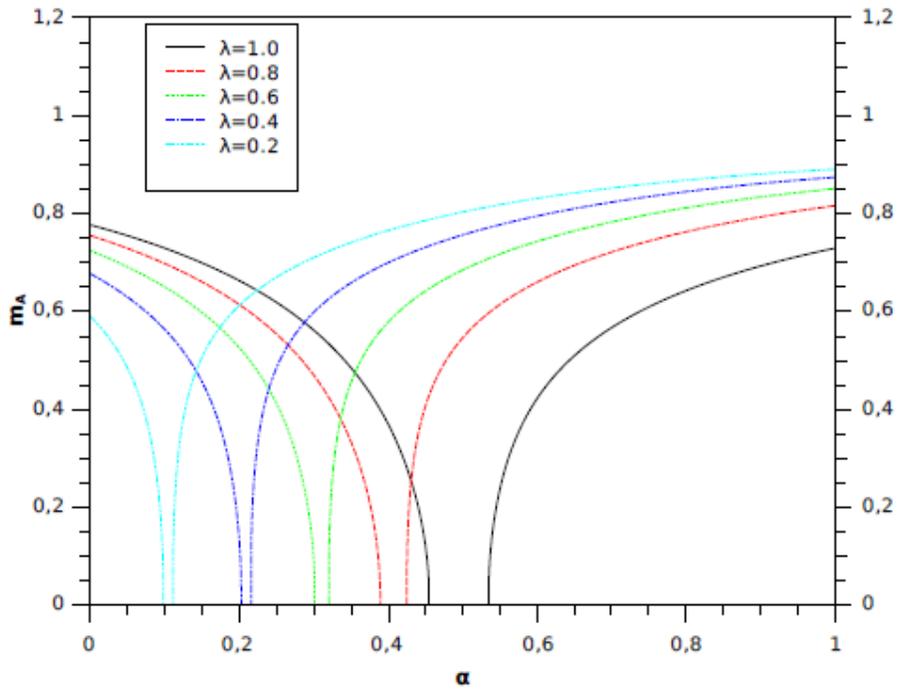


Figura 4.3: Comportamento das magnetizações de sub-rede m_A em função do parâmetro de frustração α para diversos valores de λ para o modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada em $T = 0$, obtido pelo método dos operadores de Sachdev.

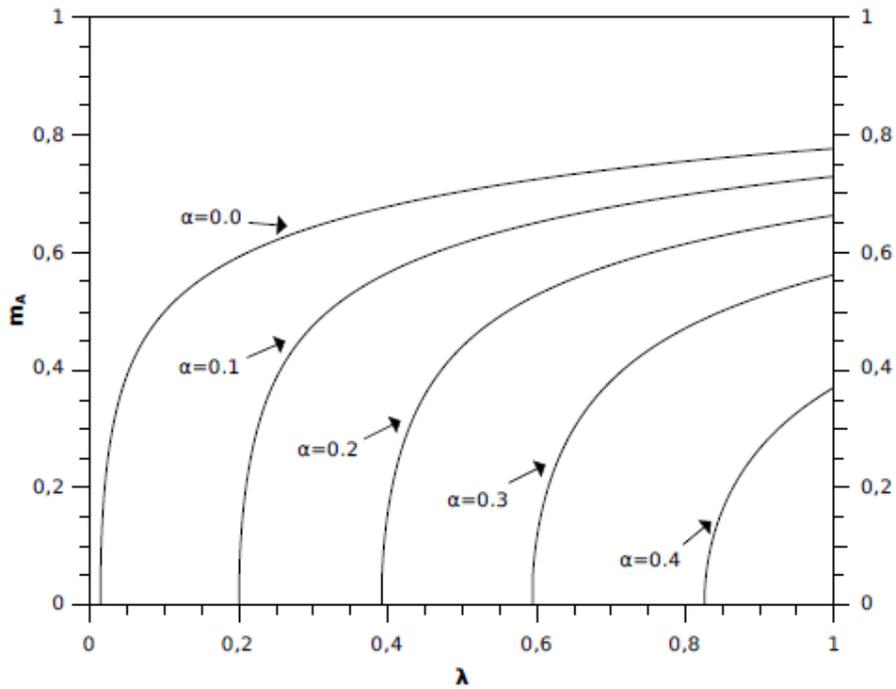


Figura 4.4: Comportamento das magnetizações de sub-rede m_A em função do parâmetro de frustração λ para diversos valores do parâmetro de α para o modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ com spin-1 na rede quadrada em $T = 0$ na fase antiferromagnética, obtido pelo método dos operadores de Sachdev.

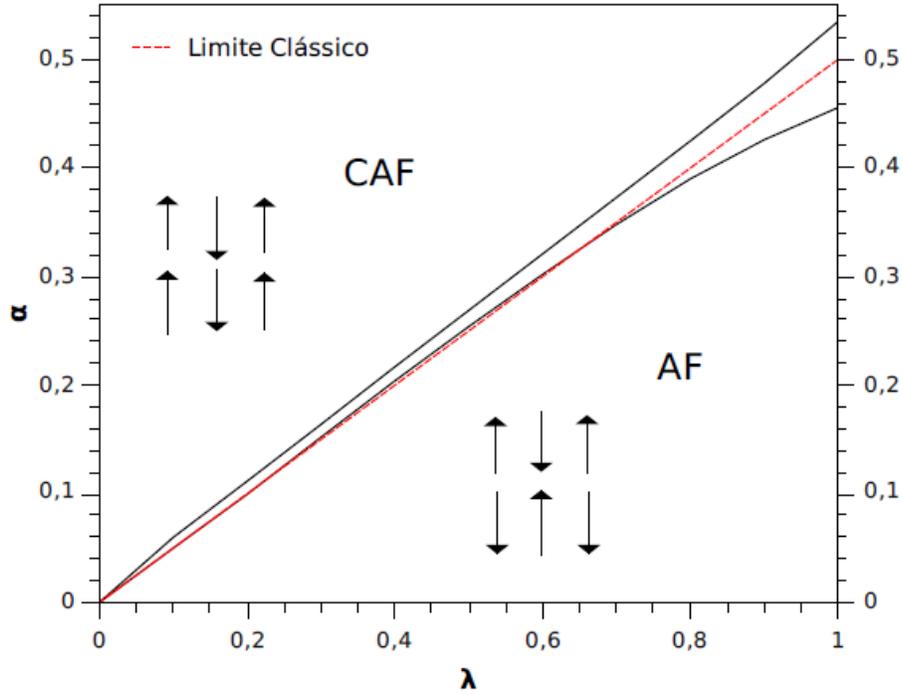


Figura 4.5: Diagrama de fase no plano $\lambda - \alpha$ para o estado fundamental do modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada anisotrópica, obtido pelo método dos operadores de Sachdev. As curvas apresentadas nas fases AF e CAF são de transições de segunda ordem entre a fase intermediária LS, onde comparamos o resultado obtido com a linha tracejada que corresponde ao resultado do limite clássico $\alpha/\lambda = 0.5$.

Os resultados obtidos após o tratamento algébrico com os operadores de Sachdev permitiram uma análise qualitativa e quantitativa a partir de uma construção gráfica relacionando os parâmetros do Hamiltoniano (λ e α) e a magnetização m_A , conforme apresentado na figura (4.3) mostrando o caso específico de spin-1, onde observamos a fase intermediária desordenada entre as fases AF e CAF.

Na figura (4.3) temos os comportamentos das magnetizações de sub-rede m_A em função do parâmetro de frustração α e diversos valores de λ . Obtemos curvas das magnetizações m_A fixando valores de λ , e assim valores críticos de α eram apresentados em transições de segunda ordem para as fases AF e CAF. Ao fixar o valor isotrópico $\lambda = 1$, o modelo generalizado $J_1 - J'_1 - J_2$ recai no modelo canônico $J_1 - J_2$, com o valor $\alpha_{1c} \simeq 0.45$ na fase antiferromagnética (AF) e o valor $\alpha_{2c} \simeq 0.53$ na fase colinear antiferromagnética (CAF) com transições de fase de segunda ordem. As curvas seguintes para as magnetizações m_A foram construídas para as fases AF e CAF, fixando previamente os valores de $\lambda < 1$, e conseguimos obter todas as curvas com transições de segunda ordem nas duas fases, onde observamos a existência da fase intermediária desordenada para $0 < \lambda \leq 1$.

O parâmetro de frustração α foi fixado para obter a figura (4.4), e, assim conseguimos avaliar a relação entre a magnetização m_A e os valores críticos de λ . Para o valor fixo de $\alpha = 0$ obtivemos o valor $\lambda_c = 0.014$, e a medida que aumentamos o efeito da frustração (valor de α), a ordem AF é diminuída, desta maneira $\lambda_c(\alpha)$ cresce monotonicamente com o crescimento do valor de α .

Os valores críticos dos parâmetros α e λ obtidos graficamente na figura (4.3) permitiu a construção de um diagrama de fase, no qual os dois parâmetros foram relacionados no plano $\lambda - \alpha$. Na figura (4.5) apresentamos curvas com transições de segunda ordem nas fases AF e CAF, com uma fase intermediária desordenada entre as duas fases ordenadas para todo valor de λ , em desacordo com os resultados preliminares obtidos por Bishop e colaboradores [67] usando o método CCM, no qual não apresentam a fase intermediária para qualquer valor de $\lambda \in [0, 1]$ existindo ainda um ponto tricrítico no diagrama de fase.

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas Futuras

Os modelos de spins quânticos em baixa dimensionalidade com interações competitivas têm sido extensamente analisados nos últimos anos, em particular, o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnético numa rede quadrada. Este modelo em baixa temperatura, além de apresentar efeito de *frustração* devido à competição entre as interações de primeiros (J_1) e segundos (J_2) vizinhos, temos a presença de flutuações quânticas que são mais acentuadas para baixos valores do spin S . No estado fundamental ($T = 0$) temos duas fases ordenadas: a antiferromagnética (AF) e a colinear antiferromagnética (CAF). A fase AF é caracterizada por apresentar uma configuração de spin (clássica) como referência formada por spins orientados antiparalelamente, enquanto na fase CAF temos uma configuração com os spins orientados em linhas (ou colunas) paralelamente e alternadas em direções opostas ao longo das colunas (linhas). Os parâmetros de ordem das fases AF e CAF são representados pela magnetização de sub-rede m_A , que varia monotonicamente com o parâmetro de frustração $\alpha = J_2/J_1$. Para o valor de S finito, devido às flutuações quânticas, o valor de m_A é menor do que o valor clássico $m_A = S$. Na fase AF temos que m_A decresce com o aumento de α , e tende a zero continuamente quando atingimos o valor crítico (transição de fase quântica contínua) $\alpha = \alpha_{1c} \simeq 0.41$. É aceito na literatura que na fase CAF m_A cresce monotonicamente com o aumento de α ,

onde em $\alpha = \alpha_{2c} \simeq 0.60$ temos uma transição de primeira ordem. Existe uma fase desordenada na região $\alpha_{1c} < \alpha < \alpha_{2c}$ que distingue de um estado paramagnético canônico, e é conhecido como estado líquido de spin (LS). Esta fase LS é caracterizada por apresentar estados singletos (dímeros) distribuídos aleatoriamente sobre a rede quadrada, apresentando uma ordem local que não são completamente compreendidas com todas as suas propriedades. Esta região desordenada (LS), $\Delta\alpha = \alpha_{2c} - \alpha_{1c}$, diminui com aumento do valor do spin (S), uma vez que as flutuações quânticas diminuem, de modo que no limite clássico ($S \rightarrow \infty$) $\Delta\alpha = 0$, ou seja, temos uma única transição (primeira ordem) entre os estados AF e CAF no ponto $\alpha_{2c} = \alpha_{1c} = 1/2$.

Apesar do modelo de Heisenberg AF em baixa dimensionalidade com spin inteiro, em especial $S = 1$, ter propriedade qualitativa bem diferente do caso de spin semi-inteiro, como, por exemplo, a presença de gap para spin inteiro, que reflete no comportamento exponencial nas propriedades termodinâmicas quando $T \rightarrow 0$, esperamos que o diagrama de fase em $T = 0$ para S finito apresente o estado intermediário LS independente do valor de $S < \infty$, e que $\Delta\alpha$ diminua gradativamente com aumento de S . Resultados de ondas de spins linear, assim como não linear, têm mostrado que a fase intermediária desaparece apenas no limite clássico ($S \rightarrow \infty$). Portanto, em qualquer método utilizado deve-se esperar assintoticamente este comportamento do desaparecimento do estado desordenado intermediário (LS) com aumento de S . Outro fator que tem sido analisado para investigar a destruição deste estado desordenado LS é o aumento da dimensionalidade do sistema, assim como a presença de desordem. O modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$ AF em três dimensões não apresenta o estado LS. No caso limite, em uma cadeia Heisenberg isotrópica AF é provado que quando $T = 0$ não existe ordem de longo alcance (i.e., $m_A = 0$), assim sendo, a diminuição da dimensionalidade pode também destruir este estado intermediário LS.

O objetivo deste trabalho foi analisar a generalização do modelo $J_1 - J_2$ considerando inequivalência nas interações entre primeiros vizinhos, de tal forma que ao longo do eixo x temos uma interação J_1 e ao longo do eixo y uma interação J'_1 , o conhecido modelo de

Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ AF. No caso de spin $S = 1/2$ este modelo foi bastante discutido na literatura por diversos métodos e todos concluíram que para $\lambda (= J'_1/J_1) > \lambda_1$ o sistema tem uma característica tipo rede $2d$ com presença da fase intermediária desordenada (LS), enquanto que para $\lambda < \lambda_1$ o sistema se comporta tipo rede $1d$ sem presença desta fase intermediária, existindo apenas uma transição de primeira ordem direta entre as fases AF e CAF. Por outro lado, no caso do spin $S = 1$ disponibilizamos apenas de um resultado na literatura (CCM) no qual mostra que não temos este estado LS para todos os valores de $\lambda \in [0, 1]$, com presença de um ponto tricrítico (PTC) localizado em $(\lambda_{PTC}, \alpha_{PTC})$, onde para $\lambda > \lambda_{PTC} (< \lambda_{PTC})$ temos uma transição de segunda (primeira) ordem no diagrama de fase no plano $\alpha - \lambda$. A falta de resultados neste modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ AF com spin-1 tem motivado a aplicação de dois métodos de teoria quântica de campos para descrever e elucidar o verdadeiro comportamento do diagrama de fase.

Inicialmente aplicamos a tradicional teoria de ondas de spin no capítulo 3 e concentramos nossos estudos na aproximação linear dos operadores de bósons. Os parâmetros de ordem nas fases AF e CAF foram obtidos para diversos valores de α e λ , fixando os valores de $S = 1/2$ e 1. No caso de $S = 1/2$, em contradição com os resultados disponíveis na literatura, onde observamos o estado desordenado para todos os valores de $\lambda \in [0, 1]$. No caso de spin $S = 1$, obtemos um resultado qualitativamente equivalente aos encontrados por outros métodos no caso do spin $S = 1/2$, com presença do estado intermediário para $\lambda > \lambda_1 \simeq 0.66$.

No capítulo 4, aplicamos o método dos operadores de Sachdev (*bond operator*) no modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ AF com spin-1. O objetivo principal do nosso estudo foi explorar o que já está conhecido na literatura, e acrescentar esta nova metodologia como uma nova ferramenta para o estudo do modelo aqui discutido. Este novo método tem mostrado grande eficiência no estudo de sistemas que apresentam condensação de Bose-Einstein, e também em modelos de Heisenberg quântico antiferromagnético bidimensional frustrado. Nossos resultados têm indicado que para todos os valores de $\lambda \in [0, 1]$ o estado intermediário existe, mostrando comportamento qualitativo diferente dos obtidos

usando ondas de spins linear (capítulo 3) e o CCM. Finalmente, temos investigado o comportamento do parâmetro de ordem m_A do modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ AF com spin-1 como um função do parâmetro da interação entre cadeias (λ). Verificamos que usando ondas de spin, m_A decresce monotonicamente com o decréscimo de λ se anulando assintoticamente quando $\lambda \rightarrow 0$ na forma $m_A \simeq \lambda^{1/2}$. Por outro lado, com o uso do método dos operadores de Sachdev verificamos que a ordem é destruída na forma $m_A \simeq (\lambda - \lambda_c)^{1/2}$, sendo $\lambda_c \simeq 0.014$ em concordância com os resultados CCM.

Como perspectivas futuras temos:

1) Resumindo, temos obtido através de dois métodos diferentes resultados distintos do diagrama de fase no plano $\alpha - \lambda$ no modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ AF com spin-1, que a priori deve ser investigado por outros métodos, ou melhorar os níveis de aproximações utilizadas nos métodos das teorias de ondas de spin e operadores de Sachdev;

2) incluir anisotropia de íon único;

3) incluir interação entre terceiros vizinhos;

4) analisar outras redes topologicamente diferentes (triangular, honeycomb, kagomé).

Apêndice A

Cálculo dos Parâmetros Numéricos

Os parâmetros físicos do modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético, apresentados na seção (4.4), são obtidas através de equações de ponto de sela. Consideramos um sistema linear homogêneo e de coeficientes constantes, onde as equações diferenciais devam se anular em seus pontos de equilíbrio, denotando uma solução. Entretanto, os cálculos diferenciais apresentam uma forma extensa para os cálculos numéricos, sendo assim, utilizamos neste trabalho as expressões apresentadas nos artigos de Wang et al. para $S = 1$. A demonstração das expressões utilizam as correlação entre os operadores de bósons e a condição de número de ocupação de único estado possível.

Cálculo do parâmetro t^2

Primeiramente recordamos a expressão para a relação de restrição dos estados ocupados que é representada por

$$u_i^\dagger u_i + d_i^\dagger d_i + t_i^\dagger t_i = 1 \quad (\text{A.1})$$

e na qual tomamos a média

$$\langle u_i^\dagger u_i \rangle + \langle d_i^\dagger d_i \rangle = 1 - t^2. \quad (\text{A.2})$$

Através de uma transformada de Fourier chegamos a seguinte expressão

$$1 - t^2 = \frac{1}{N} \sum_k \left[\langle u_k^\dagger u_k \rangle + \langle d_k^\dagger d_k \rangle \right], \quad (\text{A.3})$$

na qual faremos uso das transformadas de Bogoliubov

$$\begin{cases} u_k = \alpha_k \tilde{a}_k + \beta_k \tilde{b}_k^\dagger \\ d_k = \alpha_k \tilde{b}_k + \beta_k \tilde{a}_k^\dagger \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

e seus adjuntos

$$\begin{cases} u_k^\dagger = \alpha_k \tilde{a}_k^\dagger + \beta_k \tilde{b}_k \\ d_k^\dagger = \alpha_k \tilde{b}_k^\dagger + \beta_k \tilde{a}_k. \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

A expressão (A.3) apresenta correlações entre operadores de bósons, podemos então inserir nesta as expressões (A.4) e (A.5), e organizando os termos em comum obtemos

$$\begin{aligned} 1 - t^2 &= \frac{1}{N} \sum_k \left[\langle (\alpha_k \tilde{a}_k^\dagger + \beta_k \tilde{b}_k) (\alpha_k \tilde{a}_k + \beta_k \tilde{b}_k^\dagger) \rangle \right. \\ &\quad \left. + \langle (\alpha_k \tilde{b}_k^\dagger + \beta_k \tilde{a}_k) (\alpha_k \tilde{b}_k + \beta_k \tilde{a}_k^\dagger) \rangle \right], \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

e em seguida aplicamos as médias, encontrando a expressão

$$1 - t^2 = \frac{1}{N} \sum_k \left[2\beta_k^2 + (\alpha_k^2 + \beta_k^2) \left(\langle \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k \rangle + \langle \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k \rangle \right) \right], \quad (\text{A.7})$$

na qual utilizamos também as relações de comutação entre os operadores bosônicos.

Os coeficientes obtidos a partir da aplicação dos operadores na transformação de Bogoliubov têm a forma

$$\alpha_k^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{(C_{1k} + C_{2k})}{\sqrt{(C_{1k} + C_{2k})^2 - 4C_{3k}^2}} \right] \quad (\text{A.8})$$

e

$$\beta_k^2 = \frac{1}{2} \left[-1 + \frac{(C_{1k} + C_{2k})}{\sqrt{(C_{1k} + C_{2k})^2 - 4C_{3k}^2}} \right], \quad (\text{A.9})$$

e somando estas expressões obtemos o resultado

$$\begin{aligned} \alpha_k^2 + \beta_k^2 &= \frac{(C_{1k} + C_{2k})}{\sqrt{(C_{1k} + C_{2k})^2 - 4C_{3k}^2}} \\ &= \frac{1}{2} \frac{(C_{1k} - C_{2k})}{\sqrt{\left(\frac{C_{1k} + C_{2k}}{2}\right)^2 - C_{3k}^2}}. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Temos definido novas expressões

$$\Lambda_k \equiv \frac{C_{1k} + C_{2k}}{2}, \quad (\text{A.11})$$

$$\Delta_k \equiv C_{3k} \quad (\text{A.12})$$

e

$$w_k = \sqrt{\Lambda_k^2 - \Delta_k^2}, \quad (\text{A.13})$$

e substituindo em (A.10) obtemos o resultado

$$\alpha_k^2 + \beta_k^2 = \frac{\Lambda_k}{w_k}. \quad (\text{A.14})$$

Da mesma forma, podemos definir a expressão

$$\beta_k^2 = \frac{1}{2} \left[-1 + \frac{\Lambda_k}{w_k} \right]. \quad (\text{A.15})$$

Com estes resultados, inserimos (A.14) e (A.15) na expressão (A.7), e teremos que

$$2 - t^2 = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\Lambda_k}{w_k} \left[1 + \langle \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k \rangle + \langle \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k \rangle \right], \quad (\text{A.16})$$

no qual podemos extrair do somatório uma expressão correspondente ao valor de $k = \pi$, na forma

$$2 - t^2 = \frac{1}{N} \frac{\Lambda_\pi}{w_\pi} n(w_\pi) + \frac{1}{N} \sum_k' \frac{\Lambda_k}{w_k} \left[1 + n(w_k^a) + n(w_k^b) \right]. \quad (\text{A.17})$$

Quando $w_\pi = 0$, temos no condensado de bósons que

$$n(w_\pi) \equiv n_0 \frac{w_\pi}{\Lambda_\pi} N \quad (\text{A.18})$$

e substituímos na expressão (A.17), transformando os números de ocupação na forma de exponenciais, encontramos que

$$t^2 = 2 - n_0 - \frac{1}{N} \sum_k' \frac{\Lambda_k}{w_k} \coth \left(\frac{\beta w_k}{2} \right). \quad (\text{A.19})$$

Quando $T = 0$, obtemos a expressão

$$t^2 = 2 - n_0 - \frac{1}{N} \sum_k' \frac{\Lambda_k}{w_k} \quad (\text{A.20})$$

que apresenta o parâmetro t para o sistema físico no estado fundamental.

Cálculo do parâmetro p_1

A expressão utilizada para p_1 é apresentada como uma correlação entre os operadores diagonais, e com uma transformada de fourier, obtemos:

$$p_1 = \frac{1}{N} \sum_k \langle d_k^\dagger u_k^\dagger \rangle \delta_{k_x} \quad (\text{A.21})$$

sendo $\delta_x = \cos(k_x a)$ o número de coordenação da rede para as interações em linha J_1 com $z_x = 2$ vizinhos.

Para a definição das constantes de diagonalização, utilizamos as expressões (A.5) e efetuamos os produtos de operadores, e, assim, teremos

$$\begin{aligned}
p_1 &= \frac{1}{N} \sum_k \left[\left\langle \left(\alpha_k \tilde{b}_k^\dagger + \beta_k \tilde{a}_k \right) \left(\alpha_k \tilde{a}_k^\dagger + \beta_k \tilde{b}_k \right) \right\rangle \right] \delta_{k_x} \\
&= \frac{1}{N} \sum_k \left[\left\langle \alpha_k^2 \tilde{b}_k^\dagger \tilde{a}_k^\dagger + \alpha_k \beta_k \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k + \alpha_k \beta_k \tilde{a}_k \tilde{a}_k^\dagger + \beta_k^2 \tilde{a}_k \tilde{b}_k \right\rangle \right] \delta_{k_x} \\
&= \frac{1}{N} \sum_k \alpha_k \beta_k \left[1 + \left\langle \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k \right\rangle + \left\langle \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k \right\rangle \right] \delta_{k_x}.
\end{aligned} \tag{A.22}$$

Realizamos o processo de diagonalização do modelo, apresentado na seção (4.4), quando $\chi_{3k} = 0$, ou seja,

$$\alpha_k \beta_k (C_{1k} + C_{2k}) + (\alpha_k^2 + \beta_k^2) C_{3k} = 0 \tag{A.23}$$

com as constantes que diagonalizam o Hamiltoniano, dadas por

$$\alpha_k \beta_k (C_{1k} + C_{2k}) = -C_{3k} (\alpha_k^2 + \beta_k^2) \tag{A.24}$$

e

$$\alpha_k \beta_k = -\frac{C_{3k}}{C_{1k} + C_{2k}} (\alpha_k^2 + \beta_k^2), \tag{A.25}$$

e substituindo a expressão (A.10) neste produto obtemos

$$\begin{aligned}
\alpha_k \beta_k &= -\frac{C_{3k}}{C_{1k} + C_{2k}} \left[\frac{1}{2} \frac{(C_{1k} - C_{2k})}{\sqrt{\left(\frac{C_{1k} + C_{2k}}{2}\right)^2 - C_{3k}^2}} \right] \\
&= -\frac{1}{2} \frac{\Delta_k}{\sqrt{\Lambda_k^2 - \Delta_k^2}} \\
&= -\frac{1}{2} \frac{\Delta_k}{w_k}
\end{aligned} \tag{A.26}$$

onde utilizamos as definições de Λ_k , Δ_k e w_k .

Portanto, substituindo a expressão (A.23) em (A.19), temos que:

$$p_1 = \frac{1}{N} \sum_k \left(-\frac{1}{2} \frac{\Delta_k}{w_k} \right) \left[1 + \langle \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k \rangle + \langle \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k \rangle \right] \delta_{k_x}. \quad (\text{A.27})$$

As médias dos operadores podem ser substituídas pelo número de ocupação, e impomos uma restrição no somatório para o valor de $k = \pi$, e obtemos

$$p_1 = -\frac{1}{2N} \frac{\Delta_\pi}{w_\pi} n(w_\pi) \delta_{k_x=\pi} - \frac{1}{2N} \sum_k ' \frac{\Delta_k}{w_k} \left[1 + n(w_k^a) + n(w_k^b) \right] \delta_{k_x}. \quad (\text{A.28})$$

Podemos transformar os números de ocupação em termos de exponenciais

$$p_1 = \frac{1}{2} \frac{\Delta_k}{\Lambda_k} n_0 - \frac{1}{2N} \sum_k ' \frac{\Delta_k}{w_k} \delta_{k_x} \coth \left(\frac{\beta w_k}{2} \right). \quad (\text{A.29})$$

O parâmetro p_1 obtido para os estados condensados em $T = 0$, é dado na expressão

$$p_1 = \frac{1}{2} \frac{\Delta_\pi}{\Lambda_\pi} n_0 - \frac{1}{2N} \sum_k ' \frac{\Delta_k}{w_k} \delta_{k_x}. \quad (\text{A.30})$$

Cálculo do parâmetro p_2

A expressão utilizada para p_2 é a mesma utilizada na expressão (A.21), alterando o parâmetro de rede para as interações J'_1 , e com uma transformada de Fourier obtemos

$$p_2 = \frac{1}{N} \sum_k \langle d_k^\dagger u_k^\dagger \rangle \delta_{k_y} \quad (\text{A.31})$$

sendo o número de coordenação de rede $\delta_{k_y} = \cos(k_y a)$ com $z_y = 2$ vizinhos.

Aplicamos em (A.31) a transformada de Bogoliubov (A.5), na forma

$$p_2 = \frac{1}{N} \sum_k \alpha_k \beta_k \left[1 + \langle \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k \rangle + \langle \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k \rangle \right] \delta_{k_y} \quad (\text{A.32})$$

respeitando as relações de comutação.

Inserimos em (A.32) a expressão (A.26), onde encontramos:

$$p_2 = -\frac{1}{2N} \frac{\Delta_\pi}{w_\pi} n(w_\pi) \delta_{k_y=\pi} - \frac{1}{2N} \sum_k' \frac{\Delta_k \delta_{k_y}}{w_k} \coth\left(\frac{\beta w_k}{2}\right). \quad (\text{A.33})$$

Através do uso das transformações de exponenciais no número de ocupação, podemos aproximar o resultado em $T = 0$, onde encontramos

$$p_2 = \frac{1}{2} \frac{\Delta_\pi}{\Lambda_\pi} n_0 - \frac{1}{2N} \sum_k' \frac{\Delta_k}{w_k} \delta_{k_y}. \quad (\text{A.34})$$

Cálculo do parâmetro p_3

Inserimos na expressão (A.21) o parâmetro das interações diagonais $\delta_{k_{x,y}}$ para encontrar a expressão de correlação p_3 , e com uma transformada de Fourier obtemos:

$$p_3 = \frac{1}{N} \sum_k \langle d_k^\dagger u_k^\dagger \rangle \delta_{k_{x,y}} \quad (\text{A.35})$$

onde utilizamos o número de coordenação de rede $\delta_{k_{x,y}} = \cos(k_x a) \cos(k_y a)$ com $z_{x,y} = 4$ vizinhos.

Substituindo as expressões (A.5) em (A.35), teremos:

$$p_3 = \frac{1}{N} \sum_k \alpha_k \beta_k \left[1 + \langle \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k \rangle + \langle \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k \rangle \right] \delta_{k_{x,y}} \quad (\text{A.36})$$

onde foram introduzidas as relações de comutação dos operadores bosônicos.

Portanto, substituindo a expressão (A.26) em (A.36), e quando $T = 0$ obtemos:

$$p_3 = -\frac{1}{2N} \frac{\Delta_\pi}{w_\pi} n(w_\pi) \delta_{k_{x,y}=\pi} - \frac{1}{2N} \sum_k' \frac{\Delta_k \delta_{k_{x,y}}}{w_k} \coth\left(\frac{\beta w_k}{2}\right) \quad (\text{A.37})$$

resultando em

$$p_3 = -\frac{1}{2} \frac{\Delta_\pi}{\Lambda_\pi} n_0 - \frac{1}{2N} \sum_k' \frac{\Delta_k}{w_k} \delta_{k_{x,y}}. \quad (\text{A.38})$$

Cálculo do parâmetro μ

O cálculo do parâmetro físico μ é semelhante aos casos anteriores, porém devem ser aplicadas a energia livre de Gibbs:

$$G = Ne_0 - \left(\frac{1}{\beta}\right) \sum_k \ln [1 + n(w_k^a)] - \left(\frac{1}{\beta}\right) \sum_k \ln [1 + n(w_k^b)], \quad (\text{A.49})$$

onde utilizamos a energia por spin definida por

$$e_0 = \left(\frac{1}{N}\right) \sum_k (w_k - \Lambda_k) + \left(\frac{1}{N}\right) C \quad (\text{A.40})$$

com $n(w_k^{a,b}) = 1/(e^{\beta w_k^{a,b}} - 1)$ e $\beta = 1/k_B T$.

Derivando parcialmente (A.49) em relação ao potencial químico, na forma

$$\left(\frac{\partial G}{\partial \mu}\right) = 0 \quad (\text{A.41})$$

encontramos o mínimo de energia que permite apresentar uma expressão para o parâmetro μ , e assim, extraindo do somatório o valor de $k = \pi$, temos que

$$\mu = -\frac{z}{N} \left(1 - \frac{\Delta_k}{\Lambda_k}\right) n_0 + \frac{1}{N} \sum_k' \left(\frac{\Lambda_k - \Delta_k}{w_k}\right) [1 + n(w_k^a) + n(w_k^b)], \quad (\text{A.44})$$

onde z ($z = 4$) é o número de vizinhos para uma rede quadrada, obtido com a transformada de Fourier.

Uma aproximação para o número de ocupação para os estados condensados em $T = 0$ permite apresentar o resultado:

$$\mu = -\frac{4}{N} \left(1 - \frac{\Delta_k}{\Lambda_k}\right) n_0 + \frac{1}{N} \sum_k' \left(\frac{\Lambda_k - \Delta_k}{w_k}\right) f(k), \quad (\text{A.45})$$

onde inserimos na expressão a definição $f(k) = 2(\delta_{k_x} + \lambda\delta_{k_y} + 2\alpha\delta_{k_{x,y}})$.

Cálculo do parâmetro m

Definimos uma magnetização de subrede pela correlação das componentes de spin, dada por

$$m_A^2 \equiv \langle S_i^x S_i^x \rangle \quad (\text{A.46})$$

com $S_i^x = \frac{1}{2} (S_i^+ + S_i^-)$.

Efetuada o produto dos operadores na expressão (A.46), e avaliando as médias com suas relações de comutação, teremos que:

$$m_A^2 = t^2 \left(\langle d_i u_i \rangle + \langle d_i^\dagger u_i^\dagger \rangle + \langle u_i^\dagger u_i \rangle + \langle d_i^\dagger d_i \rangle \right) + t^2. \quad (\text{A.47})$$

Utilizamos a transformada de Fourier, seguida de uma transformada de Bogoliubov para obter

$$\begin{aligned} m_A^2 &= \frac{4}{N} \sum_k t^2 \left[2\alpha_k \beta_k \left(\langle \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k \rangle + \langle \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k \rangle \right) \right] + (\alpha_k^2 + \beta_k^2) \left(\langle \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k \rangle + \langle \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k \rangle \right) \\ &+ (\alpha_k^2 + \beta_k^2) \left(\langle \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k \rangle + \langle \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k \rangle \right) + 2t^2 (\alpha_k \beta_k + \beta_k^2) + t^2. \end{aligned} \quad (\text{A.48})$$

Inserimos (A.14), (A.15) e (A.26) na expressão (A.48), e encontramos

$$m_A^2 = \frac{4}{N} \sum_k t^2 \left(\frac{\Lambda_k - \Delta_k}{w_k} \right) \left(1 + \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k + \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k \right). \quad (\text{A.49})$$

Os operadores dão origem aos números de ocupação, e com uma aproximação para o número de estados no estado fundamental obtemos:

$$m_A = 2t\sqrt{n_0} \quad (\text{A.50})$$

sendo $n_0 \equiv \frac{1}{N} \frac{\Lambda_\pi}{w_\pi} n(w_\pi)$.

Referências

- [1] Ribeiro, G. A. P.; Rev. Bras. de Ens. de Física, vol. **22**, no. 3 (2000).
- [2] Novak, M. A.; Introdução ao Magnetismo, II Escola Brasileira de Magnetismo, IF-UFRJ (1999).
- [3] Sakurai, J. J.; Modern Quantum Mechanics, Prentice-Hall (1994).
- [4] Bassalo, J. M. F.; Eletrodinâmica Clássica, Ed. Livraria da Física, SP (2007).
- [5] Griffiths, D. J.; Introduction to Quantum Mechanics, Prentice Hall (1994).
- [6] Salinas, S. R. A.; Introdução à Física Estatística, SP, Ed. edUSP (2005).
- [7] Oliveira, M. J.; Termodinâmica, Ed. Livraria da Física, primeira edição, SP (2005).
- [8] Barnett, S. J.; Proc. Am. Acad. Arts e Sci. **75**, 109 (1944), Scott, G. G.; Phys. Rev. **82**, 542 (1951), Ibid **87**, 697 (1952).
- [9] Kageyama, H.; Kitano, T.; Oba, N.; Nishi, M.; Nagai, S.; Hirota, K.; Viciu, L.; Wiley, J. B.; Yasuda, J.; Baba, Y.; Ajiro, Y.; Yoshimura, K.; J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 1702-1705 (2005).
- [10] Oba, N.; Kageyama, H.; Kitano, T.; Yasuda, J.; Baba, Y.; Nishi, M.; Hirota, K.; Narumi, Y.; Hagiwara, M.; Kindo, K.; Saito, T.; Ajiro, Y.; Yoshimura, K.; J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 113601 (2006).

- [11] Kitada, A.; Hiroi, Z.; Tsujimoto, Y.; Kitano, T.; Kageyama, H.; Ajiro, Y.; Yoshimura, K.; J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 093706 (2007).
- [12] Stanley, H. E.; Introduction to phase transitions and critical phenomena (1971).
- [13] Ginzburg, V. L.; Sov. Phys. Solid State **2**, 1824 (1960).
- [14] Sachdev, S.; Quantum Phase Transitions, Cambridge University Press (1999).
- [15] J. Roberto Viana Azevedo; Tese de Doutorado: "Transição de Fase Quântica e Modelos de Spins Frustrados" UFAM/ UfSCar, SP (2007).
- [16] Wagner Antônio da Silva Nunes; Tese de Doutorado: "Comportamento Multicrítico no Modelo de Heisenberg Frustrado: Transições de Fases Clássica e Quântica", UfSCar, SP (2011).
- [17] Schollwöck, U.; Richter, J.; Farnell, D. J. J.; Bishop, R. F.; Quantum Magnetism, Lect. Notes Phys. 645, Ed. Springer, Berlim Heidelberg (2004).
- [18] Van Vleck, J. H.; Phys. Rev. **52**, 1178 (1937).
- [19] Ising, E.; Z. Phys. **31**, 253 (1925).
- [20] Onsager, L.; Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [21] Matsubara, T.; Matsuda, H.; Progr. Ther. Phys. **16**, 416 (1956).
- [22] Lieb, E.H.; Phys. Rev. Lett. **18**, 1046 (1967); ibi **19**, 108 (1967).
- [23] Carsten Timm; Theory of Magnetism, Technische Universitat Dresden, Institute for Theoretical Physics (2011).
- [24] Auerbach, A.; Interacting Eletrons and Quantum Magnetism, Ed. Springer, segunda edição (1994).

- [25] Kastner, M. A.; Birgeneau, R. J.; Thurston, T. R.; Picone, P. J.; Jenssen, H. P.; Gabbe, D. R.; Sato, M.; Fukuda, K.; Shamoto, S.; Endoh, Y.; Yamada, K.; Phys. Rev. B **38**, 6636 (1988).
- [26] Subir Sachdev; Quantum Phase Transitions, Department of Physics, Yale University, New Haven, CT 06520 ,USA (2004).
- [27] Gusmão, M. A.; Ordem Magnética: Aspectos Microscópicos; IF-UFRGS (2012).
- [28] Solon Pereira da Cruz Filho; Tese de Doutorado: "Influência das Anisotropias Magnéticas nos Processos de Magnetização de Ligas Amorfas", IFGW-UNICAMP, SP (1992).
- [29] José Mendes Pires, Dissertação de Mestrado: "Avaliação da Anisotropia Magnética de Filmes Finos por Ressonância Ferromagnética"; IFGW-UNICAMP, SP (2002).
- [30] Balents, L.; Nature **464** (2010).
- [31] Shastry, B. S.; Suthreland, B. S.; Physica B **108**, 1069 (1981).
- [32] Mermin, N. D.; Wagner, H.; Phys. Rev. Lett. **22**, 1133 (1966).
- [33] Phillips, A. C.; Introduction to Quantum Mechanics, Ed. Wiley, R.U. (2003).
- [34] Peres, A.; Quantum Theory: Concepts and Methods, Kluwer Academic Publishers, vol. **72**, N. Y. (2002).
- [35] Sachdev, S.; J. Stat. Mech. (2010) P11022
- [36] Yang, J.; Shen, J. L.; Lin, H. Q.; J. Phys. Soc. Jpn. **68**, No. 7, 2384-2389 (1999).
- [37] Viana, J. R.; Sousa, J. R.; Phys. Rev. B **75**, 052403 (2007).
- [38] dos Anjos, R. A.; Viana, J. R.; Sousa, J. R.; Plascak, J. A.; Phys. Rev. E **76**, 022103 (2007).

- [39] dos Anjos, R. A.; Viana, J. R.; Sousa, J. R.; Phys. Lett. A **372**, 1180 (2008).
- [40] Viana, J. R.; Sousa, J. R.; Continentino, M.; Phys. Rev. B **77**, 172412 (2008).
- [41] Yoshihiro Tsujimoto and Hiroshi Kageyama (2012). Ion-Exchange Reactions for Two-Dimensional Quantum Antiferromagnetism, Ion Exchange Technologies, Prof. Ayben Kilislioglu (Ed.), ISBN: 978-953-51-0836-8, InTech, DOI: 10.5772/52111. Available from: <http://www.intechopen.com/books/ion-exchange-technologies/ion-exchange-reactions-for-two-dimensional-quantum-antiferromagnetism>
- [42] Griffith, M. A.; Pires, A. S. T.; Sousa, J. R.; Solid State Commun. **152**, 1850 (2012).
- [43] Singh, R. R. P.; Zheng, W.; Oitmaa, J.; Sushkov, O. P.; Hamer, C. J.; Phys. Rev. Lett. **91**, 017201-1 (2003).
- [44] Nunes, W.; Viana, J. R.; Sousa, J. R.; J. Stat. Mech. 1742-5468 (2011).
- [45] Schmalfum, D.; Darradi, R.; Richter, J.; Schulenberg, J.; Ihle, D.; Phys. Rev. Lett. **97**, 157201 (2006).
- [46] Nunes, W.; de Sousa, J. R.; Viana, J. R.; J. Phys. Cond. Mater. **22**, 146004 (2010).
- [47] Nersesyan, A.; Tselik, A. M.; Phys. Rev. B **67**, 024422 (2003).
- [48] Bishop, R. F.; Li, P. H. Y.; Darradi, R.; Richter, J.; J. Phys.: Condens. Matter **20**, 255251 (2008).
- [49] Tsirlin, A. A.; H. Rosner; Phys. Rev. B **79**, 214417 (2009).
- [50] P. Sindzingre, Phys. Rev. B **69**, 94418 (2004).
- [51] Starykh, O. A.; Balents, L.; Phys. Rev. Lett. **93**, 127202-1 (2004).
- [52] Barbosa, M. C.; Phys. Rev. B **45**, 5199 (1992).

- [53] Chung, C. H.; Marton, J. B.; Mckenzie, R. H.; J. Phys. : Condens. Matter **13**, 5159 (2001); Chung, C. H.; Voelker, K.; Kim, Y. B.; Phys. Rev. B **68**, 094412 (2003).
- [54] Mabelini, O. D.; Salmon, O. D. R.; Sousa, J. R.; Solid State Commun. **165**, 33-38 (2013).
- [55] Sakai, T.; Takahashi, M.; J. Phys. Jpn. **58**, 3131 (1989).
- [56] Ihle, D.; Schindelin, C.; Weisse, A.; Fehske, H.; Phys. Rev. B **60**, 9240 (1990).
- [57] Sandvik, A. W.; Phys. Rev. Lett. **83**, 3069 (1999).
- [58] Rosner, H.; Eschring, H.; Hayn, R.; Drechsler, S. L.; Malek, J.; Phys. Rev. B **56**, 3402 (1997).
- [59] Affleck, I.; Gelfand, M. P.; Singh, R. R. P.; J. Phys. A **27**, 7313 (1994); *ibid* **28**, 1787(E) (1995).
- [60] Castro Neto, A. H.; Home, D.; Phys. Rev. Lett. **76**, 2165 (1994).
- [61] Matsumoto, M.; Todo, S.; Yasuda, C.; Takayama, H.; Phys. Rev. B **65**, 014407 (2001).
- [62] Wang, Z.; Phys. Rev. Lett. **78**, 126 (1997).
- [63] Zinke, R.; Schulenburg, J.; Richter, J.; The Europ. Phys. J. B **61**, 147 (2008).
- [64] Dmitriev, D. V.; Krivnov, V. Y.; J. E. T. P. Lett. **80**, 303 (2004).
- [65] Ishikawa, T.; Oguchi, T.; Progr. Theor. Phys. **54**, 1282 (1975).
- [66] Ruffo, S.; Mendonça, G.; Plascak, J. A.; de Sousa, J. R.; Phys. Rev. E **88**, 034101 (2013).
- [67] Bishop, R. F.; Li, P. H. Y.; Darradi, R.; Richter, J.; Europhys. Lett. **83**, 47004 (2008).

- [68] Bloch, F.; Z. Physik **61**, 206 (1930).
- [69] Bloch, F.; Z. Physik **74**, 295 (1932).
- [70] Holstein, T.; Primakoff, H.; Phys. Rev. **58**, 1098 (1940).
- [71] Anderson, P. W.; Phys. Rev. **86**, 694 (1952).
- [72] Kubo, R.; Phys. Rev. **87**, 568 (1952).
- [73] Oguchi, T.; Phys. Rev. **117**, 117 (1960).
- [74] Harris, A. B.; Kumar, D.; Halperin, B. I.; Hohenberg, P. C.; Phys. Rev. B **3**, 961 (1971).
- [75] Schafrothf, M. R.; Proc. Phys. Soc. A **67**, 33 (1954).
- [76] Kranendonckf, V.; Physica 21, **81** (1955).
- [77] Dyson, F. J.; Phys. Rev. **102**, 1217 (1956).
- [78] Thaller, B.; Visual Quantum Mechanics: Selected Topics with Computer-Generated Animations of Quantum-Mechanical Phenomena, Springer-Verlag, N.Y. (2000).
- [79] Kittel, C.; Introdução à Física do Estado Sólido, oitava edição, Ed. LTC (2006).
- [80] Stetz, A. W.; Advanced Quantum Mechanics, Oregon State University (2006).
- [81] Thalmeier, P.; Zhitomirsky, M. E.; Schmidt, B.; Shannon, N.; Phys. Rev. B **77**, 104441 (2008).
- [82] Chandra, P.; Doucot, B.; Phys. Rev. B **38**, 9335 (1998).
- [83] Chandra, P.; Coleman, P.; Larkin, A. I.; Phys. Rev. Lett. **64**, 88 (1990).
- [84] Mendonça, G.; Lapa, R.; Sousa, J. R.; Neto, M. A.; Majumdar, K.; Datta, T.; J. Stat. Mech. P06022 (2010).

- [85] Eur. Phys. J. B (2013) 86: 63
- [86] Zhong, Q. F.; Sorella, S.; Europhys. Lett. **21**, 629-635 (1993).
- [87] Sindzingre, P.; Phys. Rev. B **69**, 094418 (2004).
- [88] Moukouri, S.; J. Stat. Mech. P02002 (2006).
- [89] Sachdev, S.; Bhatt, R. N.; Phys. Rev. B **41**, 9323 (1990).
- [90] Auerbach, A.; Arovas, D. P.; "Schwinger Bosons Approaches to Quantum Antiferromagnetism"; Cornell University Library, arXiv:0809.4836v2 (2008).
- [91] Shankar, R.; Principles of Quantum Mechanics, segunda edição, Kluwer Academic, NY, 1994.
- [92] Gelfand, M. P.; Singh, R. R. P.; Huse, D. A.; J. Stat. Phys. **59**, 1093 (1990).
- [93] Daniel Lorenzo Reyes López, Tese de Doutorado: "Transições de Fase Quânticas em Sistemas Correlacionados", CBPF, RJ (2008).
- [94] Bagnato, V. S.; Rev. Bras. de Ens. de Física, vol. **19**, No.1 (1997).
- [95] Sachdev, S.; The quantum phases of matter, D. Phys.; Harvard University, Cambridge MA 02138, arXiv:1203.4565v4 (2012).
- [96] Sachdev, S.; Nature Physics **4**, 173 - 185 (2008).
- [97] Sachdev, S.; Reviews of Modern Physics **75**, 913 (2003). Sachdev, S.; "Order and Quantum Phase Transitions in the Cuprate Superconductors"; Cornell University Library, arXiv:cond-mat/0211005v6 (2002).
- [98] Gusmão, M. A.; Hamiltoniano BCS-Supercondutividade; IF-UFRGS (2011).
- [99] Wang, H. T.; Shen, J. L.; Su, Z. B.; Phys. Rev. B **56**, 14435 (1997).
- [100] Wang, H. T.; Lin, H. Q.; Shen, J. L.; Phys. Rev. B **61**, 4019 (2000).

[101] Wang, H. T.; Wang, Y.; Phys. Rev. B **71**, 104429 (2005).

[102] Kumar, B.; Phys. Rev. B **82**, 054404 (2010).