

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

Talles Hoenes Pimenta

**TRANSIÇÕES DE FASES QUÂNTICAS EM SISTEMAS BIDIMENSIONAIS COM  
ANISOTROPIA DE PLANO FÁCIL**

**BELO HORIZONTE**

**2021**

Talles Hoenes Pimenta

**Transições de fases quânticas em sistemas  
bidimensionais com anisotropia de plano fácil**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial à obtenção do título de Doutor em Ciências.

Orientador: Antônio Sérgio Teixeira Pires

Belo Horizonte

2021

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

P644t Pimenta, Talles Hoenes.  
Transições de fases quânticas em sistemas bidimensionais com anisotropia de plano fácil / Talles Hoenes Pimenta. – 2021.  
77f., enc. : il.

Orientador: Antônio Sérgio Teixeira Pires.  
Tese (doutorado) – Universidade Federal de Minas Gerais,  
Departamento de Física.  
Bibliografia: f. 72-77.

1. Matéria condensada. 2. Sistemas quânticos. 3. Anisotropia –  
Magnetismo - Teses.

I. Título. II. Pires, Antônio Sérgio Teixeira. III. Universidade Federal de  
Minas Gerais, Departamento de Física.

CDU – 530.145 (043)



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS  
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

### FOLHA DE APROVAÇÃO

A presente tese, intitulada "**Transições de fases quânticas em sistemas bidimensionais com anisotropia de plano fácil**" de autoria de **TALLES HOENES PIMENTA** submetida à Comissão Examinadora, abaixo-assinada, foi aprovada para obtenção do grau de **DOCTOR EM CIÊNCIAS**, em trinta de Junho de 2021.

Belo Horizonte, 30 de Junho de 2021.

Prof. Antônio Sérgio Teixeira Pires

Orientador do estudante

Departamento de Física/UFMG

Prof. Sidney de Andrade Leonel

Departamento de Física/UFJF

Prof. Bismarck Vaz da Costa

Departamento de Física/UFMG

Prof. Antônio Ribeiro de Moura

Departamento de Física/UFV

Prof. Ronald Dickman

Departamento de Física/UFMG



Documento assinado eletronicamente por **Antonio Sergio Teixeira Pires, Professor do Magistério Superior**, em 01/07/2021, às 12:30, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Ronald Dickman, Professor do Magistério Superior**, em 02/07/2021, às 08:54, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Sidiney de Andrade Leonel, Usuário Externo**, em 07/07/2021, às 12:44, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).

---



Documento assinado eletronicamente por **Bismarck Vaz da Costa, Diretor(a)**, em 14/07/2021, às 11:11, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).

---



Documento assinado eletronicamente por **Antônio Ribeiro de Moura, Usuário Externo**, em 15/07/2021, às 10:08, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).

---



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site [https://sei.ufmg.br/sei/controlador\\_externo.php?acao=documento\\_conferir&id\\_orgao\\_acesso\\_externo=0](https://sei.ufmg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0), informando o código verificador **0814708** e o código CRC **0AFD758C**.

---

***Dedicatória***

*Este trabalho é dedicado aos meus familiares que, independentemente da necessidade, me apoiaram incondicionalmente e acreditaram na minha formação. Pais, irmãos e avós.  
Em especial, minha amada esposa, que sempre esteve ao meu lado durante essa dura e recompensante jornada .*

# Agradecimentos

Gostaria de agradecer, primeiramente, a Deus, por todas as condições e permissões.

A Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio e fomento necessários para concretização do trabalho.

Ao meu magnífico orientador, Dr. Antônio Sérgio Teixeira Pires, pela orientação, direção, ajuda, paciência, dentre tantos outros apoios.

Aos meus professores, colegas e todo corpo técnico administrativos, que prestaram toda atenção necessária durante todo meu período de pós-graduação.

***Epígrafe***

*“Não vos amoldeis às estruturas deste mundo,  
mas transformai-vos pela renovação da mente,  
a fim de distinguir qual é a vontade de Deus:  
o que é bom, o que Lhe é agradável, o que é perfeito.  
(Bíblia Sagrada, Romanos 12, 2)*



# Resumo

O estudo de sistemas quânticos de spin é de grande interesse em Física da Matéria Condensada tanto do ponto de vista teórico quanto experimental, e o estudo de modelos magnéticos em baixa dimensão tem um papel importante em nosso entendimento de transições de fase, comportamento crítico e na física de sistemas de muitos corpos. Estudaremos sistemas magnéticos em duas dimensões com anisotropia de plano fácil. Esses sistemas apresentam uma transição de fase quântica em temperatura zero quando mudamos o parâmetro de anisotropia. Usaremos o formalismo de bósons de Schwinger  $SU(3)$ . Estudaremos 3 modelos. No primeiro trataremos do efeito da interação pseudo-dipolar que leva a um modo Higgs. No segundo, estudaremos cadeias acopladas e faremos comparação com dados experimentais. No terceiro problema analisaremos o efeito da interação de Moryia-Dzialoshinskii.

**Palavras-chave:** Sistemas Magnéticos, Anisotropia, Bósons de Schwinger

# Abstract

The study of quantum spin systems has a great interest in Condensed Matter Physics both from a theoretical and experimental point of view, and the study of low-dimensional magnetic models plays an important role in our understanding of phase transitions, critical behavior and in the physics of many-body systems. We will study magnetic systems in two dimensions with easy plane anisotropy. These systems have a quantum phase transition at zero temperature when we change the anisotropy parameter. We will use the  $SU(3)$  Schwinger boson formalism. We will study 3 models. In the first one, we will deal with the effect of the pseudo-dipolar interaction that leads to a Higgs mode. In the second, we will study coupled chains and compare them with experimental data. In the third problem we will analyze the effect of the Moryia-Dzialoshinskii interaction.

**Keywords:** Magnetic Systems, Anisotropy, Schwinger Bosons.

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>11</b>
<b>2</b>	<b>REFERENCIAL TEÓRICO</b>	<b>13</b>
<b>2.1</b>	<b>Modelos Magnéticos</b>	<b>13</b>
2.1.1	Teorema de Mermin-Wagner	17
2.1.2	Ferromagneto (FM)	18
2.1.3	Simetrias	19
2.1.4	Antiferromagneto (AFM)	19
<b>2.2</b>	<b>Representações de Bósons</b>	<b>20</b>
2.2.1	Representação de Holstein-Primakoff do ferromagneto	21
2.2.2	Representação de Holstein-Primakoff do antiferromagneto	26
2.2.3	Bósons de Schwinger SU(2) - Ferromagneto	31
2.2.4	Bóson de Schwinger SU(2) - Antiferromagneto	34
2.2.5	Diagonalização por Matriz Paraunitária	36
<b>2.3</b>	<b>Modelos de Heisenberg modificados</b>	<b>38</b>
2.3.1	Frustração magnética	39
<b>3</b>	<b>MODELO DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO DE PLANO FÁCIL E INTERAÇÃO PSEUDODIPOLAR</b>	<b>41</b>
<b>3.1</b>	<b>Resultados</b>	<b>45</b>
<b>4</b>	<b>MODELO DE HEISENBERG COM INTERAÇÕES ENTRE CADEIAS</b>	<b>51</b>
<b>4.1</b>	<b>Resultados</b>	<b>54</b>
4.1.1	Transição de fase para $T = 0$	54
4.1.2	Gap em $T \neq 0$	60
<b>5</b>	<b>MODELO DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO E INTERAÇÃO DE MORYIA-DZYALOSHINSKII</b>	<b>61</b>
<b>5.1</b>	<b>Resultados</b>	<b>65</b>
5.1.1	Resultados para $T$ não-nula	68
<b>6</b>	<b>CONCLUSÃO</b>	<b>70</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>72</b>

# 1 Introdução

As observações do fenômeno do magnetismo iniciaram-se com as investigações de lascas da magnetita mineral, denominadas de imãs (composto  $\text{FeO-Fe}_2\text{O}_3$ ), pelos chineses e, posteriormente, os gregos. Naturalmente, com a dominância do pensamento e da filosofia, surgiram as explicações para o fenômeno, indo desde a metafísica, por meio de explicações que não se relacionavam muito aos fatos, até os pensamentos mais sofisticados. Mas a contribuição mais relevante à ciência moderna veio somente a partir do início do século 17, com o uso da linguagem matemática na descrição da natureza. Os problemas relacionados ao magnetismo só foram encarados após a segunda metade do século 18, por um misto de teorias e experiências, fundamentadas por hipóteses racionais. Por um longo período, a teoria magnética se tornou variantes de um mesmo tema, os fluidos, até a descoberta do elétron, em que ela poderia ser colocada em um “terreno” mais sólido. Sabemos que o desenvolvimento da física do século 20, deveu-se principalmente à invenção da mecânica quântica e a construção do entendimento moderno do magnetismo dependeu, em grande parte, do progresso da teoria quântica como, por exemplo, o conceito de spin. Por outro lado, as maiores contribuições da teoria do magnetismo à física geral têm sido no campo da mecânica estatística quântica e da termodinâmica. Ao mesmo tempo em que os fundamentos teóricos se tornaram mais firmes, questões experimentais relacionadas ao magnetismo como, por exemplo, o motivo pelo qual o ferro não é magnetizado espontaneamente, se tornaram numerosas. A introdução do conceito de matrizes de spin, por Pauli, estabeleceu o spin como uma quantidade vetorial. Em 1929, Dirac, impondo exigências sobre as interações dessas quantidades, formulou explicitamente o conceito de operador de troca como uma quantidade escalar que mede o paralelismo de pares de spins vizinhos,  $S_i \cdot S_j$ , sendo um “ingrediente” essencial das interações magnéticas. O coeficiente (geralmente denotado por  $J$ ) desse operador era uma função da força eletrostática entre os elétrons, tão grande, que as interações magnéticas dipolo-dipolo (regidas por forças Amperianas) deveriam ser desprezadas, a princípio [1].

Nesse contexto, entendemos que as propriedades magnéticas dos materiais, bem como as várias questões experimentais citadas, estão associadas aos spins localizados e suas interações. Portanto, o estudo de sistemas quânticos de spin é de grande interesse em Física da Matéria Condensada, tanto do ponto de vista teórico, quanto experimental. O estudo de modelos magnéticos em baixas dimensões, por exemplo, vem desempenhando um papel importante ao nosso entendimento em transições de fase, comportamento crítico, e na física dos sistemas quânticos de muitos corpos [2], devido ao pronunciamento dos efeitos de interações competitivas entre os spins, gerando

frustração no comportamento coletivo dos sistemas magnéticos, e dos efeitos quânticos como, por exemplo, as flutuações quânticas. Um efeito importante, de interesse particular, é o fato de que em  $T = 0$  os sistemas quânticos podem exibir transição de fase devido a flutuações causadas pelo princípio de incerteza, chamada de transição de fase quântica (acrônimo QPT do inglês “*quantum phase transition*”) [3]. Essas variações acontecem pela mudança de um parâmetro que não seja a temperatura como, por exemplo, a pressão, o campo magnético aplicado ou um parâmetro de anisotropia (que será o caso estudado aqui). Em geral, a QPT acontece do estado magneticamente ordenado para o desordenado, e estas fases desordenadas magneticamente têm atraído grande atenção. Nesse contexto, os modelos que possibilitam o estudo do surgimento de estados desordenados exóticos, tais como líquidos de spins, ou fases nemáticas vêm despertando grande interesse na última década [4], como por exemplo, o modelo de Heisenberg de um antiferromagneto, em duas dimensões, com anisotropia de íon único e spin  $S = 1$ . Vários compostos, que podem ser descritos por este modelo, foram sintetizados [5–15]. A possibilidade de sintetizar diferentes compostos torna ideal o desenvolvimento do nosso entendimento dos fenômenos críticos associados a esses sistemas quânticos [16]. Em particular, nos concentraremos no estudo de sistemas do modelo de Heisenberg de um antiferromagneto, anisotrópico, em duas dimensões e spin  $S = 1$ , usando um formalismo do grupo  $SU(3)$ , denominado de bósons de Schwinger  $SU(3)$  através de uma representação útil de modelos desordenados ou simétricos.

No próximo capítulo, será abordado os principais aspectos de sistemas magnéticos, na seção de modelos magnéticos, e os procedimentos de tratamento do modelo, através de representações alternativas dos operadores de spin, na seção de representações de bósons. Depois serão abordados, nos outros capítulos, os modelos que foram trabalhados, na investigação da influência do parâmetro de anisotropia e, em alguns casos, das frustrações magnéticas e seus papéis na QPT. Finalmente, segue o último capítulo com as conclusões do trabalho.

## 2 Referencial Teórico

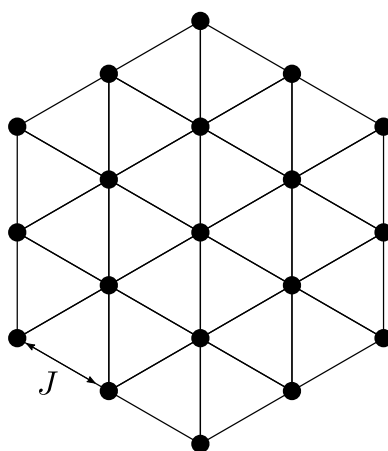
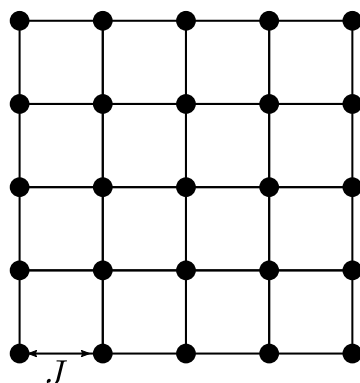
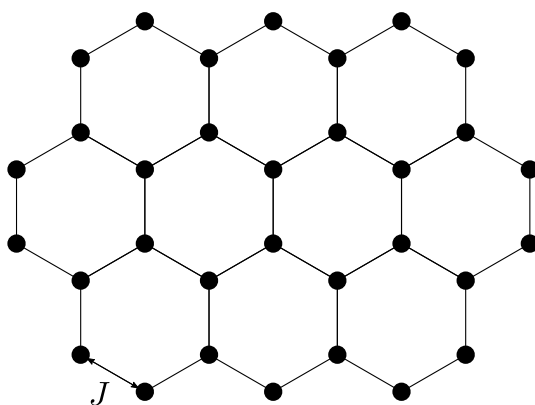
### 2.1 Modelos Magnéticos

Estamos interessados nos modelos que possuem os spins localizados em cada sítio de uma rede. A interação entre os spins é, em geral, dada por  $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ . O Hamiltoniano mais simples, chamado de Hamiltoniano de Heisenberg, representando esses modelos, é dado por

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (2.1)$$

onde a soma em  $i, j$  é feita sobre todos os sítios da rede.  $J_{ij}$  é a intensidade da interação de troca (*exchange*). Essa interação é simétrica, isto é,  $J_{ij} = J_{ji}$ . Se  $J > 0$ , a energia é minimizada quando os spins nos sítios  $i$  e  $j$  tendem a se alinharem com sentidos opostos, nos fornecendo o modelo antiferromagnético (acrônimo AFM de “*antiferromagnet*”) e quando  $J < 0$ , os spins tendem a se alinharem no mesmo sentido, fornecendo o modelo ferromagnético (acrônimo FM de “*ferromagnet*”). A intensidade  $J_{ij}$  depende da distância entre os spins nos sítios  $i$  e  $j$ . No entanto, para o nosso caso, vamos considerar somente  $J_{ij} = J$  se  $i$  e  $j$  forem sítios vizinhos e  $J_{ij} = 0$  caso contrário. O spin pode assumir os valores  $S = 1/2, 1, 3/2, \dots$  etc. As redes de baixa dimensão podem ser unidimensionais como, por exemplo, a cadeia de Heisenberg, bidimensionais como as redes dos tipos quadrada, triangular, hexagonal (também conhecida como “*honeycomb*”), Kagomé, indicadas pelas figuras (1,2 e 3), ou podem ser tridimensionais como, por exemplo, a rede cúbica simples (fig.4).

Figura 1 – Redes quadrada e triangular

Figura 2 – Rede hexagonal (*honeycomb*)

Uma vez conhecido o Hamiltoniano  $H$  do sistema de spins, devemos determinar seus autovalores e autofunções (autokets). Isto não é uma tarefa fácil, principalmente se o número de spins na rede for muito grande. Por exemplo, para um sistema contendo  $n$  partículas com spin  $1/2$  teremos  $2n$  auto-estados. Assim, normalmente, para um determinado problema, determinamos apenas o estado fundamental e os estados excitados de energias mais baixas, de uma maneira aproximada. A solução exata pode ser obtida somente em alguns poucos casos. Para sistemas acima de uma

Figura 3 – Rede Kagomé

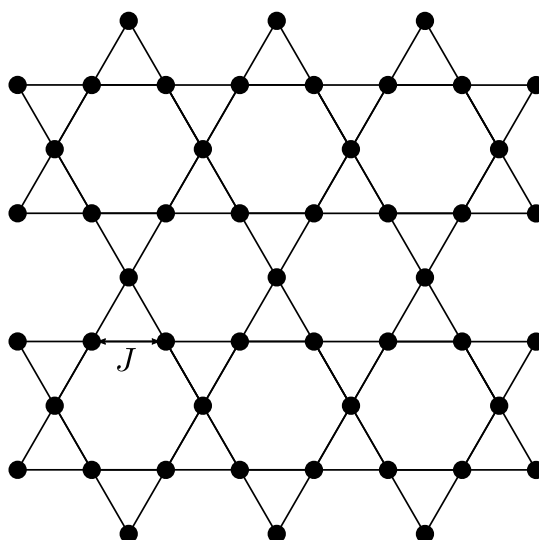
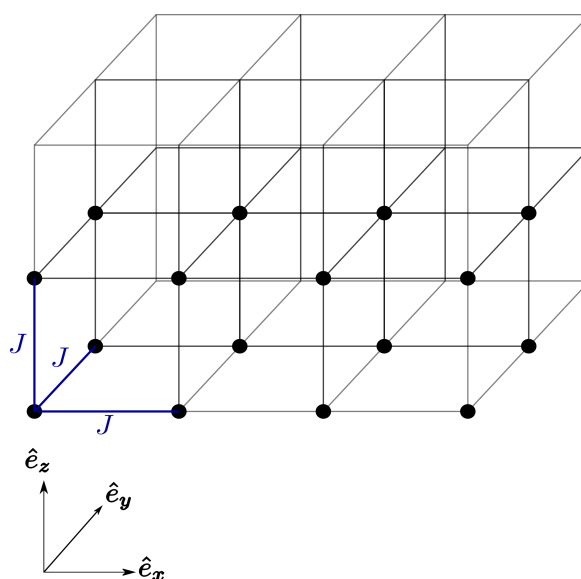


Figura 4 – Rede cúbica simples



dimensão, por exemplo, só temos solução exata para os casos do modelo de Ising em duas dimensões para qualquer temperatura  $T$  e o ferromagneto em temperatura  $T = 0$ . Assim, de posse do espectro de excitação de baixas energias, podemos obter informações sobre a termodinâmica do sistema em baixas temperaturas e também a resposta do sistema a campos externos fracos aplicados. De fato, quando a temperatura é muito próxima de zero ( $T \rightarrow 0$ ), somente os estados de energias mais baixas terão um fator de Boltzmann  $e^{-E/k_B T}$  apreciável, contribuindo assim para a termodinâmica do sistema. O espectro de excitação em sistemas de spins pode ser, essencialmente, de dois tipos: sem “*gap*” ou com “*gap*”. No caso de não haver *gap* no espectro de excitação, existirá, no mínimo, um modo normal (descrito por um momento  $\mathbf{p}$  ou vetor de onda



k) cuja energia de excitação é zero. Para um espectro com *gap*, o primeiro estado excitado (ou a excitação de energia mais baixa) é separado do estado fundamental por uma quantidade de energia  $\Delta$ . A dependência das quantidades termodinâmicas com a temperatura é determinada pela natureza do espectro de excitação (com ou sem *gap*).

A interação de troca  $J$  pode dar origem a uma ordem magnética abaixo de uma temperatura crítica. Entretanto, alguns sistemas de spins não apresentam ordem magnética, mesmo em temperatura zero. Os três tipos de ordenamentos magnéticos mais conhecidos são: a ordem ferromagnética (FM), a antiferromagnética (AFM) e a ferrimagnética (Fi). Nos ferromagnetos, os spins de vizinhos mais próximos (acrônimo NN de “*nearest-neighbors*”) têm a tendência de se alinharem paralelamente, enquanto nos antiferromagnetos, a tendência dos vizinhos mais próximos (NN) é de se alinharem antiparalelamente. No estado fundamental do modelo ferromagnético, de uma rede quadrada, todos os spins tendem a se orientar paralelamente para que a energia do sistema seja mínima. No caso antiferromagnético, a investigação se torna mais complicada. Classicamente, a orientação é antiparalela, isto é,  $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ , chamada de ordem de Néel, que é, comumente, uma boa aproximação para alguns casos quânticos. No caso dos ferrimagnetos, a tendência dos vizinhos mais próximos (NN) também é de se alinharem antiparalelamente, mas, os momentos magnéticos associados a esses vizinhos têm diferentes magnitudes. A magnetização espontânea  $M$  ocorre na ausência de campo externo ( $B = 0$ ) sendo referido como o parâmetro de ordem de um sistema magnético. Seu valor é não nulo na fase ordenada. Em todos os casos, a ordem magnética pode sobreviver apenas até uma temperatura crítica  $T_c$ . O parâmetro de ordem no antiferromagneto é a magnetização espontânea de sub-rede, dada por  $(\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_j) / 2S$ . Uma outra forma de se medir a ordem espontânea é através da função correlação spin-spin  $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle$ . Um sistema tem uma ordem de longo alcance (acrônimo LRO do inglês “*long-range order*”) se

$$\lim_{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \rightarrow \infty} \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle \neq 0, \quad (2.2)$$

onde  $\mathbf{r}$  denota a localização espacial do sítio em que determinado spin se encontra. Em temperatura zero ( $T = 0$ ), o valor esperado (2.2) é o valor do estado fundamental, enquanto que em  $T \neq 0$ , ele é uma média térmica usual. Quando há LRO, dizemos que o sistema quebrou uma simetria espontaneamente e que a magnetização é finita.

Os operadores de spin devem obedecer a relação de comutação usual

$$[S_j^\alpha, S_j^\beta] = i \sum_{\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} S_j^\gamma, \quad \alpha, \beta, \gamma = x, y, z, \quad (2.3)$$

para cada um dos sítios  $j$  da rede, individualmente. Os spins de sítios diferentes, comutam entre si. Para trabalhar o Hamiltoniano (2.1), definimos os operadores “escada” dos spins

$$S_j^\pm \equiv S_j^x \pm iS_j^y, \quad (2.4)$$

que nos permitem escrever (2.1) como

$$H = J \sum_{i,j} \left( \frac{S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+}{2} + S_i^z S_j^z \right). \quad (2.5)$$

Em temperaturas altas, os spins ficam desordenados devido a fortes flutuações térmicas e os valores esperados de cada spin se anulam:  $\langle S_i \rangle = 0$  (o “*bracket*” representa um valor esperado térmico e quântico, simultaneamente). Como a intensidade  $J$  induz uma ordem em baixas temperaturas, existe alguma temperatura crítica  $T_c$  (subíndice minúsculo) para qual acontece a transição de fase termodinâmica (acrônimo TPT do inglês “*thermodynamic phase transition*”, usado para diferenciá-la da QPT, uma transição de segunda ordem) em que os spins se ordenam magneticamente, onde, na média, os spins apontam para uma direção definida,  $\langle S_i \rangle \neq 0$ . A existência de  $T_c$  depende da dimensionalidade e do tipo da rede, além do alcance das interações. Se  $T_c$  existe, abaixo desta temperatura,  $\langle S_i \rangle$  cresce até atingir um valor máximo em  $T = 0$ . A temperatura crítica é chamada de temperatura de Curie  $T_C$  (subíndice maiúsculo) nos ferromagnetos (FM) e de temperatura de Néel  $T_N$  nos antiferromagnetos (AFM).

### 2.1.1 Teorema de Mermin-Wagner

Basicamente, o teorema de Mermin-Wagner afirma que o modelo de Heisenberg quântico  $J \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ , em uma e duas dimensões, não exhibe quebra espontânea de simetria em temperaturas finitas, isto é, não apresenta magnetização espontânea em temperaturas finitas. Algumas provas desse teorema podem ser encontradas na literatura <sup>1</sup>, e não compõe o objetivo deste trabalho. Algumas observações que podemos fazer do teorema são, que ele não faz previsões para  $T = 0$  ou para dimensão  $d = 3$ , é válido para qualquer spin  $S$  arbitrário. Além disso, ele diz respeito somente ao modelo de Heisenberg isotrópico. Neste caso, um modelo com anisotropia, mesmo que seja fraca, não é descrito por esse teorema, o que explica a existência de sistemas ferro e antiferromagnéticos bidimensionais de Heisenberg, como  $\text{K}_2\text{CuF}_4$ ,  $\text{CrBr}_3$ ,  $\text{Rb}_2\text{MnF}_4$ , bem como os supercondutores de alta temperatura crítica (cupratos), por exemplo, que mostram transições de fase. Por fim, ele é restrito somente a não existência da magnetização espontânea. Transições de fases de outras naturezas não são necessariamente excluídos.

Seja  $E_0$  a energia do estado fundamental e  $E_m$  a energia dos estados excitados. É possível provar, no âmbito desse teorema, que, se  $E_m - E_0 > \Delta \quad \forall m \neq 0$  ( $\Delta$  é o *gap*), não existe ordem de longo alcance, mesmo para o caso em que  $T = 0$ . A afirmação inversa não é verdadeira. Podemos ter ausência da ordem de longo alcance com  $\Delta = 0$  ou  $\Delta > 0$ . No modelo de Heisenberg antiferromagnético unidimensional com  $S = 1/2$ , por exemplo, existe um *gap* nulo, mas não há ordem de longo alcance em  $T = 0$ .

<sup>1</sup> Veja, por exemplo, Nolting, W. [17], pg.293 e Auerbach, A. [18], pg.63

Vamos investigar alguns aspectos básicos do estado fundamental nos modelos ferromagnético (FM) e antiferromagnético (AFM).

### 2.1.2 Ferromagneto (FM)

O Hamiltoniano deste modelo é dado pela equação (2.1) ou (2.5) com  $J < 0$ , que nos fornece

$$H = -|J| \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j , \quad (2.6)$$

$$H = -|J| \sum_{i,j} \left( \frac{S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+}{2} + S_i^z S_j^z \right) . \quad (2.7)$$

Para um spin  $S$ , podemos definir uma base  $|S, m\rangle$  em que

$$\mathbf{S}^2 |S, m\rangle = S(S+1) \hbar^2 |S, m\rangle ; \quad S^z |S, m\rangle = m\hbar |S, m\rangle . \quad (2.8)$$

Para a rede com  $N$  spins, uma base pode ser gerada a partir do produto direto

$$|S, m\rangle_1 |S, m\rangle_2 \cdots |S, m\rangle_N ,$$

ou simplesmente  $|m\rangle_1 |m\rangle_2 \cdots |m\rangle_N$ , em que  $|m\rangle_i$  representa o estado da  $i$ -ésima rede com spin  $S$ . Nesta base, o último termo de (2.7) é diagonal, diferente dos outros dois primeiros termos. Definindo ainda o operador de spin total  $\mathbf{S}_T \equiv \sum_i \mathbf{S}_i$ , pode-se verificar as relações de comutação

$$[S_T^z, H] = [S_T^x, H] = [S_T^y, H] = 0 , \quad (2.9)$$

e com isso, podemos procurar por autovetores simultâneos de  $H$ ,  $\mathbf{S}_T^2$  e  $S_T^z$ . Considerando o caso em que todos os spins estão orientados em uma única direção, digamos, na direção  $z > 0$ , tal que o autovalor do sítio  $i$  seja  $m_i = +S$ , o estado do sistema, neste caso, pode ser representado por  $|\psi\rangle = |S\rangle_1 |S\rangle_2 \cdots |S\rangle_N$ . Com isso temos

$$H |\psi\rangle = -J \sum_{i,j} \left[ \left( \frac{S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+}{2} \right) |\psi\rangle + S_i^z S_j^z |\psi\rangle \right] . \quad (2.10)$$

Sabe-se que  $S^+$  aumenta o estado  $m$  de  $-S$  para  $+S$  e assim, atuando no estado  $m = +S$ , o resultado é zero. Para o operador  $S^-$ , vale o inverso. Portanto,  $S_i^+ S_j^- |S\rangle_i |S\rangle_j = 0$  e, da mesma forma,  $S_i^- S_j^+ |S\rangle_i |S\rangle_j = 0$ . Utilizando esses resultados, adotando  $\hbar \rightarrow 1$ , com a equação (2.8) obtemos

$$H |\psi\rangle = -J \sum_{i,j} S_i^z S_j^z |\psi\rangle = -JS^2 |\psi\rangle . \quad (2.11)$$

Vemos, portanto, que  $|\psi\rangle$  é um autoestado de  $H$ . Se nesse sistema, uma rotação no espaço de spin for feita,  $H$  permanece invariante e esta propriedade se estende para qualquer estado com  $S_T$  máximo. Assim, existem  $2S_T + 1$  desses estados.

### 2.1.3 Simetrias

Uma quebra espontânea de simetria ocorre quando o Hamiltoniano tem uma simetria e, conseqüentemente, uma quantidade conservada, mas o estado fundamental do sistema não apresenta a simetria. Para o ferromagneto, por exemplo, quando a temperatura está acima de  $T_C$ , o sistema possui uma simetria de rotação completa, pois todas as direções dos spins são equivalentes e cada um pode apontar em uma determinada direção. Abaixo de  $T_C$ , o sistema “escolhe” uma direção única para os spins apontarem. Assim, o alto nível de simetria rotacional do estado de temperatura alta é quebrada, e somente rotações em torno do eixo que define a direção dos spins deixa o Hamiltoniano invariante. Esse é um exemplo de quebra espontânea de simetria contínua. Quando a simetria quebrada espontaneamente é contínua, existe uma infinidade de estados fundamentais, e é possível produzir excitações, com grandes comprimentos de onda, de baixa energia  $E(\mathbf{k})$  (custo de energia muito baixo) no parâmetro de ordem. Estes casos acontecem quando não há *gap* no espectro de energia, ou seja,  $E(\mathbf{k}) \rightarrow 0$  quando  $\mathbf{k} \rightarrow 0$ . Este resultado é conhecido como o teorema de Goldstone, e as excitações são conhecidas como modos de Goldstone (ou bósons de Goldstone).

### 2.1.4 Antiferromagneto (AFM)

O estado fundamental do AFM é, em geral, mais complicado de ser trabalhado que o caso do FM e poucos resultados exatos são conhecidos a respeito deles no modelo geral de Heisenberg. Um caso onde existe resultado rigoroso é aquele em que consideramos um AFM em uma rede denominada *bipartite*. Nesta rede, todos os spins são divididos em dois subsistemas disjuntos A e B, chamados de subredes, de tal forma que  $J_{ij} = 0$  se  $i, j \in A$ , ou se  $i, j \in B$ . Isto é, só há interações entre spins de subredes distintas. Por exemplo, na rede quadrada, a rede *bipartite* está mostrada na fig.(5)

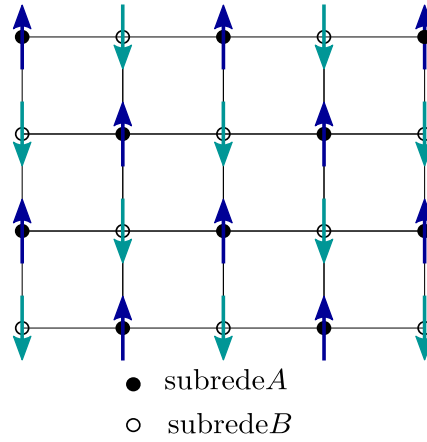
Cada subrede representa um ferromagneto da forma (2.6) com magnetizações de subrede opostas. O Hamiltoniano para o antiferromagneto é dado pela eq.(2.1) com  $J > 0$ . Se os spins fossem vetores clássicos, o produto escalar entre os spins seria mínimo para a configuração mostrada na fig.(5) que resultaria em uma energia mínima para o estado fundamental dada por

$$E_0 = -\frac{1}{4}JN. \quad (2.12)$$

O estado que representaria essa energia é o estado completamente polarizado, mas com spins em sentidos opostos para as duas subredes. Esse estado é chamado de estado de Néel. Neste caso temos

$$|\psi\rangle = \prod_{i \in A} |+\mathcal{S}\rangle_i \prod_{j \in B} |-\mathcal{S}\rangle_j, \quad (2.13)$$

Figura 5 – Rede *bipartite*. Os sítios preenchidos são representados pelos sítios da subrede A, os vazios pelos sítios da subrede B.



em que  $|\pm S\rangle$  são autoestados de  $S^z$  para um dado sítio da rede, com autovalores  $\pm S$ . Em uma dimensão, o estado de Néel teria as configurações  $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ . A ação de  $H$  sobre o estado  $|\psi\rangle$  nos fornece

$$\begin{aligned} H|\psi\rangle &= J \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} \left( \frac{S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+}{2} + S_i^z S_j^z \right) |\psi\rangle \\ &= J \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} \left( \frac{1}{2} S_i^- S_j^+ + S_i^z S_j^z \right) |\psi\rangle . \end{aligned} \quad (2.14)$$

Neste caso o termo  $S_i^- S_j^+ |\psi\rangle$  não se anula e  $|\psi\rangle$  não pode ser o estado fundamental. Note que ele, de fato, não é nem autoestado de  $H$ , pois  $S_i^- S_j^+ | +S\rangle_i | -S\rangle_j \propto | -S\rangle_i | +S\rangle_j$ . Tudo o que podemos dizer é que a eq.(2.12) estabelece um limite superior para a energia do estado fundamental.

## 2.2 Representações de Bósons

Tratar os operadores de spins diretamente é um trabalho bastante complicado. Para lidarmos com isso, lançamos mão de uma representação onde escrevemos os operadores de spins em termos de operadores de bósons ou férmions. Sabemos que os operadores de spins são determinados através de suas relações de comutação. Assim, qualquer representação que satisfaça essas relações de comutação é uma representação válida. Em geral, as representações descrevem um espaço mais amplo do que aquele descrito pelos operadores de spins e com isso, precisamos impor uma condição de vínculo. Como propósito puramente pedagógico, será abordado nessa seção, a representação de Holstein-Primakoff (acrônimo HP) no modelo de Heisenberg do FM e do AFM. Essa representação é chamada comumente de teoria de ondas de spin. Outra representação que será abordada nessa seção é a representação dos

bósons de Schwinger SU(2) [18, 19]. Nesse trabalho, a representação usada para tratar cada um dos problemas, nos capítulos seguintes, será a representação dos bósons de Schwinger SU(3), introduzido por Papanicolaou [20], como uma forma alternativa aos bósons de Schwinger SU(2), para tratar modelos de spin-1 com a possibilidade de formação do estado exótico nemático, na fase magneticamente desordenada [19, 21].

### 2.2.1 Representação de Holstein-Primakoff do ferromagneto

Essa é uma representação usada para tratar fases ordenadas e, portanto, precisamos ter informações sobre o tipo de fase ordenada que estamos estudando. Vamos considerar o caso do ferromagneto em uma rede quadrada cujo Hamiltoniano é dado por (2.6). Sabemos que em  $T = 0$  todos os spins ficam orientados paralelamente. Portanto, podemos descrever a fase ordenada com pequenas flutuações dos spins em torno do estado orientado.

Introduzimos um operador de bóson  $b$  que representa as componentes dos operadores de spin na forma

$$S_i^+ = \sqrt{2S - b_i^\dagger b_i} b_i, \quad S_i^- = b_i^\dagger \sqrt{2S - b_i^\dagger b_i}, \quad S_i^z = S - b_i^\dagger b_i, \quad (2.15)$$

e que satisfaz a relação de comutação  $[b_i, b_i^\dagger] = 1$ . Com isso os operadores de spin, de um mesmo sítio da rede, satisfazem a relação de comutação

$$[S_j^\alpha, S_j^\beta] = i \sum_\gamma \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} S_j^\gamma. \quad (2.16)$$

Se  $b_i^\dagger b_i = n_i$ , denotando o operador número de ocupação do bóson  $b$  no sítio  $i$ , a equação (2.15) nos fornece  $n_i = S - S_i^z$ . Assim, o espaço de Fock do operador  $b_i$ , descrito por  $n_i$ , possui autovalores  $n = 0, 1, 2, \dots, 2S$ , pois os autovalores de  $S_i^z$  são  $m_i = -S, -S + 1, \dots, S$ . Consequentemente, os autoestados  $|n\rangle$  só podem ser os estados

$$|0\rangle, |1\rangle, \dots, |2S\rangle. \quad (2.17)$$

Para realizar os cálculos usamos a expansão

$$\sqrt{2S - n_j} = \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{n_j}{2S}} = \sqrt{2S} \left( 1 - \frac{n_j}{4S} - \frac{n_j^2}{32S^2} \dots \right). \quad (2.18)$$

Inserindo a equação (2.18) no Hamiltoniano (2.7) temos

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_{i,j} \left[ \frac{1}{2} \left( \sqrt{2S - b_i^\dagger b_i} b_i b_j^\dagger \sqrt{2S - b_j^\dagger b_j} + b_i^\dagger \sqrt{2S - b_i^\dagger b_i} \sqrt{2S - b_j^\dagger b_j} b_j \right) \right. \\ &\quad \left. + (S - b_i^\dagger b_i) (S - b_j^\dagger b_j) \right] \\ &= -J \sum_{i,j} \left[ S \left( \sqrt{1 - \frac{n_i}{2S}} b_i b_j^\dagger \sqrt{1 - \frac{n_j}{2S}} + b_i^\dagger \sqrt{1 - \frac{n_i}{2S}} \sqrt{1 - \frac{n_j}{2S}} b_j \right) \right. \\ &\quad \left. + S^2 - S(n_i + n_j) + n_i n_j \right] \end{aligned} \quad (2.19)$$

Vamos supor que a direção clássica de ordem é a direção  $\hat{z}$ . Além disso, vamos considerar a soma sobre os vizinhos NN, alterando a notação para  $\sum_{i,j} \rightarrow \sum_{\langle i,j \rangle}$ . Assim, ainda podemos reescrever  $-J \sum_{\langle i,j \rangle} S^2 = -\frac{J}{2} \sum_{\mathbf{r}_i, \delta} S^2$  onde o vetor  $\mathbf{r}_i$  designa o vetor posição do  $i$ -ésimo sítio da rede,  $\delta$  é o vetor posição de um dos seus primeiros vizinhos e o fator  $1/2$  foi colocado para não contar duas vezes cada par de sítios da rede. Além disso  $-\frac{J}{2} \sum_{\mathbf{r}_i, \delta} S^2 = -S^2 J N \frac{Z}{2}$  onde  $Z$  é o número de vizinhos (ou número de coordenação da rede) e  $N$  é o número de spins. Assim, o Hamiltoniano se torna

$$H = -S^2 J N \frac{Z}{2} - 2J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \frac{1}{2} S \left( \sqrt{1 - \frac{n_i}{2S}} b_i b_j^\dagger \sqrt{1 - \frac{n_j}{2S}} + b_i^\dagger \sqrt{1 - \frac{n_i}{2S}} \sqrt{1 - \frac{n_j}{2S}} b_j \right) - \frac{1}{2} S (n_i + n_j) + \frac{1}{2} n_i n_j \right]. \quad (2.20)$$

Este Hamiltoniano descreve “partículas” chamadas de mágnons (ondas quantizadas de spin), que representam excitações coletivas nos spins da rede, que se comportam como se fossem partículas e, por isso, são denominadas de quasipartículas. Esses mágnons podem interagir fracamente entre si, além de perturbar a ordenação do estado. Usando a expansão desenvolvida obtemos

$$H = -S^2 J N \frac{Z}{2} - 2J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ -\frac{1}{2} S (n_i + n_j) + \frac{1}{2} n_i n_j \right] - JS \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \left( 1 - \frac{n_i}{4S} - \frac{n_i^2}{32S^2} \dots \right) b_i b_j^\dagger \left( 1 - \frac{n_j}{4S} - \frac{n_j^2}{32S^2} \dots \right) + b_i^\dagger \left( 1 - \frac{n_i}{4S} - \frac{n_i^2}{32S^2} \dots \right) \left( 1 - \frac{n_j}{4S} - \frac{n_j^2}{32S^2} \dots \right) b_j \right], \quad (2.21)$$

e mantendo somente os termos até a ordem quadrática temos o Hamiltoniano

$$H = -S^2 J N \frac{Z}{2} - 2J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ -\frac{1}{2} S (n_i + n_j) + \frac{1}{2} n_i n_j \right] - JS \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ b_i b_j^\dagger - b_i b_j^\dagger \left( \frac{n_j}{4S} \right) - \left( \frac{n_i}{4S} \right) b_i b_j^\dagger + b_i^\dagger b_j - b_i^\dagger \left( \frac{n_j}{4S} \right) b_j - b_i^\dagger \left( \frac{n_i}{4S} \right) b_j \right], \quad (2.22)$$

que usando a definição do operador  $n_j = b_j^\dagger b_j$  de volta, temos

$$H = -S^2 J N \frac{Z}{2} - J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ -S (b_i^\dagger b_i + b_j^\dagger b_j) + b_i^\dagger b_i b_j^\dagger b_j \right] - JS \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ b_i b_j^\dagger - b_i b_j^\dagger \left( \frac{b_j^\dagger b_j}{4S} \right) - \left( \frac{b_i^\dagger b_i}{4S} \right) b_i b_j^\dagger + b_i^\dagger b_j - b_i^\dagger \left( \frac{b_j^\dagger b_j}{4S} \right) b_j - b_i^\dagger \left( \frac{b_i^\dagger b_i}{4S} \right) b_j \right], \quad (2.23)$$

ou, agrupando os termos com 2 e 4 operadores obtemos

$$\begin{aligned}
 H = & -S^2 JN \frac{Z}{2} - J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ S \left( b_i b_j^\dagger + b_i^\dagger b_j - n_i - n_j \right) \right] \\
 & + \frac{J}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ b_i b_j^\dagger b_j^\dagger b_j + b_i^\dagger b_i b_i b_j^\dagger - 2b_i^\dagger b_i b_j^\dagger b_j \right. \\
 & \left. + b_i^\dagger b_j^\dagger b_j b_j + b_i^\dagger b_i^\dagger b_i b_j - 2b_i^\dagger b_i b_j^\dagger b_j \right] , \quad (2.24)
 \end{aligned}$$

que pode ainda ser reescrito como

$$\begin{aligned}
 H = & -S^2 JN \frac{Z}{2} - J \sum_{\langle i,j \rangle} S \left( b_i b_j^\dagger + b_i^\dagger b_j - b_i^\dagger b_i - b_j^\dagger b_j \right) \\
 & + \frac{J}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ b_i^\dagger b_j^\dagger (b_i - b_j)^2 + (b_i^\dagger - b_j^\dagger)^2 b_i b_j \right] . \quad (2.25)
 \end{aligned}$$

Os termos de ordem superior à ordem quadrática introduzem interações entre os mágnons. Essa representação dos operadores bósons se torna incorreta para  $n_j > 2S$ . Podemos notar que o autoestado de  $S_j^z$ , na ausência de bósons no sítio  $j$  ( $n_j = 0$ ), corresponde ao estado cujo autovalor é máximo  $S$ . Vamos supor que os estados excitados de mais baixa energia correspondem a pequenas oscilações coletivas dos spins em torno da direção de ordem (digamos, a direção  $z$ ). Assim, essas oscilações (chamadas de ondas de spin) fazem com que  $\langle S_j^z \rangle$  seja menor do que  $S$  e, assim, existe um número de bósons  $\langle n_j \rangle \neq 0$ . Se  $\langle n_j \rangle \ll S$ , a redução em  $\langle S_j^z \rangle$  é pequena (oscilações fracas). Por extensão,  $\langle n_j \rangle \ll 2S$  para oscilações fracas e é razoável realizar uma expansão nesse pequeno parâmetro. Para representar os operadores de mágnons, faremos uma transformação de Fourier

$$b_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} b_{\mathbf{k}} ; \quad b_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} b_{\mathbf{k}}^\dagger , \quad (2.26)$$

em que  $b_{\mathbf{k}}(b_{\mathbf{k}}^\dagger)$  representa os operadores de aniquilação(criação) de um mágnon com vetor de onda  $\mathbf{k}$ . As transformações inversas são

$$b_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}_i} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} b_i ; \quad b_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} b_i^\dagger . \quad (2.27)$$

A relação de comutação para estes operadores são

$$[b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{q}}^\dagger] = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}_i} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}_i} [b_i, b_i^\dagger] = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}_i} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}_i} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}} . \quad (2.28)$$

Os vetores de onda  $\mathbf{k}$ , dos novos operadores, pertencem a zona de Brillouin (sigla BZ de “*Brilluoin Zone*”), na qual eles estão mais próximos da origem. Usando uma condição de contorno periódica para uma quantidade física, em um sítio  $j$ , ao longo do eixo  $x$ , isto é,  $f(x_j) = f(x_j + N_x a)$ , em que  $N_x$  é o número de sítios ao longo do eixo  $x$ , podemos expandir  $f(x_j)$  em uma série de Fourier

$$f(x_j) = \sum_{k_x} A_{k_x} e^{ik_x x_j} , \quad (2.29)$$



e aplicar a condição de contorno periódica para obter a condição  $k_x N_x a = 2\pi n_x \rightarrow k_x = 2\pi n_x / N_x a = 2\pi n_x / N_x$ , em que  $n_x$  é um inteiro positivo, negativo ou nulo. Vamos escolher  $n_x$  de forma que  $k_x$  fique mais próximo da origem. Supondo que  $N_x$  seja par, a escolha para  $n_x$  que nos leva a essa condição é escolher os valores  $-N_x/2, -N_x/2 + 1, \dots, N_x/2 - 1$  e assim, os vetores de onda residem no intervalo  $[-\pi, \pi)$ . De forma análoga, para as outras direções obtemos  $k_y = 2\pi n_y / N_y$  e  $k_z = 2\pi n_z / N_z$ , com as mesmas escolhas de  $n_y$  e  $n_z$ .

Voltando ao desenvolvimento do Hamiltoniano, nos termos com 2 operadores, temos

$$\begin{aligned} \sum_{\langle i,j \rangle} S (b_j^\dagger b_i + b_i^\dagger b_j - b_i^\dagger b_i - b_j^\dagger b_j) &= \frac{1}{2N} S \sum_{\substack{\mathbf{r}_i, \delta, \\ \mathbf{k}, \mathbf{q}}} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}_i} \left( e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta} + e^{i\mathbf{q} \cdot \delta} \right. \\ &\quad \left. - e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \cdot \delta} - 1 \right) b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{q}} \\ &= \frac{1}{2} S \sum_{\delta} \sum_{\mathbf{k}} \left[ (e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta} + e^{i\mathbf{k} \cdot \delta}) b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} - 2b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \right] \\ &= S Z \sum_{\mathbf{k}} (\gamma_{\mathbf{k}} - 1) b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (2.30)$$

em que

$$\sum_{\delta} e^{\pm i\mathbf{k} \cdot \delta} \equiv Z \gamma_{\mathbf{k}}, \quad (2.31)$$

$$\sum_{\delta} = Z; \quad \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}_i} e^{\pm i(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}_i} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}. \quad (2.32)$$

O Hamiltoniano se torna

$$\begin{aligned} H &= -JNS^2 \frac{Z}{2} + \sum_{\mathbf{k}} S J Z (1 - \gamma_{\mathbf{k}}) b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \\ &\quad + \frac{J}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ b_i^\dagger b_j^\dagger (b_i - b_j)^2 + (b_i^\dagger - b_j^\dagger)^2 b_i b_j \right], \end{aligned} \quad (2.33)$$

que pode ser reescrito na forma

$$H \approx E_0 + H_1 + H_2 + \dots, \quad (2.34)$$

onde

$$E_0 = -S^2 J N \frac{Z}{2}, \quad (2.35)$$

$$H_1 = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}, \quad H_2 = \frac{J}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ b_i^\dagger b_j^\dagger (b_i - b_j)^2 + (b_i^\dagger - b_j^\dagger)^2 b_i b_j \right], \quad (2.36)$$

$$\omega_{\mathbf{k}} = S J Z (1 - \gamma_{\mathbf{k}}). \quad (2.37)$$

O Hamiltoniano

$$H_{\text{sw}} = E_0 + H_1 = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}, \quad (2.38)$$

cujo subíndice “sw” significa *spin-wave*, descreve ondas de spin que não interagem entre si e a equação (2.37) representa a relação de dispersão dessas ondas de spins. No limite de comprimento de onda grande, em que  $\lambda \rightarrow \infty$  e  $k \rightarrow 0$ , a relação de dispersão se anula, pois  $\omega_{\mathbf{k}} \sim SJ|k|^2$ . Este é o modo de Goldstone, sem *gap*, mencionado na subseção (2.1.3), do estado fundamental do ferromagneto.

O fator  $\gamma_{\mathbf{k}}$  da equação (2.31) depende da rede, uma vez que  $\delta$  depende da rede. Para as redes unidimensional em cadeia e quadrada, o fator vale, respectivamente,  $\gamma_{\mathbf{k}} = \cos k$  e  $\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}(\cos k_x + \cos k_y)$ . Usando a rede cúbica simples como um exemplo, o cálculo de  $\gamma_{\mathbf{k}}$  segue do fato de que o vetor de vizinhos NN  $\delta$ , a partir de um sítio, estão ao longo dos eixos  $\pm x, \pm y, \pm z$  e tem módulo  $a$ , que será assumido como sendo 1. Assim,  $\sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\cdot\delta} = e^{ik_x} + e^{-ik_x} + e^{ik_y} + e^{-ik_y} + e^{ik_z} + e^{-ik_z} = 2(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)$ . Como o número de vizinhos NN para a rede cúbica simples é  $Z = 6$  obtemos, da equação (2.31)  $\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{3}(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)$ . Dessa forma,  $\sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} = 0$ , pois para cada valor de  $\mathbf{k} \in \text{BZ}$ , haverá outro  $\mathbf{k}' \in \text{BZ}$  tal que  $\cos(\mathbf{k}) = -\cos(\mathbf{k}')$ .

A magnetização  $\mathbf{m} \equiv (1/N) \sum_i \langle \mathbf{S}_i \rangle$  é uma medida natural da intensidade da magnetização do sistema. Se  $m \equiv |\mathbf{m}|$  é positivo (ou zero), o sistema possui (ou não) ordem ferromagnética. A magnetização é o parâmetro de ordem para fase ferromagnética. Por definição, um parâmetro de ordem é uma quantidade não-nula na fase onde essa ordem está presente e é nula para outras fases. A magnetização por sítio pode ser escrita como

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^z \rangle = S - \frac{1}{N} \sum_i \langle n_i \rangle = S - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle \equiv S - \Delta m. \quad (2.39)$$

Para os mágnons livres,  $n_{\mathbf{k}}$  é o número de ocupação de Bose-Einstein

$$n_{\mathbf{k}} = \left( e^{\beta\omega_{\mathbf{k}}} - 1 \right)^{-1}, \quad (2.40)$$

pois são considerados, para aproximação adotada, bósons não interagentes. Aqui,  $\beta \equiv (k_B T)^{-1}$  onde  $T$  é a temperatura e  $k_B$  é a constante de Boltzmann (faremos  $k_B = 1$  daqui em diante). Conseqüentemente

$$\Delta m = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{(e^{\beta\omega_{\mathbf{k}}} - 1)} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(e^{\beta\omega_{\mathbf{k}}} - 1)}. \quad (2.41)$$

Para  $T > 0$ , a integral (2.41) diverge para uma e duas dimensões ( $d = 1, 2$ ). Isso é consistente com o teorema de Mermin e Wagner, que desconsidera uma magnetização espontânea em  $d = 1, 2$  para temperaturas não-nulas. Para  $d = 3$ , é possível mostrar que  $\Delta m \propto T^{3/2}$  quando  $T \rightarrow 0$ .

Considerando, agora, um Hamiltoniano FM de Heisenberg dado por

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left( S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \lambda S_i^z S_j^z \right), \quad (2.42)$$

em que  $\lambda > 1$  é um parâmetro de anisotropia, a simetria de rotação é quebrada, mas não é quebrada espontaneamente. Ainda assim, tem-se  $[S_T^z, H] = 0$ . No estado fundamental, os spins estão alinhados ao longo da direção  $z$ . A relação de dispersão, agora, é dada por

$$\omega_{\mathbf{k}} = SJZ (\lambda - \gamma_{\mathbf{k}}) , \quad (2.43)$$

e existe um *gap* para  $\mathbf{k} \rightarrow 0$  dado por  $\omega_0 = SJZ (\lambda - 1)$ . A nova integral para  $\Delta m$ , neste caso, é convergente para  $d = 2, 3$  e existe um estado ordenado abaixo de uma temperatura crítica em duas dimensões.

## 2.2.2 Representação de Holstein-Primakoff do antiferromagneto

Vamos escolher o estado clássico de Néel. Os spins estão orientados nas direções  $\hat{z}$  e  $-\hat{z}$ , nas subredes  $A$  e  $B$ , respectivamente, conforme representa a fig.(5). Definimos os spins rotacionados na subrede  $B$  como  $\tilde{S}_j$ , com  $j \in B$ , sendo

$$\tilde{S}_j^z = -S_j^z , \quad \tilde{S}_j^x = S_j^x , \quad \tilde{S}_j^y = -S_j^y . \quad (2.44)$$

Então, o Hamiltoniano do sistema é dado por

$$H = J \sum S_i^z \tilde{S}_j^z + \frac{1}{2} J \sum_{i,j} (S_i^+ \tilde{S}_j^- + S_i^- \tilde{S}_j^+) , \quad (2.45)$$

onde  $\tilde{S}_j^+$  e  $\tilde{S}_j^-$  possuem a definição padrão no índice  $j$

$$\tilde{S}_j^\pm = \tilde{S}_j^x \pm i \tilde{S}_j^y = S_j^\mp . \quad (2.46)$$

Usando as representações de Holstein-Primakoff para  $S$  em  $A$  e  $\tilde{S}$  em  $B$ , obtemos

$$H = -J \sum [S^2 - S(n_i + n_j) + n_i n_j] + JS \sum_{i,j} \left( \sqrt{1 - \frac{n_i}{2S}} b_i \sqrt{1 - \frac{n_j}{2S}} b_j + b_i^\dagger \sqrt{1 - \frac{n_i}{2S}} b_j^\dagger \sqrt{1 - \frac{n_j}{2S}} \right) . \quad (2.47)$$

Utilizando a expansão (2.18) e considerando os termos até a ordem quadrática obtemos

$$H = -S^2 JN \frac{Z}{2} + JS \sum_{i,j} (n_i + n_j) + JS \sum_{i,j} (b_i b_j + b_i^\dagger b_j^\dagger) - J \sum_{i,j} n_i n_j - JS \sum_{i,j} \left( b_i \frac{n_j}{4S} b_j + \frac{n_i}{4S} b_i b_j + b_i^\dagger b_j^\dagger \frac{n_j}{4S} + b_i^\dagger \frac{n_i}{4S} b_j^\dagger \right) , \quad (2.48)$$

que, com as transformações de Fourier (considerando apenas termos com produto de 2 operadores) temos

$$\begin{aligned}
 H &= -S^2 J N \frac{Z}{2} \\
 &+ JS \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{r}, \delta} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \left( e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} b_{\mathbf{k}}^\dagger e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} b_{\mathbf{q}} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\delta\cdot\mathbf{r}} b_{\mathbf{k}}^\dagger e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{i\delta\cdot\mathbf{r}} b_{\mathbf{q}} \right) \\
 &+ JS \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{r}, \delta} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \left( e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} b_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{i\delta\cdot\mathbf{r}} b_{\mathbf{q}} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} b_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\delta\cdot\mathbf{r}} b_{\mathbf{q}}^\dagger \right), \quad (2.49)
 \end{aligned}$$

ou

$$H = -S^2 J N \frac{Z}{2} + H_1 + H_2 + \dots, \quad (2.50)$$

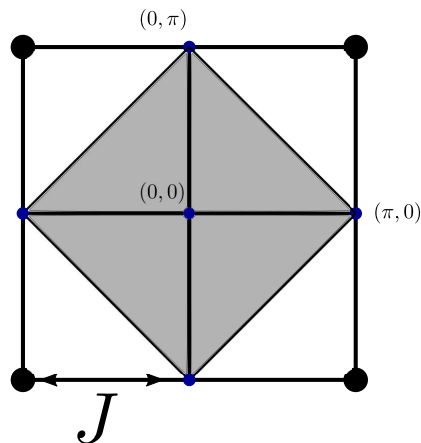
com

$$H_1 = JSZ \sum_{\mathbf{k}} \left[ b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{2} (b_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger) \right], \quad (2.51)$$

$$H_2 = -\frac{J}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ b_i^\dagger (b_j^\dagger + b_j)^2 b_j + b_j^\dagger (b_i^\dagger + b_i)^2 b_i \right]. \quad (2.52)$$

Novamente, os vetores de onda  $\mathbf{k}$ , devem residir na BZ, a região em que os vetores de onda ficam mais próximos da origem. Agora, devido a natureza da rede *bipartite*, a condição de periodicidade se dá a cada  $2a$ , o espaçamento de cada subrede. Nesse caso, para a rede unidimensional, a condição nos dá  $k_x = 2\pi n_x / 2N_x a = \pi n_x / N_x$ . A escolha para  $n_x$  que nos leva a zona de Brillouin são os valores  $-N_x/2, -N_x/2 + 1, \dots, N_x/2 - 1$  e assim  $k_x \in \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$ . Essa é a zona de Brillouin magnética (sigla MBZ do inglês "*Magnetic Brillouin Zone*") para o antiferromagneto unidimensional e é diferente da BZ típica da rede cristalina toda. Para uma rede quadrada, a MBZ dos vetores de onda devem pertencer a região sombreada da fig.(6)

Figura 6 – Zona de Brillouin magnética para a rede quadrada antiferromagnética



Devido aos termos cruzados em  $b$ , o Hamiltoniano precisa ser diagonalizado para ser escrito como o Hamiltoniano de um oscilador harmônico quântico. Como é feito

na literatura padrão, diagonalizamos usando as transformações de Bogoliubov. Além dessas transformações, utilizamos um outro método mais efetivo, desenvolvido por Colpa [22], que vamos denominar de método da matriz paraunitária e será esclarecida na seção (2.2.5). Aqui, as transformações de Bogoliubov são dadas por

$$b_{\mathbf{k}} = (\chi_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}}\alpha_{-\mathbf{k}}^{\dagger}) \quad ; \quad b_{\mathbf{k}}^{\dagger} = (\chi_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} - \rho_{\mathbf{k}}\alpha_{-\mathbf{k}}). \quad (2.53)$$

Note que  $[b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}}^{\dagger}] = 1$  deve ser preservado, e ao exigir as relações de comutação canônica  $[\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}] = 1$ , os coeficientes das transformações devem satisfazer

$$\chi_{\mathbf{k}}^2 - \rho_{\mathbf{k}}^2 = 1. \quad (2.54)$$

Isso nos leva a escolher

$$\chi_{\mathbf{k}} = \cosh(\theta_{\mathbf{k}}); \quad \rho_{\mathbf{k}} = \sinh(\theta_{\mathbf{k}}). \quad (2.55)$$

Assim temos

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{k}}b_{-\mathbf{k}} &= \cosh^2(\theta_{\mathbf{k}})\alpha_{\mathbf{k}}\alpha_{-\mathbf{k}} - \cosh(\theta_{\mathbf{k}})\sinh(\theta_{\mathbf{k}})(\alpha_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} + \alpha_{-\mathbf{k}}^{\dagger}\alpha_{-\mathbf{k}}) + \sinh^2(\theta_{\mathbf{k}})\alpha_{-\mathbf{k}}^{\dagger}\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \\ b_{\mathbf{k}}^{\dagger}b_{-\mathbf{k}}^{\dagger} &= \cosh^2(\theta_{\mathbf{k}})\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} - \cosh(\theta_{\mathbf{k}})\sinh(\theta_{\mathbf{k}})(\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}\alpha_{-\mathbf{k}} + \alpha_{-\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}) + \sinh^2(\theta_{\mathbf{k}})\alpha_{-\mathbf{k}}\alpha_{-\mathbf{k}} \\ b_{\mathbf{k}}^{\dagger}b_{\mathbf{k}} &= \cosh^2(\theta_{\mathbf{k}})\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}\alpha_{\mathbf{k}} - \cosh(\theta_{\mathbf{k}})\sinh(\theta_{\mathbf{k}})(\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}\alpha_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + \alpha_{-\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}}) + \sinh^2(\theta_{\mathbf{k}})\alpha_{-\mathbf{k}}\alpha_{-\mathbf{k}}^{\dagger}, \end{aligned}$$

de forma que podemos escrever  $H_1$  como

$$\begin{aligned} H_1 &= JSZ \sum_{\mathbf{k}} \left\{ [\cosh^2(\theta_{\mathbf{k}}) + \sinh^2(\theta_{\mathbf{k}}) - \gamma_{\mathbf{k}}2 \cosh(\theta_{\mathbf{k}})\sinh(\theta_{\mathbf{k}})] \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}\alpha_{\mathbf{k}} \right. \\ &\quad \left. + \sinh^2(\theta_{\mathbf{k}}) - \gamma_{\mathbf{k}} \cosh(\theta_{\mathbf{k}})\sinh(\theta_{\mathbf{k}}) \right\} \\ &\quad + JSZ \sum_{\mathbf{k}} \left\{ -\cosh(\theta_{\mathbf{k}})\sinh(\theta_{\mathbf{k}}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{2} [\cosh^2(\theta_{\mathbf{k}}) + \sinh^2(\theta_{\mathbf{k}})] \right\} (\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} + \alpha_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}}), \quad (2.56) \end{aligned}$$

que, usando as identidades hiperbólicas

$$2 \cosh(\theta_{\mathbf{k}})\sinh(\theta_{\mathbf{k}}) = \sinh(2\theta_{\mathbf{k}}) \quad (2.57)$$

$$\cosh^2(\theta_{\mathbf{k}}) + \sinh^2(\theta_{\mathbf{k}}) = \cosh(2\theta_{\mathbf{k}}), \quad (2.58)$$

obtemos

$$\begin{aligned} H_1 &= JSZ \sum_{\mathbf{k}} [\cosh(2\theta_{\mathbf{k}}) - \gamma_{\mathbf{k}}\sinh(2\theta_{\mathbf{k}})] \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}\alpha_{\mathbf{k}} \\ &\quad + JSZ \sum_{\mathbf{k}} \left[ \sinh^2(\theta_{\mathbf{k}}) - \frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{2} \sinh(2\theta_{\mathbf{k}}) \right] \\ &\quad + JS \frac{Z}{2} \sum_{\mathbf{k}} [\gamma_{\mathbf{k}}\cosh(2\theta_{\mathbf{k}}) - \sinh(2\theta_{\mathbf{k}})] (\alpha_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}} + \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}), \quad (2.59) \end{aligned}$$

e para que  $H_1$  seja diagonal, devemos ter

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \tanh(2\theta_{\mathbf{k}}), \quad (2.60)$$

ou

$$\begin{aligned} \sinh(2\theta_{\mathbf{k}}) &= \frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{\sqrt{1-\gamma_{\mathbf{k}}^2}} \\ \cosh(2\theta_{\mathbf{k}}) &= \frac{1}{\sqrt{1-\gamma_{\mathbf{k}}^2}}. \end{aligned} \quad (2.61)$$

Com isso, podemos reescrever  $H_1$  na forma diagonal

$$H_1 = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \left( a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) - \frac{JSZ}{2} \sum_{\mathbf{k}}, \quad (2.62)$$

$$\omega_{\mathbf{k}} = JSZ \sqrt{1-\gamma_{\mathbf{k}}^2}, \quad (2.63)$$

e o Hamiltoniano pode ser reescrito como

$$H = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}) + H_2 + \dots \quad (2.64)$$

com a energia do estado fundamental

$$E_0 = -NJS^2 \frac{Z}{2} - JS \frac{Z}{2} \left( N - \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{1-\gamma_{\mathbf{k}}^2} \right). \quad (2.65)$$

A equação (2.63) nos dá a relação de dispersão para o antiferromagneto de Heisenberg. Para pequenos valores do vetor de onda,  $\mathbf{k} \approx 0$ , temos a expansão  $\gamma_{\mathbf{k}} \approx 1 - \frac{k^2}{2d}$ , onde  $d$  é a dimensão. Assim  $\sqrt{1-\gamma_{\mathbf{k}}^2} \approx |\mathbf{k}| \sqrt{\frac{1}{d}}$ . Para redes quadradas e cúbicas, o número de coordenação vale  $Z = 2d$ . Assim  $\omega_{\mathbf{k}} \approx 2JS\sqrt{d} |\mathbf{k}|$ . As excitações do espectro do sistema AFM são lineares em  $|\mathbf{k}|$ , ao contrário da relação quadrática encontrada para o sistema FM. No estado fundamental de  $H$ , não existem mágnons  $\alpha_{\mathbf{k}}$ , pois custam uma energia  $\omega_{\mathbf{k}} > 0$ . Assim, podemos definir um estado fundamental  $|G\rangle$  tal que  $H|G\rangle = E_0|G\rangle$ . O primeiro termo de (2.65) é quadrático em  $S$ , correspondente à energia clássica do estado de Néel (equação (2.12) com spin 1/2 e  $Z = 2$ ) de um AFM clássico de vizinhos mais próximos com spin  $S$ . Os termos restantes são proporcionais a  $S$  e representam a correção quântica para a energia do estado fundamental. Essa correção é negativa pois  $\gamma_{\mathbf{k}} < 1$  e  $\sqrt{1-\gamma_{\mathbf{k}}^2} \leq 1 < N$ . Portanto as flutuações quânticas reduzem a energia do estado fundamental.

Para o AFM, é necessário investigar o seu parâmetro de ordem. A magnetização  $\mathbf{m} \equiv (1/N) \sum_i \langle \mathbf{S}_i \rangle$  não pode ser usada, pois ela é nula na presença da ordem antiferromagnética, devido as duas subredes contribuírem com magnitudes iguais e sinais opostos para  $\mathbf{m}$ . Assim, seu parâmetro de ordem natural é a magnetização de subrede, definida como a média  $\langle \mathbf{S}_i \rangle$  em apenas uma das subredes. Sem perda de

generalidade, escolhamos a subrede A, onde a ordem está na direção  $z$ . A intensidade da magnetização de subrede é dada por

$$m_A = \frac{1}{N_A} \sum_{j \in A} \langle S_j \rangle = S - \frac{1}{N_A} \sum_{j \in A} \langle n_j \rangle = S - \frac{1}{N_A} \sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle = S - \Delta m_A, \quad (2.66)$$

com a correção, ao resultado clássico de  $S$ , dado por

$$\Delta m_A = \frac{1}{N_A} \sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{N_A} \sum_{\mathbf{k}} \langle b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \rangle, \quad (2.67)$$

onde  $N_A = N/2$  é o número de sítios da subrede A. O Hamiltoniano AFM tem a forma de um oscilador harmônico simples quando escrito em termos dos operadores  $\alpha_{\mathbf{k}}$ , definidos em (2.53), o que nos dá

$$\Delta m_A = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \chi_{\mathbf{k}}^2 \langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle + \rho_{\mathbf{k}}^2 \langle \alpha_{-\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger \rangle - \chi_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \langle \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}} + \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle \right]. \quad (2.68)$$

Os valores esperados são calculados como valores esperados quânticos e térmicos, isto é,  $\langle O \rangle \equiv Z^{-1} \sum_n \langle n | O | n \rangle e^{-\beta E_n}$  onde  $Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$  é a função partição. Aqui, a soma em  $n$  é feita sobre os autoestados  $\{|n\rangle\}$  do Hamiltoniano  $H$  com autoenergias  $E_n$ . Primeiro, seja

$$\langle \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}} \rangle = Z^{-1} \sum_n \langle n | \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}} | n \rangle e^{-\beta E_n}, \quad (2.69)$$

e seu complexo conjugado. O termo  $\langle n | \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}} | n \rangle$  no somatório produz um termo do tipo  $\langle n+1 | n-1 \rangle = 0$  assim como seu complexo conjugado. Assim,

$$\begin{aligned} \Delta m_A &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \chi_{\mathbf{k}}^2 \langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle + \rho_{\mathbf{k}}^2 \langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle + \rho_{\mathbf{k}}^2 \right] \\ &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \langle n_{\mathbf{k}} \rangle \cosh 2\theta_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} (\cosh 2\theta_{\mathbf{k}} - 1) \right] \\ &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \left( n_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) \frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}} \right] - 1. \end{aligned} \quad (2.70)$$

A dependência da temperatura está em  $n_{\mathbf{k}}$ . Em uma dimensão, para temperatura zero,  $n_{\mathbf{k}} = 0$  e o termo com a soma em  $\mathbf{k}$  fornece

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}} \propto \lim_{k_0 \rightarrow 0} \int_{k_0}^{\pi/2} \frac{dk}{\sqrt{1 - \cos^2 k}}. \quad (2.71)$$

A contribuição mais importante para essa integral vem de pequenos valores de  $k$  onde podemos aproximar  $\cos k \approx 1 - k^2/2$ . Assim, o termo principal se torna  $\int_{k_0} dk/k = -\log k_0 \rightarrow \infty$  para  $k_0 \rightarrow 0$ . Nesse caso,  $\Delta m_A$  diverge, mesmo para temperatura zero. Assim, concluímos que a suposição de que o sistema estava ordenado, em uma dimensão, mesmo para temperatura zero, é inválida bem como o truncamento na expansão das ondas de spin. Em duas dimensões, para temperatura zero,  $\Delta m_A$  é

não-nulo também, e as flutuações quânticas reduzem a magnetização, mas a correção é pequena o suficiente para dizer que a teoria das ondas de spin indica um estado ordenado na rede quadrada, para temperatura zero. Em três dimensões, a correção  $\Delta m_A$  é ainda menor. Para temperaturas finitas, em uma dimensão, não existe ordem já que ela não existia nem mesmo para  $T = 0$ . Em duas dimensões a ordem não sobrevive e o sistema é desordenado, de forma que a teoria das ondas de spin também se torna inválida. Para três dimensões, existe uma ordem para temperaturas suficientemente baixas.

### 2.2.3 Bósons de Schwinger SU(2) - Ferromagneto

A representação de Holstein-Primakoff (HP) é muito útil quando tratamos de sistemas que apresentam fases ordenadas. Para lidarmos com fases desordenadas precisamos usar outras representações. Qualquer representação onde escrevemos os operadores de spins em termos de operadores de férmions ou bósons, que satisfazem as relações de comutação

$$[S_j^\alpha, S_j^\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_j^\gamma \quad ; \quad (\alpha, \beta, \gamma = x, y, z) , \quad (2.72)$$

com  $S^2 = S(S+1)$ , podem ser usadas. Vamos considerar o caso de spin  $1/2$  e chamar o vácuo (um estado não físico) de  $|0\rangle$ , um estado que não há partículas. Assim, podemos introduzir os operadores de bósons  $a$  e  $b$  definidos por

$$a^\dagger |0\rangle = |\uparrow\rangle , \quad b^\dagger |0\rangle = |\downarrow\rangle , \quad (2.73)$$

onde  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$  são autoestados da componente  $S^\alpha$  ( $\alpha = x, y, z$ ) do spin, cujos autovalores são  $\pm 1/2$ . Eles representam os operadores de spin da seguinte forma

$$S_i^+ = a_i^\dagger b_i , \quad S_i^- = b_i^\dagger a_i , \quad (2.74)$$

$$S_i^z = \frac{1}{2} (a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i) . \quad (2.75)$$

Esta é a representação dos Bósons de Schwinger (sigla SB). Os novos operadores obedecem a relação de comutação padrão para os bósons,  $[a, a^\dagger] = [b, b^\dagger] = 1$ . Com esta representação, as relações de comutação (2.72) para as componentes do operador de spin são satisfeitas. Além disso, o produto  $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_i = S_i S_i$  sobre um sítio é dado por

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_i = S_i^2 = \frac{(S_i^+ S_i^- + S_i^- S_i^+)}{2} + S_i^z S_i^z , \quad (2.76)$$



ou, usando as representações dadas,

$$\begin{aligned}
S_i^2 &= \frac{(a_i^\dagger b_i b_i^\dagger a_i + b_i^\dagger a_i a_i^\dagger b_i)}{2} + \frac{1}{4} (a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i)^2 \\
&= \frac{1}{4} (2a_i^\dagger b_i b_i^\dagger a_i + 2b_i^\dagger a_i a_i^\dagger b_i + a_i^\dagger a_i a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i b_i^\dagger b_i - 2a_i^\dagger a_i b_i^\dagger b_i) \\
&= \frac{1}{4} (2a_i^\dagger (1 + b_i^\dagger b_i) a_i + 2b_i^\dagger (1 + a_i^\dagger a_i) b_i + a_i^\dagger a_i a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i b_i^\dagger b_i - 2a_i^\dagger a_i b_i^\dagger b_i) \\
&= \frac{a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i}{2} \left( \frac{a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i}{2} + 1 \right). \tag{2.77}
\end{aligned}$$

Mas  $S_i^2 |S, m\rangle_i = S(S+1) |S, m\rangle_i$  e, assim, devemos ter

$$a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i = 2S, \tag{2.78}$$

estabelecendo um vínculo local entre os operadores  $a$  e  $b$  restringindo o espaço de Fock desses bósons, tornando o modelo mais difícil de ser tratado. O modelo FM de Heisenberg, de vizinhos NN, dado por

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right], \tag{2.79}$$

pode ser escrito na forma

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \frac{1}{2} (a_i^\dagger b_i b_j^\dagger a_j + b_i^\dagger a_i a_j^\dagger b_j) + \frac{1}{4} (a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i) (a_j^\dagger a_j - b_j^\dagger b_j) \right]. \tag{2.80}$$

Utilizando o vínculo (2.78) nos dois últimos termos para o sítio  $j$ , temos

$$\begin{aligned}
H &= -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} [a_i^\dagger b_i b_j^\dagger a_j + b_i^\dagger a_i a_j^\dagger b_j + a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j + b_i^\dagger b_i b_j^\dagger b_j - S(a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i)] \\
&= -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} [a_i^\dagger b_i b_j^\dagger a_j + b_i^\dagger a_i a_j^\dagger b_j + a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j + b_i^\dagger b_i b_j^\dagger b_j - 2S^2]. \tag{2.81}
\end{aligned}$$

Vamos definir, para o ferromagneto, o operador

$$F_{ij} \equiv \frac{1}{2} (a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j), \tag{2.82}$$

em que, seu complexo conjugado é dado por

$$F_{ij}^\dagger = \frac{1}{2} (a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j)^\dagger = \frac{1}{2} (a_j^\dagger a_i + b_j^\dagger b_i) = \frac{1}{2} (a_i a_j^\dagger + b_i b_j^\dagger). \tag{2.83}$$

Com essa definição, podemos escrever a relação

$$\begin{aligned}
2F_{ij}^\dagger F_{ij} - S(S+1) &= \frac{1}{2} (a_i a_j^\dagger + b_i b_j^\dagger) (a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j) - S(S+1) \\
&= \frac{1}{2} (a_i a_j^\dagger a_i^\dagger a_j + a_i a_j^\dagger b_i^\dagger b_j + b_i b_j^\dagger a_i^\dagger a_j + b_i b_j^\dagger b_i^\dagger b_j) - S(S+1) \\
&= \frac{1}{2} (b_i^\dagger a_i a_j^\dagger b_j + a_i^\dagger b_i b_j^\dagger a_j + a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j + b_i^\dagger b_i b_j^\dagger b_j - 2S^2), \tag{2.84}
\end{aligned}$$

tal que o Hamiltoniano pode ser reescrito, de forma mais compacta, como

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ 2F_{ij}^\dagger F_{ij} - S(S+1) \right]. \quad (2.85)$$

Em cada sítio, a condição dada pela eq.(2.78) deve ser respeitada. A fim de cumprir esse requisito, vamos incluir, via multiplicador de Lagrange, o parâmetro  $\lambda$  no Hamiltoniano

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ 2F_{ij}^\dagger F_{ij} - S(S+1) \right] + \sum_i \lambda_i \left( a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i - 2S \right). \quad (2.86)$$

Poderíamos, por exemplo, imaginar que cada sítio estivesse em um dos autoestados (2.73), isto é, ele seria ocupado por um bóson criado por  $a^\dagger$  ou  $b^\dagger$ , representado pela condição (2.78), com  $2S = 1$ . Para desenvolvermos esse Hamiltoniano, vamos desacoplar os termos que envolvem o produto de quatro operadores através do método da aproximação de campo médio, em que tomamos  $\lambda_i$  independente do sítio e usamos o desacoplador

$$F_{ij}^\dagger F_{ij} \rightarrow F_{ij}^\dagger \langle F_{ij} \rangle + \langle F_{ij}^\dagger \rangle F_{ij} - \left| \langle F_{ij}^\dagger \rangle \right|^2 = F_{ij}^\dagger F + F F_{ij} - F^2, \quad (2.87)$$

obtendo

$$H_{MF} = -2JF \sum_{\langle i,j \rangle} \left( F_{ij}^\dagger + F_{ij} \right) + \sum_i \lambda_i \left( a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i - 2S \right) + JNZ \left[ 2F^2 + S(S+1) \right], \quad (2.88)$$

em que o subíndice “MF” é o acrônimo para *mean-field*. Os termos que não possuem operadores de bósons compoem a energia fundamental do sistema. Fazendo  $J = 1$  e uma transformação de Fourier (2.26)

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_{\mathbf{k}}, \quad b_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} b_{\mathbf{k}}, \quad (2.89)$$

nos termos com operadores, obtemos

$$H_{MF} = \sum_{\mathbf{k}} (\lambda - ZJF\gamma_{\mathbf{k}}) \left( a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \right) + JNZ \left[ 2F^2 + S(S+1) \right] - 2\lambda NS, \quad (2.90)$$

ou

$$H_{MF} = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \left( a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \right) + JNZ \left[ 2F^2 + S(S+1) \right] - 2\lambda NS, \quad (2.91)$$

onde  $\omega_{\mathbf{k}} = (\lambda - ZJF\gamma_{\mathbf{k}})$ ,  $N$  é o número de sítios da rede e  $Z$  o número de vizinhos NN. A energia livre de campo médio para sistemas bosônicos é dada por

$$F_{MF} = \beta^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \ln \left( 1 - e^{-\omega_{\mathbf{k}}\beta} \right) + E_g, \quad (2.92)$$

onde  $E_g = JNZ [2F^2 + S(S+1)] - 2\lambda NS$  é a energia do estado fundamental. Podemos obter os pontos de sela minimizando a energia  $F_{MF}$  com relação a  $\lambda$  e  $F$ , isto é

$$\frac{\partial F_{MF}}{\partial \lambda} = 0 ; \quad \frac{\partial F_{MF}}{\partial F} = 0 , \quad (2.93)$$

$$\frac{\partial \omega_{\mathbf{k}}}{\partial \lambda} = 1 ; \quad \frac{\partial \omega_{\mathbf{k}}}{\partial F} = -ZJ\gamma_{\mathbf{k}} , \quad (2.94)$$

que nos dá

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} = S ; \quad \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} = F , \quad (2.95)$$

com

$$n_{\mathbf{k}} = \frac{1}{e^{\omega_{\mathbf{k}}\beta} - 1} , \quad (2.96)$$

chamada de função de Bose. No limite contínuo temos

$$\frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\text{BZ}} n_{\mathbf{k}} d\mathbf{k} = S ; \quad \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\text{BZ}} n_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} d\mathbf{k} = F . \quad (2.97)$$

Estas são as equações autoconsistentes que determinam, de forma unívoca, os parâmetros de campo médio  $F(T, S)$  e  $\lambda(T, S)$ . Das equações (2.95), podemos obter

$$F = S - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} (1 - \gamma_{\mathbf{k}}) . \quad (2.98)$$

No limite termodinâmico, tomamos  $N \rightarrow \infty$ . Enquanto  $T \rightarrow 0$ , a função de Bose (2.96) nos leva a  $n_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$  para todo  $\mathbf{k} \neq 0$ . Para que o primeiro vínculo da equação (2.95) seja respeitado, devemos ter uma ocupação macroscópica em  $\mathbf{k} = 0$ , ou seja,

$$S = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \approx \frac{1}{N} n_0 . \quad (2.99)$$

Em outras palavras, existe uma condensação de Bose em  $T = 0$  para  $\mathbf{k} = 0$ .

## 2.2.4 Bóson de Schwinger SU(2) - Antiferromagneto

No modelo AFM de Heisenberg, consideramos a rede *bipartite* com subredes A e B e interações entre vizinhos NN. A ligação  $\langle ij \rangle$  é definida de forma que  $i \in A$  e  $j \in B$ . Vamos definir o operador de ligação AFM

$$A_{ij} \equiv \frac{1}{2} (a_i b_j - b_i a_j) . \quad (2.100)$$

Esse operador é antissimétrico sob a troca de índices  $i \rightarrow j$ , isto é,  $A_{ji} = -A_{ij}$ . Realizando uma rotação de  $\pi$  em torno do eixo perpendicular a rede, apenas na subrede B, nos permite trocar os operadores

$$a_j \rightarrow -b_j ; \quad b_j \rightarrow a_j . \quad (2.101)$$

Essa transformação preserva o vínculo (2.75). Com isso, o operador de ligação  $A_{ij}$  se torna simétrico, isto é

$$A_{ij} \rightarrow A_{ij} = \frac{1}{2} (a_i a_j + b_i b_j) . \quad (2.102)$$

O modelo de AFM de Heisenberg é escrito como

$$\begin{aligned} H &= J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right] \\ &= J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \frac{1}{2} (-a_i^\dagger b_j b_j a_j^\dagger - a_i b_i^\dagger b_j^\dagger a_j) - \frac{(a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i)}{2} \frac{(a_j^\dagger a_j - b_j^\dagger b_j)}{2} \right] \\ &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \frac{1}{2} (a_i^\dagger a_j^\dagger b_i b_j + b_i^\dagger b_j^\dagger a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger a_i a_j + b_i^\dagger b_j^\dagger b_i b_j - 2S^2) \right] \\ &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} (2A_{ij}^\dagger A_{ij} - S^2) . \end{aligned} \quad (2.103)$$

Realizando uma aproximação de campo médio para desacoplar o produto  $A_{ij}^\dagger A_{ij}$ , de forma análoga ao que foi feito na eq.(2.87), isto é

$$A_{ij}^\dagger A_{ij} \rightarrow A_{ij}^\dagger \langle A_{ij} \rangle + \langle A_{ij}^\dagger \rangle A_{ij} - \left| \langle A_{ij}^\dagger \rangle \right|^2 = A_{ij}^\dagger A + A A_{ij} - A^2 , \quad (2.104)$$

e inserindo o vínculo (2.78), juntamente com a definição (2.100) obtemos

$$\begin{aligned} H_{\text{MF}} &= -JA \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j^\dagger + b_i^\dagger b_j^\dagger + a_i a_j + b_i b_j) + \lambda \sum_i (a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i) \\ &\quad + JNZ A^2 + \frac{1}{2} JNZ S^2 - 2NS\lambda . \end{aligned} \quad (2.105)$$

Realizando uma transformação de Fourier, obtemos

$$\begin{aligned} H_{\text{MF}} &= -JA \frac{Z}{2} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger + b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}) + \lambda \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}) \\ &\quad + JNZ A^2 + \frac{1}{2} JNZ S^2 - 2NS\lambda . \end{aligned} \quad (2.106)$$

Diagonalizamos  $H_{\text{MF}}$  usando as transformações de Bogoliubov, dadas por

$$a_{\mathbf{k}} = \cosh \theta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} + \sinh \theta_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger; \quad b_{\mathbf{k}} = \cosh \theta_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}} + \sinh \theta_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger , \quad (2.107)$$

que nos permite escrever

$$\begin{aligned} H_{\text{MF}} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\lambda \cosh 2\theta_{\mathbf{k}} - ZJA \gamma_{\mathbf{k}} \sinh 2\theta_{\mathbf{k}}) (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger + \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^\dagger) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\lambda \sinh 2\theta_{\mathbf{k}} - ZJA \gamma_{\mathbf{k}} \cosh 2\theta_{\mathbf{k}}) (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger + \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger + \beta_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}}) \\ &\quad + \lambda \sum_{\mathbf{k}} (2 \sinh^2 \theta_{\mathbf{k}} - \cosh 2\theta_{\mathbf{k}}) \\ &\quad + JNZ A^2 + \frac{1}{2} JNZ S^2 - 2NS\lambda . \end{aligned} \quad (2.108)$$

A condição para que os termos anômalos se anulem é

$$\tanh 2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{ZJA\gamma_{\mathbf{k}}}{\lambda}, \quad (2.109)$$

e o Hamiltoniano assume a forma

$$\begin{aligned} H_{\text{MF}} &= \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \beta_{\mathbf{k}}) \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \\ &\quad + JNZ A^2 + \frac{1}{2} JNZ S^2 - 2N \left( S + \frac{1}{2} \right) \lambda, \end{aligned} \quad (2.110)$$

onde  $\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{\lambda^2 - (ZJA\gamma_{\mathbf{k}})^2}$ . A energia livre de campo médio é dada por

$$F_{\text{MF}} = 2\beta^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \ln (1 - e^{-\omega_{\mathbf{k}}\beta}) + \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} + NZJA^2 - 2N \left( S + \frac{1}{2} \right) \lambda + \frac{1}{2} JNZ S^2, \quad (2.111)$$

e como  $\ln (1 - e^{-\omega_{\mathbf{k}}\beta}) = \ln [e^{-\omega_{\mathbf{k}}\beta/2} (e^{+\omega_{\mathbf{k}}\beta/2} - e^{-\omega_{\mathbf{k}}\beta/2})] = -\frac{\beta\omega_{\mathbf{k}}}{2} + \ln [2 \sinh (\frac{\beta\omega_{\mathbf{k}}}{2})]$  obtemos

$$F_{\text{MF}} = \beta^{-1} \sum_{\mathbf{k}} 2 \ln \left[ 2 \sinh \left( \frac{\beta\omega_{\mathbf{k}}}{2} \right) \right] + \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} + NZJA^2 - 2N \left( S + \frac{1}{2} \right) \lambda + \frac{1}{2} JNZ S^2. \quad (2.112)$$

Minimizando essa energia com relação aos parâmetros  $A$  e  $\lambda$ , obtemos as equações de autoconsistência

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{Z^2 JA \gamma_{\mathbf{k}}^2}{\omega_{\mathbf{k}}} \left( n_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) = ZA, \quad (2.113)$$

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\lambda}{\omega_{\mathbf{k}}} \left( n_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) = S + \frac{1}{2}. \quad (2.114)$$

Assim como no caso FM, determinamos, de forma unívoca, os parâmetros de campo médio  $A(T, S)$  e  $\lambda(T, S)$ .

## 2.2.5 Diagonalização por Matriz Paraunitária

O trabalho original do procedimento de diagonalização é feito por Colpa [22] intitulado de diagonalização de Hamiltoniano de bósons quadráticos. Como propósito de ilustrar a essência da técnica, similar ao procedimento adotado na ref. [23], consideramos um Hamiltoniano bosônico quadrático geral da forma

$$H = \frac{1}{2} \sum \Psi^{\dagger} \mathbf{M} \Psi; \quad \Psi^{\dagger} = (b_1^{\dagger}, \dots, b_N^{\dagger}, b_1, \dots, b_N). \quad (2.115)$$

De forma genérica, o índice  $n = 1, \dots, N$  em  $b_n$  e  $b_n^{\dagger}$  indica algum grau de liberdade como momento, spin, etc. Para encontrar os automodos correspondentes à  $\mathbf{M}$ , introduzimos novos operadores de criação (aniquilação)  $\gamma_m^{\dagger}$  ( $\gamma_m$ ) tal que

$$\Psi = \mathbf{T} \Gamma; \quad \Gamma^{\dagger} = (\gamma_1^{\dagger}, \dots, \gamma_N^{\dagger}, \gamma_1, \dots, \gamma_N), \quad (2.116)$$

em que  $\mathbf{T}$  é a matriz de transformação. As relações de comutação padrão dos bósons devem ser satisfeitas para os novos operadores e podemos representar isso, resumidamente, na equação matricial

$$[\Psi_i, \Psi_j^\dagger] = [\Gamma_i, \Gamma_j^\dagger] = (\rho_3)_{ij}; \quad \rho_3 \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{N \times N} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_{N \times N} \end{pmatrix}.$$

Como

$$\begin{aligned} [\Gamma_i, \Gamma_j^\dagger] &= \left[ (\mathbf{T}^\dagger \Psi)_i, (\Psi^\dagger \mathbf{T})_j \right] = \left[ \sum_k T_{ik}^\dagger \Psi_k, \sum_l \Psi_l^\dagger T_{jl} \right] \\ &= \sum_{k,l} \left\{ T_{ik}^\dagger \Psi_k \Psi_l^\dagger (T_{jl}) - \Psi_l^\dagger (T_{jl}) T_{ik}^\dagger \Psi_k \right\}, \end{aligned} \quad (2.117)$$

e para que  $[\Gamma_i, \Gamma_j^\dagger] = (\rho_3)_{ij}$  a matriz de transformação deve satisfazer  $\mathbf{T} \rho_3 \mathbf{T}^\dagger = \rho_3$ . Em outras palavras,  $\mathbf{T}$  é paraunitária. A escolha da matriz é feita de tal forma que o Hamiltoniano se transforme em

$$H = \frac{1}{2} \Gamma^\dagger \mathbf{T}^\dagger \mathbf{M} \mathbf{T} \Gamma; \quad (2.118)$$

$$\mathbf{T}^\dagger \mathbf{M} \mathbf{T} = \begin{pmatrix} \omega_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \omega_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \omega_{2N} \end{pmatrix}, \quad (2.119)$$

para  $\omega_i \in \mathbb{R}$ . Os elementos da matriz de transformação  $\mathbf{T}$  podem ser obtidos dos autovetores da matriz dinâmica  $\mathbf{K} = \rho_3 \mathbf{M}$ , que define a equação de movimento de Heisenberg para  $\Psi$ . Todos os autovalores da matriz dinâmica (quando for diagonalizável) são reais e aparecem em pares. Então, a matriz  $\mathbf{T}$  é formada pelos autovetores da matriz  $\mathbf{K}$ :

$$\mathbf{T} = [V(\omega_1), \dots, V(\omega_N), V(-\omega_1), \dots, V(-\omega_N)], \quad (2.120)$$

com os autovetores  $V$  ordenados como

$$V^\dagger(\omega_i) \rho_3 V(\omega_i) = 1, \quad V^\dagger(-\omega_i) \rho_3 V(-\omega_i) = -1, \quad (2.121)$$

para cada conjunto  $\{V(\omega_i), V(-\omega_i)\}$ . Além disso, temos as relações

$$\mathbf{T}^\dagger \mathbf{M} \mathbf{T} = \mathbf{E} = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_N, \omega_1, \dots, \omega_N) \quad (2.122)$$

$$\mathbf{T}^{-1} \mathbf{K} \mathbf{T} = \bar{\mathbf{E}} = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_N, -\omega_1, \dots, -\omega_N), \quad (2.123)$$

e ambas matrizes  $\mathbf{M}$  e  $\mathbf{K}$  são diagonalizadas simultaneamente.

## 2.3 Modelos de Heisenberg modificados

Os modelos mais simples de Heisenberg, considerados até agora, envolvendo apenas termos com interação de troca são de natureza isotrópica, isto é, ela não é capaz de definir uma orientação privilegiada para os momentos magnéticos, em relação a um eixo cristalino. No entanto, em um ferromagneto real, por exemplo, esse não é o caso porque o estado ordenado possui uma distribuição de spins orientados em alguma direção. Nesse sentido, é necessário considerar uma interação que provoque o efeito de anisotropia magnética do material. Em decorrência das interações de dipolos magnéticos (quadrupolos, etc), a orientação dos momentos magnéticos dos íons, em relação ao eixo cristalino, se torna dependente da energia, de forma que uma orientação seja mais favorecida, energeticamente, que outra. Essas interações, que provocam anisotropia do modelo, são capazes de definir eixos fáceis de magnetização. Basicamente, essa anisotropia tem origem na influência do potencial elétrico da rede cristalina sobre o acoplamento spin-órbita, cujo tratamento, utilizando teoria de perturbação em segunda ordem para energia spin-órbita, gera termos adicionais no Hamiltoniano de Heisenberg do tipo

$$H_{\text{an}} = D \sum_i (S_i^z)^2 + E \sum_i [(S_i^x)^2 - (S_i^y)^2] , \quad (2.124)$$

onde  $D$  e  $E$  são parâmetros que indicam a intensidade da interação de anisotropia e o subscrito “an” é um acrônimo para *anisotropy*. Para sistemas com spin  $1/2$ , por exemplo, temos  $(S_i^\alpha)^2 = 1/4$  (com  $\hbar \equiv 1$ ) para  $\alpha = x, y, z$  e, sendo uma constante, não contribui relevantemente no cálculo das propriedades magnéticas do sistema. Portanto,  $H_{\text{an}}$  é relevante para sistemas com spin  $S > 1/2$ . O primeiro termo de (2.124) é chamado de anisotropia de íon único. No caso de  $E = 0$  e  $D > 0$ , para um sistema de spin 1, ele favorece o alinhamento dos spins no plano  $xy$  minimizando a energia, pois o alinhamento ao longo do eixo  $z$  custaria uma energia extra ao sistema. Assim, para  $D > 0$ , chamamos essa anisotropia de plano fácil. Se  $E = 0$  e  $D < 0$  ele favorece o alinhamento ao longo do eixo  $z$ , reduzindo a energia do sistema e chamamos a anisotropia de eixo fácil. Uma variação no parâmetro de anisotropia pode forçar uma transição de fase, mesmo em temperaturas baixas como  $T = 0$ . Essa transição, denominada de transição de fase quântica (QPT), em geral, acontece de um estado ordenado magneticamente (ferromagnético, antiferromagnético, etc) a um estado desordenado (paramagnético). Considerando o modelo AFM de spin 1, bidimensional, com anisotropia de íon único temos

$$H = J \sum_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + D \sum_i (S_i^z)^2 . \quad (2.125)$$

Novamente, aqui  $D$  pode ser positivo ou negativo. Em nosso caso, trabalhamos com  $D$  positivo, de forma que os spins ficam no plano  $xy$  e a anisotropia é de plano fácil. O sistema fica magneticamente desordenado para qualquer temperatura acima de zero,

mas magneticamente ordenado em  $T = 0$ . Por outro lado, se  $D$  é negativo, os spins tendem a se alinhar ao longo do eixo  $z$  (eixo fácil) e o sistema é do tipo Ising. O modelo tem ordem magnética abaixo de uma temperatura de transição  $T_C$ .

Voltando ao nosso caso, o segundo termo de anisotropia de íon único na eq.(2.125) quebra uma simetria de rotação. Sem ele, isto é,  $D = 0$ , o estado desordenado é simétrico e as componentes  $x$ ,  $y$  e  $z$  do spin são equivalentes, tal que  $\langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = \langle (S^z)^2 \rangle = S(S+1)/3$  que, para spin 1, esse valor é  $2/3$ . Porém, se  $D > 0$ , os spins tendem a se alinharem no plano  $xy$  e o termo de anisotropia de íon único faz com que a componente  $z$  não seja equivalente às componentes  $x$  e  $y$ . Ainda temos, no estado desordenado,  $\langle S^x \rangle = \langle S^y \rangle = \langle S^z \rangle = 0$ . Por outro lado,

$$\langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle \neq \langle (S^z)^2 \rangle . \quad (2.126)$$

Considerando o AFM, para  $T = 0$  e  $D = 0$  o sistema encontra-se, então, na fase de Néel. Aumentando o valor de  $D$ , as flutuações quânticas levam o sistema a ficar desordenado, o que ocorre para um valor de  $D$  que chamamos de  $D$  crítico ou  $D_c$ . A eq.(2.126) continua válida. Então, o estado fundamental é diferente daquele observado no modelo isotrópico.

Assim, a quantidade  $Q = \left( (S^z)^2 - \frac{2}{3} \right)$  pode ser usada como um parâmetro de ordem chamada de nemática. Ela difere do estado magneticamente desordenado padrão do modelo isotrópico (estado paramagnético padrão), em que  $Q = 0$ . Na fase nemática, o sistema está magneticamente desordenado, mas existe esse parâmetro de ordem  $Q$  não nulo. Consequentemente, toda fase nemática é aquele estado que está magneticamente desordenado, mas ainda quebra a simetria de rotação do spin, em virtude do novo parâmetro de ordem  $Q$ . O nome nemático é uma alusão ao termo de cristais líquidos, em que, a fase nemática é uma fase intermediária entre a fase de cristal e líquida, onde, na fase nemática, as moléculas não possuem um parâmetro de ordem de posição, mas elas se alinham automaticamente para obterem uma ordem de longo alcance em relação a direção, em que o eixo maior das moléculas tendem a ficarem aproximadamente paralelas.

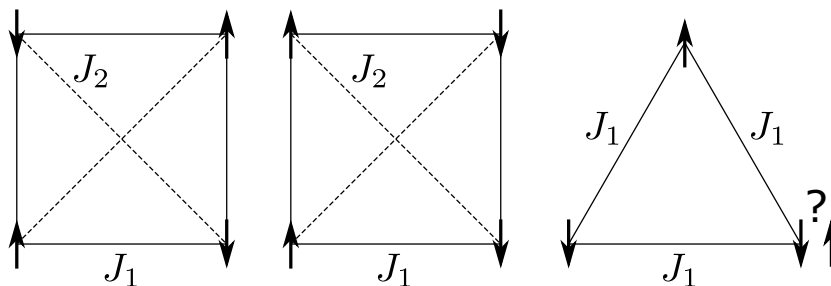
### 2.3.1 Frustração magnética

O termo frustração é utilizado em vários contextos diferentes. Em termos gerais, sistemas frustrados clássicos possuem Hamiltonianos com interações competitivas que dão contribuições à energia que não podem ser minimizadas simultaneamente. Como uma forma de desestabilizar a ordem de Néel, a frustração tem sido estudada extensivamente nos modelos com interações de vizinhos mais próximos (NN) e segundos vizinhos mais próximos (abreviação NNN para *next-nearest-neighbors*), notavelmente, os modelos  $J_1 - J_2$  em rede quadrada ilustrado na fig.(7). O estado fundamental clássico



do sistema depende da razão  $\eta \equiv J_2/J_1$ . Para  $J_1 > 2J_2 > 0$ , por exemplo, os spins vizinhos são alinhados antiparalelamente, impondo um alinhamento FM nos segundos vizinhos e frustrando a interação  $J_2$ . Por outro lado,  $2J_2 > J_1 > 0$ , os segundos vizinhos se alinham antiferromagneticamente ao custo de frustrar metade das interações  $J_1$ . Existe um foco de interesse no ponto  $J_1 = 2J_2$  onde esses estados clássicos alternativos são degenerados e os efeitos da frustração são maiores. Esses modelos são atrativos do ponto de vista do desenvolvimento teórico, pois sua realização experimental é difícil. Nessa perspectiva, existe uma outra forma de sistemas magnéticos frustrados, gerada pela geometria da rede, que são amplamente apreciadas, onde a estrutura de Néel pode ser desestabilizada pela rede, somente com interações NN. Para uma ilustração a nível elementar, considere os spins de Heisenberg distribuídos ao longo de dois vértices de uma rede triangular com interação AFM. O alinhamento do spin do terceiro vértice fica frustrado devido aos dois primeiros vértices, como mostrada na fig.(7).

Figura 7 – *Esquerda-Centro*: Modelo  $J_1 - J_2$ , com configurações de spins no estado fundamental para:  $2J_1 > J_2$  (*esquerda*); e  $2J_1 < J_2$  (*centro*). *Direita*: Estado fundamental da rede triangular com degenerescência devido à configuração do terceiro spin.



Além dos interesses puramente teóricos dos modelos  $J_1 - J_2$ , eles são conhecidos por descreverem interações AFM em uma variedade de sistemas quasi-unidimensional [24] e quasi-bidimensional [25,26] (Lacroix, 380 [19]). No modelo  $J_1 - J_2$  bidimensional, os diagramas de fase são temas de bastante debate. Para  $\eta \ll 0,5$  uma ordem Néel AFM com vetor de onda  $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$  é esperado. No limite oposto,  $\eta \gg 0,5$ , o estado fundamental é uma fase antiferromagnética colinear (acrônimo CAF do inglês “*Collinear antiferromagnet*”) em que os spins se alinham ferromagneticamente em uma direção e antiferromagneticamente em outra, caracterizados pelo vetor de onda  $\mathbf{k} = (\pi, 0)$  ou  $\mathbf{k} = (0, \pi)$ . A natureza do estado fundamental no regime de forte frustração, isto é, para  $\eta \sim 0,5$ , permanece um problema aberto, e não há um consenso geral em sua caracterização.

### 3 Modelo de Heisenberg anisotrópico de plano fácil e interação pseudodipolar

O primeiro modelo a ser considerado no trabalho, é motivado pelo modelo proposto por Jain et al. [27], ao considerar o composto quasi bidimensional  $\text{Ca}_2\text{RuO}_4$ , com spin  $S = 1$ . Eles propuseram o seguinte Hamiltoniano

$$H_p = J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + R S_i^z S_j^z) + D \sum_i (S_i^z)^2 + B \sum_i (S_i^x)^2 \pm A \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^y + S_i^y S_j^x), \quad (3.1)$$

onde  $D$  e  $B$  são termos de anisotropia de íon-único induzidos por distorções tetragonais e ortohômicas, respectivamente, e  $A$  é o termo de interação pseudodipolar (a interação pseudodipolar é do tipo de super-troca (*superexchange*), simétrica e anisotrópica, enquanto a antissimétrica é denominada de interação Dzyaloshinskii-Moriya). O parâmetro de anisotropia  $D$  pode gerar uma QPT para um determinado valor de  $D = D_c$ , no qual para  $D > D_c$  o sistema se encontra no estado magneticamente desordenado,  $D < D_c$  o sistema é ordenado magneticamente. A escolha do sinal de  $A$  depende da direção de ligação nos sítios. Para nossos propósitos, vamos introduzir uma interação  $J_2$  entre vizinhos NNN e trabalhar o modelo (3.1) no regime frustrado, com competição  $J_1 - J_2$ , no estado magneticamente desordenado, tomando  $B = 0$ . Assim, consideramos o modelo

$$H = H_p + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (3.2)$$

na rede quadrada, onde  $\langle\langle i,j \rangle\rangle$  significa vizinhos NNN, ao longo das diagonais. Vamos desenvolver os cálculos desse Hamiltoniano usando a representação SB em  $\text{SU}(3)$ . Nessa representação, inserimos três operadores de bósons para construir autoestados do operador  $S^z$  na forma

$$|-1\rangle = d^\dagger |v\rangle, \quad |0\rangle = t_z^\dagger |v\rangle, \quad |1\rangle = u^\dagger |v\rangle, \quad (3.3)$$

onde  $|v\rangle$  é o estado de vácuo. Os operadores de spin são representados por esses operadores através das transformações

$$S^+ = \sqrt{2} (t_z^\dagger d + u^\dagger t_z), \quad S^- = \sqrt{2} (t_z^\dagger u + d^\dagger t_z), \quad S^z = u^\dagger u - d^\dagger d. \quad (3.4)$$

Analogamente ao que foi discutido na seção (2.2.3), sobre o formalismo de bósons de Schwinger  $\text{SU}(2)$  do FM, em termos desses operadores, podemos imaginar que cada sítio está em um dos estados (3.3), isto é, que cada sítio esteja ocupado por um dos

bósons criados por  $u^\dagger$ ,  $d^\dagger$  ou  $t^\dagger$ . Isso estabelece um vínculo entre os operadores na forma

$$u^\dagger u + d^\dagger d + t^\dagger t = 1. \quad (3.5)$$

Como trabalhamos com essa representação na região desordenada  $D > D_c$ , o estado fundamental é formado por produtos de estados  $S_i^z = 0$  em todos os sítios, o que significa que a maior parte dos sítios estão no estado  $|0\rangle = t_z^\dagger |v\rangle$ . Neste caso, podemos fazer a aproximação da condensação dos bósons  $t$  que consiste em desprezar a dinâmica dos operadores  $t$  e substituir seu valor por um valor médio  $\langle t_z^\dagger \rangle = \langle t_z \rangle = t$ . Mudando os índices de um sítio para seu vetor posição

$$u_i = u_{\mathbf{r}_i}, \quad u_j = u_{\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{r}_i} \text{ ou } u_{\mathbf{r}_i + \mathbf{d} \mathbf{r}_i}, \quad \delta \mathbf{r}_i \text{ para NN e } \mathbf{d} \mathbf{r}_i \text{ para NNN}, \quad (3.6)$$

$$\sum_{\langle i, j \rangle} \rightarrow \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}_i, \delta \mathbf{r}_i}, \quad (3.7)$$

em que o fator 1/2 evita a repetição de sítios repetidos. Usando a eq.(3.5), podemos reescrever  $(S_i^z)^2$ , definido na eq.(3.4), como

$$(S_i^z)^2 = u^\dagger u + d^\dagger d, \quad (3.8)$$

uma vez que o vínculo de ocupação única por sítio estabelece que os operadores de número dos bósons  $u_i^\dagger u_i$ ,  $d_i^\dagger d_i$  e  $t_{zi}^\dagger t_{zi}$  valem 0 ou 1 em cada sítio. Isso implica  $u_i^\dagger u_i d_i^\dagger d_i = 0$ ,  $u_i^\dagger u_i u_i^\dagger u_i = u_i^\dagger u_i (1 - t^2 - d_i^\dagger d_i) = u_i^\dagger u_i$  e  $d_i^\dagger d_i d_i^\dagger d_i = d_i^\dagger d_i$ . Assim, temos, nessas representações, o Hamiltoniano (3.2) escrito como

$$\begin{aligned} H = & \frac{J_1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \delta \mathbf{r}} \left[ t^2 \left( u_{\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}}^\dagger u_{\mathbf{r}} + d_{\mathbf{r}}^\dagger d_{\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}} + u_{\mathbf{r}} d_{\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}} + d_{\mathbf{r}}^\dagger u_{\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}} + \text{h.c.} \right) \right. \\ & \left. + R \left( u_{\mathbf{r}}^\dagger u_{\mathbf{r}} - d_{\mathbf{r}}^\dagger d_{\mathbf{r}} \right) \left( u_{\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}}^\dagger u_{\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}} - d_{\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}}^\dagger d_{\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}} \right) \right] \\ & + \frac{J_2}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{d} \mathbf{r}} \left[ t^2 \left( u_{\mathbf{r} + \mathbf{d} \mathbf{r}}^\dagger u_{\mathbf{r}} + d_{\mathbf{r}}^\dagger d_{\mathbf{r} + \mathbf{d} \mathbf{r}} + u_{\mathbf{r}} d_{\mathbf{r} + \mathbf{d} \mathbf{r}} + d_{\mathbf{r}}^\dagger u_{\mathbf{r} + \mathbf{d} \mathbf{r}} + \text{h.c.} \right) \right. \\ & \left. + \left( u_{\mathbf{r}}^\dagger u_{\mathbf{r}} - d_{\mathbf{r}}^\dagger d_{\mathbf{r}} \right) \left( u_{\mathbf{r} + \mathbf{d} \mathbf{r}}^\dagger u_{\mathbf{r} + \mathbf{d} \mathbf{r}} - d_{\mathbf{r} + \mathbf{d} \mathbf{r}}^\dagger d_{\mathbf{r} + \mathbf{d} \mathbf{r}} \right) \right] \\ & - \frac{i A t^2}{2} \sum_{\mathbf{r}, \delta \mathbf{r}} \left( d_{\mathbf{r}} d_{\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}} + d_{\mathbf{r}} u_{\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}}^\dagger + u_{\mathbf{r}}^\dagger d_{\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}} + u_{\mathbf{r}}^\dagger u_{\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}}^\dagger \right. \\ & \left. - d_{\mathbf{r}}^\dagger d_{\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}}^\dagger - d_{\mathbf{r}}^\dagger u_{\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}} - u_{\mathbf{r}} d_{\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}}^\dagger - u_{\mathbf{r}} u_{\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}} \right) \\ & + D \sum_{\mathbf{r}} \left( u_{\mathbf{r}}^\dagger u_{\mathbf{r}} + d_{\mathbf{r}}^\dagger d_{\mathbf{r}} \right) - \sum_{\mathbf{r}} \mu_{\mathbf{r}} \left( u_{\mathbf{r}}^\dagger u_{\mathbf{r}} + d_{\mathbf{r}}^\dagger d_{\mathbf{r}} + t^2 - 1 \right), \quad (3.9) \end{aligned}$$

em que a sigla “h.c.” se refere aos termos complexos conjugados dos termos que precedem a sigla, dentro do mesmo parênteses. Aqui foi introduzido um potencial químico  $\mu_{\mathbf{r}}$  (que faz o papel do multiplicador de Lagrange) para impor o vínculo (3.5) de condição de ocupação única de estado em cada sítio. Como o Hamiltoniano é invariante por translação, faremos  $\mu_{\mathbf{r}} = \mu$ . Este Hamiltoniano contém termos que são produtos de quatro operadores. Usando um método de aproximação de campo médio (Eq. 2.87),

desacomplamos os 4 operadores escrevendo-os como produto de dois operadores da forma (Ver ref. [28])

$$\begin{aligned} (u^\dagger u - d^\dagger d)_{\mathbf{r}_i} (u^\dagger u - d^\dagger d)_{\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{r}_i} &= \frac{1}{2} (1 - t^2) (u_{\mathbf{r}_i}^\dagger u_{\mathbf{r}_i} + u_{\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{r}_i}^\dagger u_{\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{r}_i}) \\ &+ \frac{1}{2} (1 - t^2) (d_{\mathbf{r}_i}^\dagger d_{\mathbf{r}_i} + d_{\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{r}_i}^\dagger d_{\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{r}_i}) \\ &- p (u_{\mathbf{r}_i} d_{\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{r}_i} + d_{\mathbf{r}_i} u_{\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{r}_i} + h.c.) - \frac{1}{2} (1 - t^2)^2 + 2p^2, \end{aligned}$$

onde  $p = \langle d_{\mathbf{r}_i}^\dagger u_{\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{r}_i}^\dagger \rangle = \langle d_{\mathbf{r}_i} u_{\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{r}_i} \rangle$ . Para a interação  $J_2$  ao longo de NNN, obtemos uma relação similar, no desacoplamento do produto de quatro operadores, com  $\tilde{p} = \langle d_{\mathbf{r}_i}^\dagger u_{\mathbf{r}_i + \mathbf{d}\mathbf{r}_i}^\dagger \rangle = \langle d_{\mathbf{r}_i} u_{\mathbf{r}_i + \mathbf{d}\mathbf{r}_i} \rangle$ . Usando uma transformada de Fourier nos operadores  $u$  e  $d$  da forma

$$u_{\mathbf{r}_i} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} u_{\mathbf{k}}, \quad d_{\mathbf{r}_i} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} d_{\mathbf{k}} \quad (3.10)$$

temos

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\lambda + b_{\mathbf{k}}) (u_{\mathbf{k}}^\dagger u_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^\dagger + u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^\dagger + d_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (b_{\mathbf{k}} - c_{\mathbf{k}}) (u_{\mathbf{k}}^\dagger d_{-\mathbf{k}}^\dagger + d_{\mathbf{k}} u_{-\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} d_{-\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}}^\dagger u_{-\mathbf{k}}^\dagger) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* (u_{\mathbf{k}} u_{-\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}}^\dagger d_{-\mathbf{k}}^\dagger + d_{\mathbf{k}}^\dagger u_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^\dagger) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^\dagger + d_{\mathbf{k}} d_{-\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}}^\dagger u_{-\mathbf{k}}^\dagger) \\ &+ C, \end{aligned} \quad (3.11)$$

onde

$$\gamma_{\mathbf{k}}^{(1)} = \frac{1}{2} (\cos k_x + \cos k_y), \quad \gamma_{\mathbf{k}}^{(2)} = \cos k_x \cos k_y, \quad \tilde{\gamma}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} (\cos k_x + \varepsilon \cos k_y), \quad (3.12)$$

$$\lambda = -\mu + D + 2(J_1 R + J_2) (1 - t^2), \quad (3.13)$$

$$a_{\mathbf{k}} = (B + 4iA\tilde{\gamma}_{\mathbf{k}}) t^2, \quad b_{\mathbf{k}} = (4J_1 \gamma_{\mathbf{k}} + B) t^2, \quad c_{\mathbf{k}} = 4J_1 \tilde{\gamma}_{\mathbf{k}} \quad (3.14)$$

$$\gamma_{\mathbf{k}} = (\gamma_{\mathbf{k}}^{(1)} + \eta \gamma_{\mathbf{k}}^{(2)}), \quad \tilde{\gamma}_{\mathbf{k}} = (R p \gamma_{\mathbf{k}}^{(1)} + \eta \tilde{p} \gamma_{\mathbf{k}}^{(2)}), \quad \eta \equiv \frac{J_2}{J_1} \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} C &= -N\lambda - N(J_1 R + J_2) (1 - t^2)^2 + 4N (J_1 R p^2 + J_2 \tilde{p}^2) \\ &- N(D - \mu) - \mu N (t^2 - 1). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Em  $\tilde{\gamma}_{\mathbf{k}}$ ,  $\varepsilon = 1$  para qualquer  $A > 0$ , em todas as direções de ligação e  $\varepsilon = -1$  para  $A < 0$  na direção  $\hat{y}$ . O Hamiltoniano (3.11) é o mais geral para o problema, usando essa representação de bósons. No nosso caso, estamos tratando de uma rede quadrada bidimensional, então o número de vizinhos NN e NNN de um sítio, coincidem-se e valem  $Z = 4$ . Para redes em duas e três dimensões, com temperatura  $T = 0$ , podemos encontrar, através de um cálculo numérico, os valores  $p = \tilde{p} \approx 0$  [28]. Analisando esse

Hamiltoniano, percebemos a existência de produtos de operadores que não são do tipo  $u_{\mathbf{k}}^\dagger u_{\mathbf{k}}$  e  $d_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}}$  como aconteceu com o AFM isotrópico, na abordagem de ondas de spin. Assim, diagonalizamo-lo para que ele contenha apenas os termos diretos  $u_{\mathbf{k}}^\dagger u_{\mathbf{k}}$  e  $d_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}}$ , deixando-o análogo ao Hamiltoniano do oscilador harmônico quântico. Utilizando o método da matriz paraunitária, discutido na seção 2.2.5, a matriz  $\mathbf{M}$  é dada por

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \lambda + b_{\mathbf{k}} & b_{\mathbf{k}} - c_{\mathbf{k}} & a_{\mathbf{k}} & a_{\mathbf{k}} \\ b_{\mathbf{k}} - c_{\mathbf{k}} & \lambda + b_{\mathbf{k}} & a_{\mathbf{k}} & a_{\mathbf{k}} \\ a_{\mathbf{k}}^* & a_{\mathbf{k}}^* & \lambda + b_{\mathbf{k}} & b_{\mathbf{k}} - c_{\mathbf{k}} \\ a_{\mathbf{k}}^* & a_{\mathbf{k}}^* & b_{\mathbf{k}} - c_{\mathbf{k}} & \lambda + b_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

e assim

$$\det(\rho\mathbf{M} - \omega\mathbf{I}) = \det \begin{pmatrix} \lambda + b_{\mathbf{k}} - \omega & -b_{\mathbf{k}} & -a_{\mathbf{k}} & a_{\mathbf{k}} \\ b_{\mathbf{k}} & -\lambda - b_{\mathbf{k}} - \omega & -a_{\mathbf{k}} & a_{\mathbf{k}} \\ a_{\mathbf{k}}^* & -a_{\mathbf{k}}^* & -\lambda - b_{\mathbf{k}} - \omega & b_{\mathbf{k}} \\ a_{\mathbf{k}}^* & -a_{\mathbf{k}}^* & -b_{\mathbf{k}} & \lambda + b_{\mathbf{k}} - \omega \end{pmatrix} = 0, \quad (3.18)$$

ou

$$0 = \omega^4 - 2[(\lambda + b_{\mathbf{k}})^2 - b_{\mathbf{k}}^2] \omega^2 + b_{\mathbf{k}}^4 - 4|a_{\mathbf{k}}|^2 b_{\mathbf{k}}^2 + (\lambda + b_{\mathbf{k}})^4 - 2(\lambda + b_{\mathbf{k}})^2 b_{\mathbf{k}}^2 - 4|a_{\mathbf{k}}|^2 (\lambda + b_{\mathbf{k}})^2 + 8(\lambda + b_{\mathbf{k}})|a_{\mathbf{k}}|^2 b_{\mathbf{k}}, \quad (3.19)$$

cujas raízes (utilizando os valores de  $a_{\mathbf{k}}$  e  $b_{\mathbf{k}}$  da eq.(3.15)) são

$$\omega_{\mathbf{k}}^{(1)} = \lambda \sqrt{1 + y h_{\mathbf{k}}^+}; \quad \omega_{\mathbf{k}}^{(2)} = \lambda \sqrt{1 + y h_{\mathbf{k}}^-}, \quad (3.20)$$

$$h_{\mathbf{k}}^\pm = f_{\mathbf{k}} \pm g_{\mathbf{k}}, \quad (3.21)$$

$$y \equiv \frac{2t^2}{\lambda}; \quad f_{\mathbf{k}} \equiv 4J_1\gamma_{\mathbf{k}}; \quad g_{\mathbf{k}} \equiv 4A\tilde{\gamma}_{\mathbf{k}}. \quad (3.22)$$

Assim, o Hamiltoniano diagonalizado é dado por

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \left( \omega_{\mathbf{k}}^{(1)} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}}^{(2)} \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}} \right) + E_g, \quad (3.23)$$

em que

$$E_g = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left( \omega_{\mathbf{k}}^{(1)} + \omega_{\mathbf{k}}^{(2)} \right) + C, \quad (3.24)$$

$$C = -N\lambda - N(J_1 R + J_2) (1 - t^2)^2 - \mu N (t^2 - 1). \quad (3.25)$$

Definindo as quantidades

$$\Lambda_{(1,2)\mathbf{k}} = \lambda + t^2 h_{\mathbf{k}}^\pm, \quad (3.26)$$

$$\Delta_{(1,2)\mathbf{k}} = t^2 h_{\mathbf{k}}^\pm, \quad (3.27)$$

com sinal superior(inferior) para o índice 1(2), podemos escrever as relações de dispersão como

$$\omega_{\mathbf{k}}^{(i)} = \sqrt{\Lambda_{i\mathbf{k}}^2 - \Delta_{i\mathbf{k}}^2}; \quad i = 1, 2. \quad (3.28)$$

Como foi descrito nas seções 2.2.3 e 2.2.4, as quantidades  $\mu$  e  $t^2$  podem ser calculadas pelas equações de ponto de sela, minimizando a energia  $E_g$  em relação a  $\mu$  e  $t^2$ . Assim, obtemos (para temperatura  $T = 0$ ) as equações autoconsistentes simplificadas, dadas por

$$\mu = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \lambda \left( \frac{h_{\mathbf{k}}^+}{\omega_{\mathbf{k}}^{(1)}} + \frac{h_{\mathbf{k}}^-}{\omega_{\mathbf{k}}^{(2)}} \right), \quad (3.29)$$

$$2 - t^2 = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{\lambda + t^2 h_{\mathbf{k}}^+}{\omega_{\mathbf{k}}^{(1)}} + \frac{\lambda + t^2 h_{\mathbf{k}}^-}{\omega_{\mathbf{k}}^{(2)}} \right), \quad (3.30)$$

que nos fornecem os valores de  $\mu$  e  $t^2$  pela técnica dos multiplicadores de Lagrange, e consequentemente, obtemos as relações de dispersão  $\omega_{\mathbf{k}}^{(i)}$  em função de  $\mathbf{k}$ .

Quando calculamos a relação de dispersão, encontramos um ponto da BZ onde ela se anula. Caso contrário, existe um gap na energia e ele surge no valor mais baixo de  $\omega_{\mathbf{k}}$ . Na fase ordenada, por exemplo,  $\omega_{\mathbf{k}}$  se anula em  $\mathbf{k} = (0, 0)$  para o AFM, cujo gap é nulo. Nesse trabalho, estamos estudando a fase desordenada de um AFM. Assim, a dispersão não se anula em nenhum ponto para  $D$  maior que  $D_c$ , mas o mínimo ocorre em  $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ . Ao diminuir o valor de  $D$  notamos, quando  $D = D_c$ , que  $\omega_{\mathbf{k}}$  se anula em  $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ . Variamos o parâmetro  $y$  para alterar o valor de  $D$ . Quando  $\omega_{\mathbf{k}}$  se anula em  $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ , chamamos  $y$  de  $y_c$  crítico. Assim,  $y_c$  é determinado quando  $\omega_{\mathbf{k}} = 0$  na eq.(3.28), isto é

$$0 = 1 + y_c h_{\mathbf{k}}^+; \quad 0 = 1 + y_c h_{\mathbf{k}}^- . \quad (3.31)$$

Considerando, para ilustração,  $J_2 = 0$  e  $A > 0$  em todas as direções, onde  $\varepsilon = 1$  na expressão de  $\tilde{\gamma}_{\mathbf{k}}$  da eq.3.12, em  $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ , o  $y_c$  é dado por

$$y_c = \frac{1}{4(J_1 + A)}. \quad (3.32)$$

Nesse caso, o maior denominador fornece o menor  $y$  e, consequentemente, a menor excitação, dada por  $\omega_{\mathbf{k}}^{(1)}$ . Portanto,  $y_c$  é calculado a partir de  $h_{\mathbf{k}}^+$  em detrimento de  $h_{\mathbf{k}}^-$ . Quando consideramos  $J_2 \neq 0$  e  $A$  geral, temos

$$y_c = \frac{1}{4J_1(1 - \eta) + 2A(1 + \varepsilon)}. \quad (3.33)$$

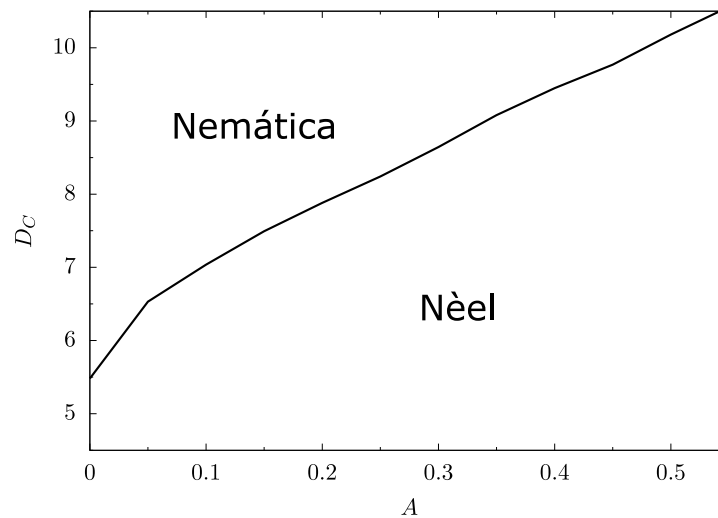
## 3.1 Resultados

Para investigar a transição de fase quântica (QPT), precisamos calcular o valor de  $D_c$ , parâmetro que indica a QPT entre o estado de Néel e o paramagnético. A

partir dos valores de  $\mu$  e  $t^2$  e das equações (3.13) e (3.22), podemos calcular  $D$ . Jain et al. [27], usando teoria de ondas de spin modificada, encontraram um  $\tilde{D}_c = 8J_1$ . Ao calcular os valores de  $\mu$  e  $t^2$  pela técnica de multiplicadores de Lagrange, nas relações de autoconsistência, obtemos  $D_c = 5,47J_1$ . De acordo com Zhang et al. [29], essa técnica utilizada, fornece resultados melhores que a teoria de ondas de spin modificadas, quando comparados aos cálculos da técnica de Monte Carlo Quântico.

Primeiro, consideramos o modelo de Jain, dado por (3.1), sem a interação  $J_2$  de NNN. Consideramos  $A > 0$  em todas as ligações e deixamos  $J_1 = 1$  e  $R = 1$ . Na fig.(8) mostramos  $D_c$  em função de  $A$ , em que  $D_c$  aumenta com o aumento de  $A$ . No caso em que  $A < 0$  na direção de  $\hat{y}$ , o valor de  $D_c$  não é afetado devido ao termo  $\tilde{\gamma}_{\mathbf{k}}$  em  $g_{\mathbf{k}}$ , pois  $g_{\mathbf{k}} = 0$  em  $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ . O gráfico pode ser interpretado como um diagrama de fase, em que a região abaixo da linha sólida representa a fase de Nèel, e a região acima representa a fase nemática.

Figura 8 – Parâmetro de anisotropia crítico  $D_c$  em função de  $A$  e  $R = 1$ . Abaixo da linha sólida, o sistema está na fase de Nèel, acima ele está na fase nemática.



Na fig.(9), mostramos ambos os ramos  $\omega_{\mathbf{k}}^{(1)}$  e  $\omega_{\mathbf{k}}^{(2)}$  das dispersões das ondas de spin, gerados na BZ magnética ( $\Gamma = \mathbf{k} = (0, 0)$ ,  $M = \mathbf{k} = (\pi, 0)$ , e  $X = \mathbf{k} = (\pi, \pi)$ ) para  $D = 9,0$  e  $A = 0,2$ . O gráfico mostra um desvio qualitativo do AFM isotrópico. As excitações mínimas acontecem para  $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$  em nosso caso e  $\mathbf{k} = (0, 0)$  para o AFM isotrópico. Além disso, o gráfico mostra que o efeito de  $A$  é mais pronunciado em torno dos pontos  $\Gamma$  e  $X$ , devido a sua influência nos termos  $h_{\mathbf{k}}^+$  e  $h_{\mathbf{k}}^-$ .

Construímos também o gráfico dos ramos da dispersão na fig.(10) para os valores de  $D = 18,0$  e  $A = 0,8$ . Quando  $A = 1$ , o ramo da dispersão  $\omega_{\mathbf{k}}^{(2)}$  se torna constante.

Na fig.(11) mostramos a relação de dispersão  $\omega_{\mathbf{k}}$  para  $D = 10$ ,  $A = |0, 3|$ , com  $A < 0$  na direção de  $\hat{y}$ , para comparar com a figura 2 da referência [27]. Embora ele é

Figura 9 – A relação de dispersão  $\omega_{\mathbf{k}}$  na BZ, para  $D = 9.0$ ,  $A = 0.2$ . Aqui  $\Gamma = \mathbf{k} = (0, 0)$ ,  $M = \mathbf{k} = (\pi, 0)$ , e  $X = \mathbf{k} = (\pi, \pi)$ .

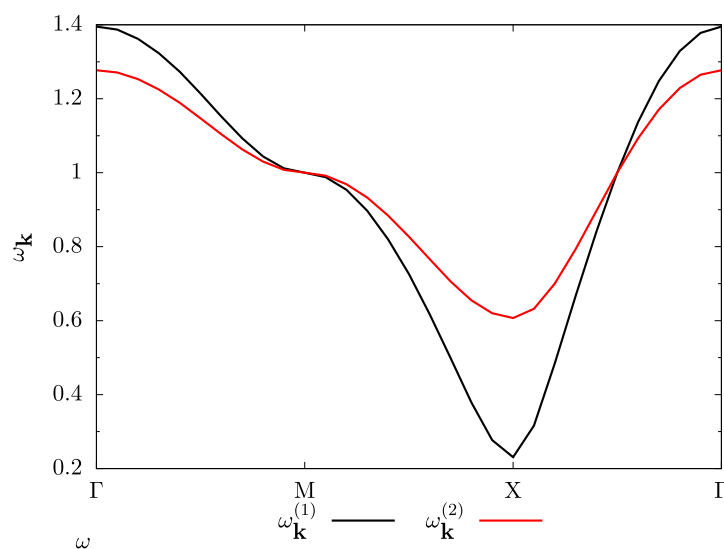
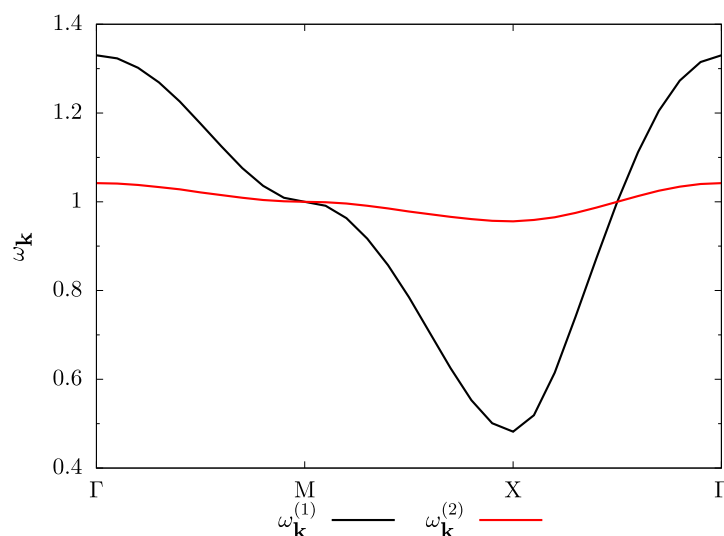


Figura 10 – A relação de dispersão  $\omega_{\mathbf{k}}$  na BZ, para  $D = 18.0$ ,  $A = 0.8$ . Aqui  $\Gamma = \mathbf{k} = (0, 0)$ ,  $M = \mathbf{k} = (\pi, 0)$ , e  $X = \mathbf{k} = (\pi, \pi)$ .

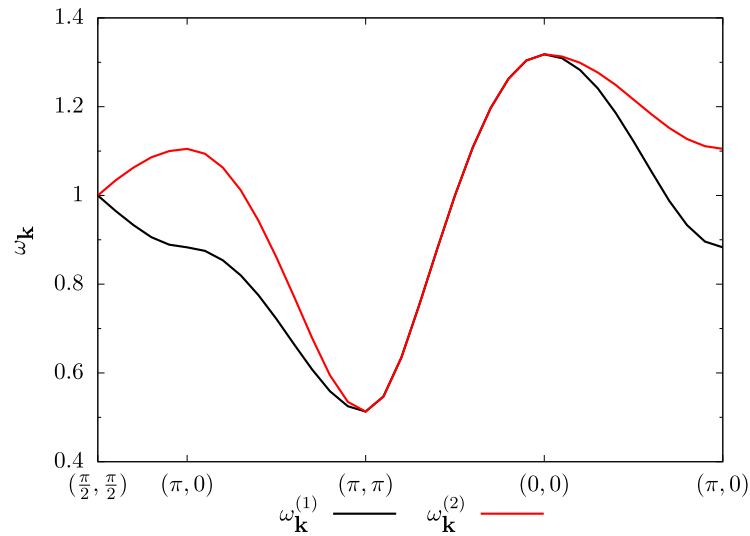


feito para fase de Nèel (com um conjunto diferente de parâmetros), podemos observar que o comportamento da dispersão nesse esquema da BZ é qualitativamente similar. Os efeitos do termo pseudodipolar  $A$  ficam mais evidentes em torno de  $(\pi, 0)$ , devido ao termo  $(\cos k_x - \cos k_y)$ .

Agora, analisaremos o problema no regime frustrado, em que  $J_2 > 0$ . Esse problema é interessante porque modelos  $J_1 - J_2$  tem sido investigados na literatura para o estudo de supercondutores a base de ferro com altas temperaturas (sistemas com spin 1) [30–32]. A relação de dispersão  $\omega_{\mathbf{k}}$  na BZ, para  $D = 4$ ,  $A = 0,3$  e  $\eta = 0,8$  é mostrada na fig.(12). Como pode ser visto, o mínimo caracterizado por  $M = \mathbf{k} = (\pi, 0)$  é

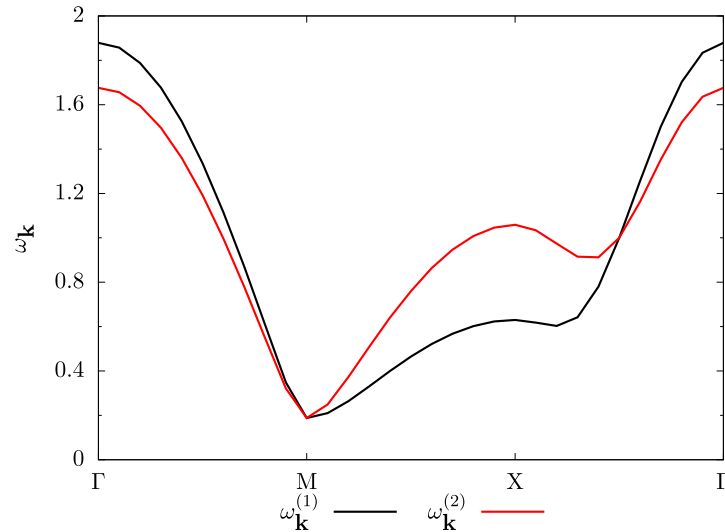


Figura 11 – A relação de dispersão  $\omega_{\mathbf{k}}$  na BZ, para  $D = 10.0$ ,  $A = 0.3$ , mas com  $A$  negativo na direção  $\hat{y}$ .



consistente com uma ordem colinear (CAF) abaixo de  $D_c$ .

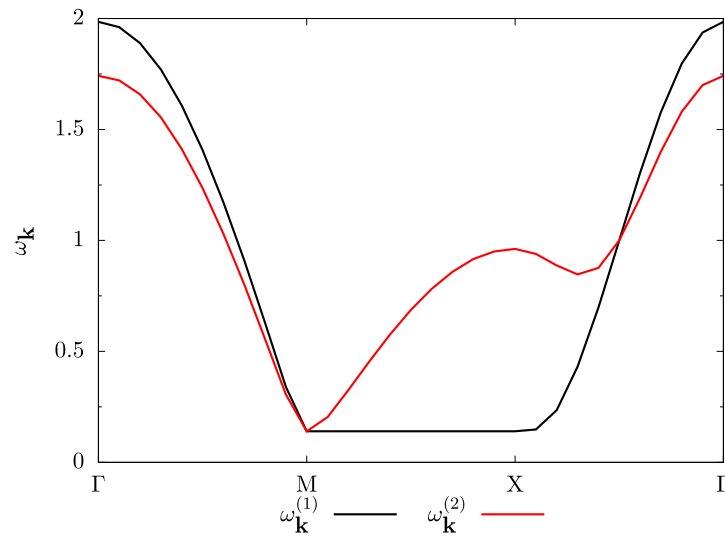
Figura 12 – A relação de dispersão  $\omega_{\mathbf{k}}$  na BZ, para  $D = 4.0$ ,  $A = 0.3$  e  $\eta = 0.8$ . Aqui  $\Gamma = \mathbf{k} = (0, 0)$ ,  $M = \mathbf{k} = (\pi, 0)$ , e  $X = \mathbf{k} = (\pi, \pi)$ .



A fig.(13) mostra a relação de dispersão para  $D = 0$ ,  $A = 0,3$  no ponto  $\eta = 0,65$ , onde a frustração é maior. Como pode ser visto, o ramo menor permanece plano de  $\mathbf{k} = (\pi, 0)$  até  $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ , indicando que o estado fundamental, para esse nível de frustração, é degenerado.

Como foi discutido na seção de frustração magnética, para  $\eta \sim 0,5$ , não há um consenso geral em caracterizar modelos  $J_1 - J_2$ , para sistemas quasi-bidimensionais. Para o composto de FeSe, dados de espalhamento de nêutrons fornecem evidências indicando uma ordem colinear frustrada (CAF) com um vetor de onda próximo ou

Figura 13 – A relação de dispersão  $\omega_{\mathbf{k}}$  na BZ, para  $D = 4.0$ ,  $A = 0.3$  e  $\eta = 0.65$ . Aqui  $\Gamma = \mathbf{k} = (0, 0)$ ,  $M = \mathbf{k} = (\pi, 0)$ , e  $X = \mathbf{k} = (\pi, \pi)$ .

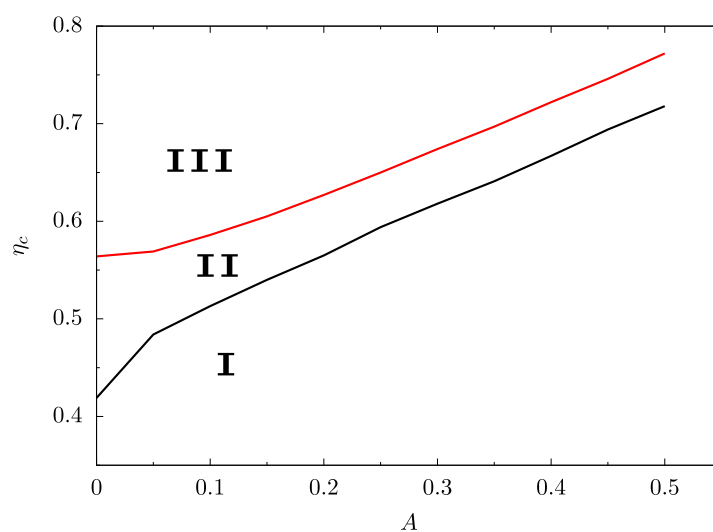


igual a  $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ . Foi estimado  $\eta = 0,528$  [33]. Jiang et. al. [34], usando o método da matriz densidade do grupo de renormalização, descobriram que existe uma fase paramagnética intermediária nesse modelo, para  $A = 0$ , no intervalo  $0,525 \leq \eta \leq 0,555$ , entre as fases de Néel e CAF. Wang et. al. [28] apresentaram argumentos teóricos para mostrar que, para esse modelo, qualquer fase magneticamente desordenada é provável de ser uma fase paramagnética nemática ( $Q \neq 0$ ), e eles concluíram que é possível visualizar a fase nemática no FeSe sendo impulsionada, principalmente, pelo magnetismo frustrado.

Para nosso caso, há um cruzamento entre o nível mais baixo de excitação de energia com vetor de onda  $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$  e o nível mais baixo de energia com vetor de onda  $\mathbf{k} = (\pi, 0)$  ou  $\mathbf{k} = (0, \pi)$  indicando uma degeneração nesse nível. O diagrama de fase, para  $D = 0$  no plano  $\eta - A$  é apresentado na fig.(14) em que na região I o sistema está na fase de Néel, na região III o sistema está na fase CAF, e na região intermediária II o sistema está magneticamente desordenado na fase nemática. A linha preta denota o valor de  $\eta_{1c}$  e a vermelha,  $\eta_{2c}$ . Para  $A = 0$ , temos  $\eta_{1c} = 0,419$  e  $\eta_{2c} = 0,564$ . Embora os valores de  $\eta$  aumentam com o aumento  $A$ , a largura da região desordenada permanece aproximadamente constante.

Os trabalhos relacionados a esse problema foram publicados em um importante artigo e encontra-se na ref. [35].

Figura 14 – Diagrama de fase com temperatura zero. (I) é a fase de Nèel. (II) é a fase magneticamente desordenada (nemática) e (III) é a fase colinear antiferromagnética (CAF).



## 4 Modelo de Heisenberg com interações entre cadeias

O segundo problema abordado nesse trabalho leva em conta alguns estudos experimentais, mostrando que existem uma abundância de materiais, tais como os complexos de cobre com borda compartilhada  $\text{LiVCuO}_4$ ,  $\text{LiCu}_2\text{O}_2$ ,  $\text{NaCu}_2\text{O}_2$ ,  $\text{Li}_2\text{ZrCuO}_4$ ,  $\text{Ca}_2\text{Y}_2\text{Cu}_5\text{O}_{10}$ , e  $\text{Li}_2\text{CuO}_2$ , que podem ser descritos adequadamente por um modelo, com spin-1/2, de cadeias com interação  $J_1$  antiferromagnética (AFM) entre os primeiros vizinhos (NN) e interação  $J_2$  antiferromagnética entre os segundos vizinhos mais próximos (NNN) [36].

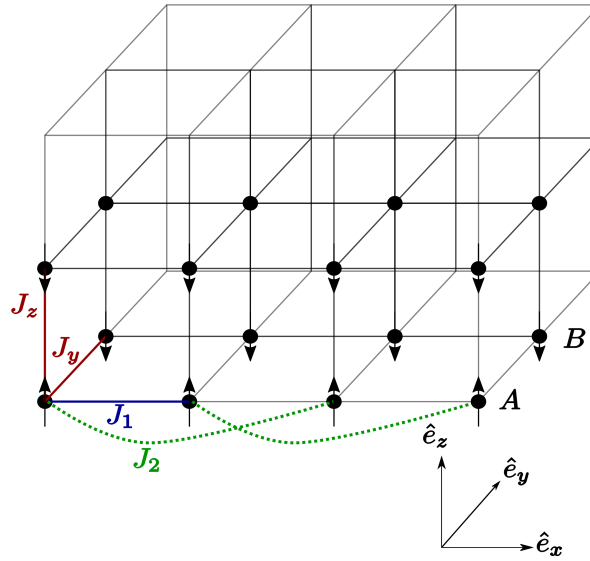
Do ponto de vista experimental, é claro que um acoplamento entre cadeias (abreviação IC para *interchain*) está, inevitavelmente, presente nos materiais reais, que levam a uma física tridimensional (3D), pelo menos, em baixas temperaturas e, em particular, levam a uma transição de fase para uma fase magnética com ordem de longo alcance abaixo de uma temperatura crítica  $T_c$ . Assim, por exemplo, nas Refs. [37–39], para o material magnético  $\text{Ca}_2\text{Y}_2\text{Cu}_5\text{O}_{10}$  ao longo de uma cadeia, os seguintes parâmetros foram relatados:  $J_1 \approx -93$  K (FM),  $J_2 \approx 4,7$  K (AFM), e  $T_c \approx 30$  K, indicando a presença de uma IC não-nula. Existem vários trabalhos que lidam com modelos de spin-1/2, e os modelos com spin-1 são menos abordados. No entanto, existem vários materiais de baixa dimensão e spin-1. Por exemplo, o composto  $\text{NiCl}_2 \cdot 4\text{SC}(\text{NH}_2)_2$  é um antiferromagneto quasi-unidimensional com anisotropia de plano fácil que domina a interação de troca [40].

Nesta seção, vamos discutir o papel do acoplamento IC e do parâmetro de anisotropia  $D$  de plano fácil no sistema magnético de spin-1, no estado magneticamente desordenado de um modelo quasi-unidimensional, com acoplamento  $J_1 < 0$  ferromagnético (FM) nos primeiros vizinhos (NN) e um acoplamento  $J_2 > 0$  antiferromagnético (AFM) nos segundos vizinhos mais próximos (NNN) ao longo de uma cadeia. De acordo com a fig.(15), as cadeias estão alinhadas ao longo do eixo  $x$ , e os acoplamentos entre as cadeias (IC) ao longo de  $y$  e  $z$  são dados, respectivamente, por  $J_y$  e  $J_z$ . Os dois acoplamentos IC NN,  $J_y$  e  $J_z$ , são tratados como variáveis independentes que vamos considerar como sendo AFM. O modelo correspondente é descrito pelo Hamiltoniano

$$H = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle_x} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle_x} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_{\perp y} \sum_{\langle i,j \rangle_y} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_{\perp z} \sum_{\langle i,j \rangle_z} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + D \sum_i (S_i^z)^2, \quad (4.1)$$

com  $J_1 < 0$  (FM ao longo do eixo  $x$ ) e  $J_2 \geq 0$ , enquanto que  $J_{\perp y}$  e  $J_{\perp z}$  serão interações AFM entre as cadeias.

Figura 15 – Esquema da rede com acoplamento entre cadeias.



Utilizando o formalismo dos bósons de Schwinger SU(3), os autoestados de  $S^z$  em relação aos três operadores de bósons são escritos como

$$|1\rangle = u^\dagger |v\rangle, \quad |0\rangle = t_z^\dagger |v\rangle, \quad |-1\rangle = d^\dagger |v\rangle, \quad (4.2)$$

em que cada operador respeita a relação de comutação usual dos bósons, em cada sítio,  $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$  e  $[a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0$  onde  $a = u, d$  e  $t$ . Além disso, impomos a restrição de ocupação única por sítio, dada por (3.5) e, conseqüentemente, podemos utilizar a relação (3.8) para  $(S_i^z)^2$ . Vamos trabalhar o modelo na fase desordenada magneticamente, onde  $D > D_c$ . Assim como no capítulo anterior, a anisotropia de plano fácil faz com que os operadores de spin se distribuam no plano  $xy$ , e o estado fundamental é formado pela dominância dos estados  $S_i^z = 0$ . Portanto, faremos a aproximação de condensação dos bósons  $t$  ( $\langle t_z^\dagger \rangle = \langle t_z \rangle = t$ ). Os operadores de spin serão escritos como (3.4) e o Hamiltoniano (4.1) se torna

$$H = H_{J_1} + H_{J_2} + H_{J_\perp} + D \sum_i (u_i^\dagger u_i + d_i^\dagger d_i), \quad (4.3)$$

em que  $(S_i^z)^2 = u_i^\dagger u_i + d_i^\dagger d_i$ . Cada uma das contribuições ao Hamiltoniano são dadas por

$$H_{J_1} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle_x} t^2 (d_i^\dagger d_j + u_i^\dagger u_j + u_i d_j + d_i^\dagger u_j^\dagger + H.c.) + J_1 \sum_{\langle i,j \rangle_x} (u^\dagger u - d^\dagger d)_i (u^\dagger u - d^\dagger d)_j, \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned}
H_{J_2} = & J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle_x} t^2 \left( d_i^\dagger d_j + u_i^\dagger u_j + u_i d_j + d_i^\dagger u_j^\dagger + H.c. \right) \\
& + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle_x} \left( u^\dagger u - d^\dagger d \right)_i \left( u^\dagger u - d^\dagger d \right)_j, \quad (4.5)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{J_\perp} = & J_y \sum_{\langle i,j \rangle_y} t^2 \left( d_i^\dagger d_j + u_i^\dagger u_j + u_i d_j + d_i^\dagger u_j^\dagger + H.c. \right) \\
& + J_z \sum_{\langle i,j \rangle_z} t^2 \left( d_i^\dagger d_j + u_i^\dagger u_j + u_i d_j + d_i^\dagger u_j^\dagger + H.c. \right) \\
& + J_y \sum_{\langle i,j \rangle_y} \left( u^\dagger u - d^\dagger d \right)_i \left( u^\dagger u - d^\dagger d \right)_j + J_z \sum_{\langle i,j \rangle_z} \left( u^\dagger u - d^\dagger d \right)_i \left( u^\dagger u - d^\dagger d \right)_j \quad (4.6)
\end{aligned}$$

Realizando os mesmos procedimentos feitos no problema do capítulo anterior, introduzindo o multiplicador de Lagrange  $\mu$  para incluir o vínculo (3.5), transformando os índices de sítio para vetores de posição, realizando uma transformação de Fourier dos operadores bósons para os operadores dos mágnons e desacoplando o produto de 4 operadores, por meio da eq.(2.87), obtemos o Hamiltoniano

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{\mathbf{k}} t^2 g_{\mathbf{k}} \left( u_{\mathbf{k}}^\dagger u_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} d_{-\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}}^\dagger u_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) \\
& + \sum_{\mathbf{k}} J_G (1 - t^2) \left( u_{\mathbf{k}}^\dagger u_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}} \right) + \sum_{\mathbf{k}} (D - \mu) \left( u_{\mathbf{k}}^\dagger u_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}} \right) \\
& - \sum_{\mathbf{k}} h_{\mathbf{k}} \left( u_{\mathbf{k}} d_{-\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}} u_{-\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}}^\dagger d_{-\mathbf{k}}^\dagger + d_{\mathbf{k}}^\dagger u_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) \\
& - \mu N (t^2 - 1) + 2N \left( J_1 p_1^2 + J_2 p_2^2 + J_y p_y^2 + J_z p_z^2 \right) - \frac{N}{2} J_G (1 - t^2)^2, \quad (4.7)
\end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
g_{\mathbf{k}} &= J_1 \cos(k_x) + J_2 \cos(2k_x) + J_y \cos(k_y) + J_z \cos(k_z) \\
h_{\mathbf{k}} &= J_1 p_1 \cos(k_x) + J_2 p_2 \cos(2k_x) + J_y p_y \cos(k_y) + J_z p_z \cos(k_z) \quad (4.8) \\
J_G &= J_1 + J_2 + J_y + J_z,
\end{aligned}$$

em que

$$p_1 = \langle d_{\mathbf{r}_i}^\dagger u_{\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{x}_i}^\dagger \rangle = \langle d_{\mathbf{r}_i} u_{\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{x}_i} \rangle; \quad p_2 = \langle d_{\mathbf{r}_i}^\dagger u_{\mathbf{r}_i + \mathbf{d} \mathbf{x}_i}^\dagger \rangle = \langle d_{\mathbf{r}_i} u_{\mathbf{r}_i + \mathbf{d} \mathbf{x}_i} \rangle \quad (4.9)$$

$$p_y = \langle d_{\mathbf{r}_i}^\dagger u_{\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{y}_i}^\dagger \rangle = \langle d_{\mathbf{r}_i} u_{\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{y}_i} \rangle; \quad p_z = \langle d_{\mathbf{r}_i}^\dagger u_{\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{z}_i}^\dagger \rangle = \langle d_{\mathbf{r}_i} u_{\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{z}_i} \rangle, \quad (4.10)$$

são variáveis geradas pelo desacoplamento do produto de 4 operadores, na aproximação de campo médio. Diagonalizamos o Hamiltoniano (4.7) utilizando o formalismo da transformação de Bogoliubov, em que

$$\begin{aligned}
u_{\mathbf{k}} &= \left( \chi_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \right); \quad u_{\mathbf{k}}^\dagger = \left( \chi_{\mathbf{k}}^* \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger - \rho_{\mathbf{k}}^* \beta_{\mathbf{k}} \right) \\
d_{\mathbf{k}} &= \left( \chi_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger \right); \quad d_{\mathbf{k}}^\dagger = \left( \chi_{\mathbf{k}}^* \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger - \rho_{\mathbf{k}}^* \alpha_{-\mathbf{k}} \right). \quad (4.11)
\end{aligned}$$

Assim, o Hamiltoniano (4.7) fica escrito na forma diagonal

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \left( \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \beta_{\mathbf{k}} \right) + \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{\mathbf{k}} - \Lambda_{\mathbf{k}}) + C, \quad (4.12)$$

em que

$$\Delta_{\mathbf{k}} = 2 \left( t^2 g_{\mathbf{k}} - h_{\mathbf{k}} \right), \quad (4.13)$$

$$\Lambda_{\mathbf{k}} = 2t^2 g_{\mathbf{k}} + J_G \left( 1 - t^2 \right) + (D - \mu), \quad (4.14)$$

$$\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{\Lambda_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_{\mathbf{k}}^2}, \quad (4.15)$$

$$C = \mu N \left( 1 - t^2 \right) + 2N \left( J_1 p_1^2 + J_2 p_2^2 + J_y p_y^2 + J_z p_z^2 \right) - \frac{N}{2} J_G \left( 1 - t^2 \right)^2. \quad (4.16)$$

Os parâmetros  $\rho_{\mathbf{k}}$  e  $\chi_{\mathbf{k}}$  obedecem os vínculos

$$\chi_{\mathbf{k}}^2 - \rho_{\mathbf{k}}^2 = 1 \quad (4.17)$$

$$\rho_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left( -1 + \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}} \right) \quad \text{e} \quad \chi_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}} \right). \quad (4.18)$$

Assim, a energia do estado fundamental é dada por  $E_g = \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{\mathbf{k}} - \Lambda_{\mathbf{k}}) + C$ . A energia livre de campo médio (2.92) é dada por  $F_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{\mathbf{k}} - \Lambda_{\mathbf{k}}) + C - \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln [1 + n(\omega_{\mathbf{k}})]$ , com  $\beta = 1/k_B T$  e  $n(\omega_{\mathbf{k}}) = 1/(e^{\beta \omega_{\mathbf{k}}} - 1)$ . As equações do ponto de sela dessa energia nos dão as equações autoconsistentes

$$\begin{aligned} t^2 &= 2 - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}} \coth \left( \frac{\beta \omega_{\mathbf{k}}}{2} \right), \\ \mu &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\Lambda_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}})}{\omega_{\mathbf{k}}} g_{\mathbf{k}} \coth \left( \frac{\beta \omega_{\mathbf{k}}}{2} \right), \\ p_i &= -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}} Z \cos(k_i) \coth \left( \frac{\beta \omega_{\mathbf{k}}}{2} \right); \quad i = 1, y, z \\ p_2 &= -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}} Z \cos(2k_x) \coth \left( \frac{\beta \omega_{\mathbf{k}}}{2} \right). \end{aligned} \quad (4.19)$$

## 4.1 Resultados

### 4.1.1 Transição de fase para $T = 0$

Quando  $T = 0$ , cálculos numéricos revelam que os efeitos de  $p$  são muito pequenos em duas e três dimensões [28]. Com isso  $h_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$  e podemos realizar as simplificações

$$C = \mu N \left( 1 - t^2 \right) - \frac{N}{2} J_G \left( 1 - t^2 \right)^2; \quad (4.20)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}} = 2t^2 g_{\mathbf{k}}; \quad (4.21)$$

$$\Lambda_{\mathbf{k}} = r + \Delta_{\mathbf{k}}; \quad (4.22)$$

$$r(D) \equiv J_G \left( 1 - t^2 \right) + (D - \mu), \quad (4.23)$$

de forma que a relação de dispersão se torna

$$\begin{aligned}\omega_{\mathbf{k}} &= \sqrt{r^2 + 2r\Delta_{\mathbf{k}}} \\ &= r\sqrt{(1 + yg_{\mathbf{k}})}; \quad y = \frac{4t^2}{r(D)}.\end{aligned}\quad (4.24)$$

O acoplamento  $J_1$  FM NN ao longo da cadeia linear faz com que, no estado fundamental, os spins fiquem alinhados paralelamente e o acoplamento  $J_2$  AFM NNN ao longo desta cadeia em  $x$  força os spins a ficarem antiparalelos. Assim, temos uma frustração. É natural esperar que essa frustração quebre a ordem magnética do sistema. Para a cadeia linear clássica o valor crítico de  $J_2$ , onde o estado fundamental FM se torna um estado incomensurável espiral, é  $J_2^c = |J_1|/4$ . Este estado espiral, no caso clássico, não depende de  $J_y$  ou  $J_z$ . Quando  $J_2^c < |J_1|/4$  o estado FM é estável. Considerando a interação FM ( $J_1 = -1.0$ ) ao longo da cadeia em  $x$  e a interação AFM ( $J_y, J_z \geq 0$ ) entre as cadeias (IC), a relação de dispersão  $\omega_{\mathbf{k}}$  é mínima para  $(0, \pi, \pi)$  e ela se anula (gap nulo) quando  $y = y_c = -\frac{1}{J_1 + J_2 - (J_y + J_z)}$ . As equações de autoconsistência se tornam

$$(2 - t^2) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{(2 + yg_{\mathbf{k}})}{\sqrt{(1 + yg_{\mathbf{k}})}} \right), \quad (4.25)$$

$$\mu = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{g_{\mathbf{k}}}{\sqrt{(1 + yg_{\mathbf{k}})}}. \quad (4.26)$$

Definindo as integrais

$$I_1 = \frac{1}{\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\pi \int_0^\pi \left( \frac{1}{\sqrt{1 + yg_{\mathbf{k}}}} \right) d\mathbf{k} \quad (4.27)$$

$$I_2 = \frac{1}{\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\pi \int_0^\pi \left( \sqrt{1 + yg_{\mathbf{k}}} \right) d\mathbf{k}, \quad (4.28)$$

as relações de autoconsistência, no limite contínuo, são escritas como

$$\begin{aligned}(2 - t^2) &= \frac{1}{2} (I_1 + I_2) \\ \mu &= \frac{2}{y} (I_2 - I_1).\end{aligned}\quad (4.29)$$

Podemos escrever uma equação para  $D$  através de  $y$  como

$$D = - \left( \frac{J_G}{2} + \frac{4}{y} \right) I_1 - \frac{J_G}{2} I_2 + J_G \frac{8}{y}. \quad (4.30)$$

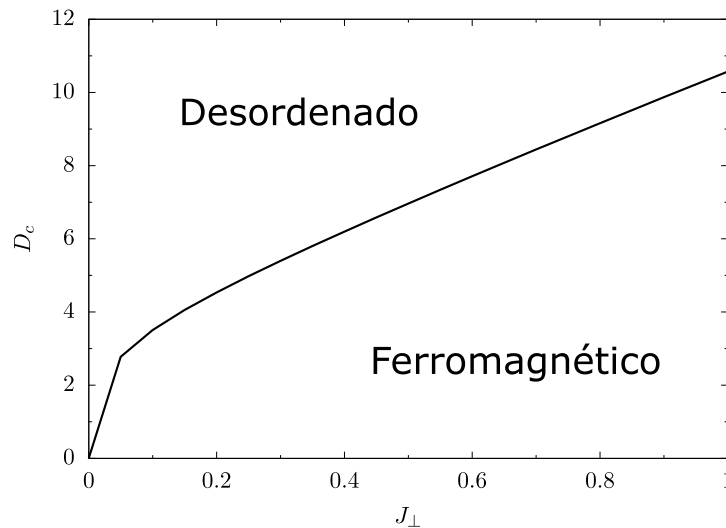
O valor de  $D = D_c$  indica uma transição de fase quântica em que a ordem magnética é estabelecida para  $D < D_c$ . Neste caso, se  $D_c = 0$ , o sistema é desordenado, mesmo se  $T = 0$ . Assim, esperamos que  $D_c$  vai a zero para um valor de  $J_2$  próximo de  $1/4$  (com  $J_1 = -1, 0$ ).

Embora  $J_y$  e  $J_z$  são tratados como variáveis independentes na teoria, consideramos o caso de um acoplamento IC idêntico nas direções  $y$  e  $z$ , isto é,  $J_y = J_z = J_\perp$ ,



assim como foi feito na ref. [36]. Além disso, configuramos  $J_1 = -1, 0$  e analisamos o comportamento de  $D_c$  em função do acoplamento  $J_2$  AFM NNN e do acoplamento IC  $J_\perp$ . O acoplamento  $J_\perp$  IC AFM não leva à frustração como o acoplamento  $J_2$  AFM NNN. Assim, é natural esperar também que variações nos sinais de  $J_y$  ou  $J_z$  não devem alterar significativamente o comportamento de  $D_c$ . Na fig.(16), mostramos  $D_c$  em função de  $J_\perp$ , com  $J_2 = 0$ . Abaixo da linha, o sistema está na fase ferromagnética. Acima da linha, ele está na fase paramagnética. Como podemos verificar,  $D_c$  aumenta com  $J_\perp$ , que era esperado uma vez que para um acoplamento IC mais forte, precisamos de uma influência maior de  $D$  para desordenar o sistema.

Figura 16 – Parâmetro de anisotropia crítico  $D_c$  como função de  $J_\perp = J_y = J_z$  para  $J_1 = -1, J_2 = 0$ .



Na fig.(17) mostramos  $D_c$  como função de  $J_2$  para  $J_\perp = 0, 1$  (linha preta) e  $J_\perp = 0, 5$  (linha vermelha). Como pode ser visto,  $D_c$  diminui monotonicamente com o aumento de  $J_2$  e cai discontinuamente a zero no ponto crítico  $J_{2c}$  onde a ordem ferromagnética é destruída pelas flutuações quânticas devido à frustração. Existe um pequeno desvio no valor de  $J_{2c}$  quando comparado ao valor clássico  $J_{2c} = 0, 25$ . Encontramos  $J_{2c} = 0, 251$  para  $J_\perp = 0, 1$  e  $J_{2c} = 0, 252$  para  $J_\perp = 0, 5$ . Essa diferença também foi relatada para cadeias acopladas de spin-1/2 [40]

Embora nosso interesse seja estudar o modelo 3D, mostramos na fig.(18),  $D_c$  como função de  $J_2$  para  $J_y = 0, 1$  e  $J_z = 0$ . Nesse caso,  $D_c$  cai a zero continuamente. Esse comportamento é similar ao encontrado na ref. [21] para uma rede quadrada de cadeias acopladas AFM. Assim, concluímos que a queda descontínua seja um efeito da dimensão. Um comportamento similar foi encontrado na ref. [36] para um gráfico da magnetização como função de  $J_2$  onde uma queda acentuada acontece no parâmetro crítico  $J_{2c}$ . Em ambos os casos (estudado aqui e na ref. [36]) têm-se uma transição para o estado desordenado.

Figura 17 – Parâmetro de anisotropia crítico  $D_c$  como função de  $J_2$  para  $J_1 = -1$ ,  $J_\perp = 0, 1$  (linha preta) e  $J_\perp = 0, 5$  (linha vermelha).

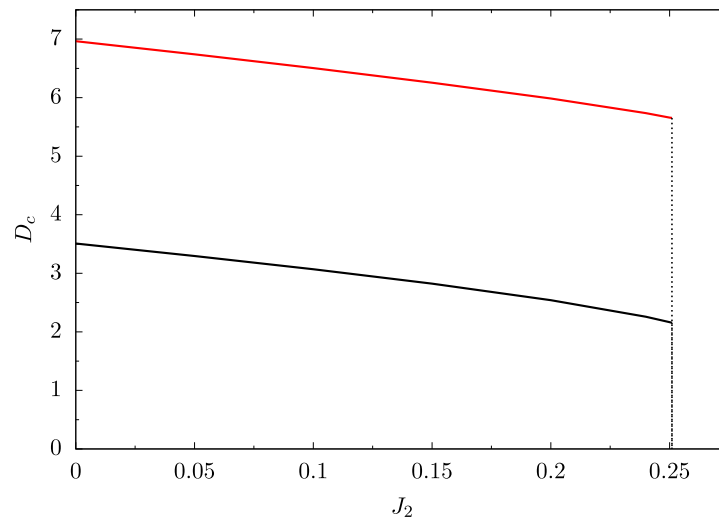
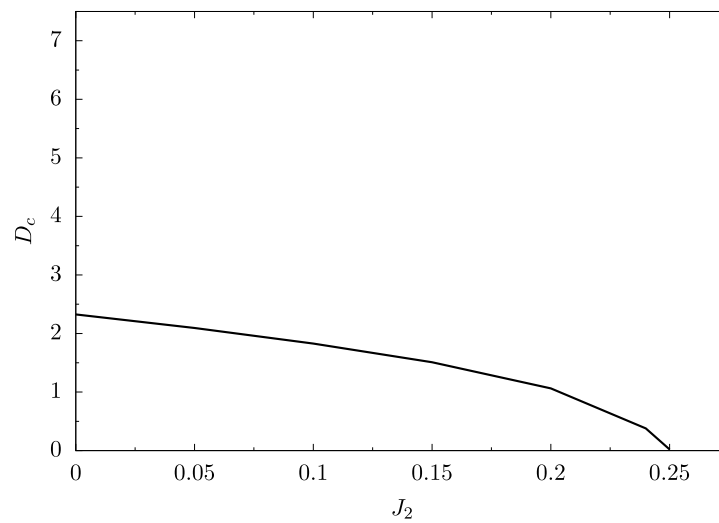


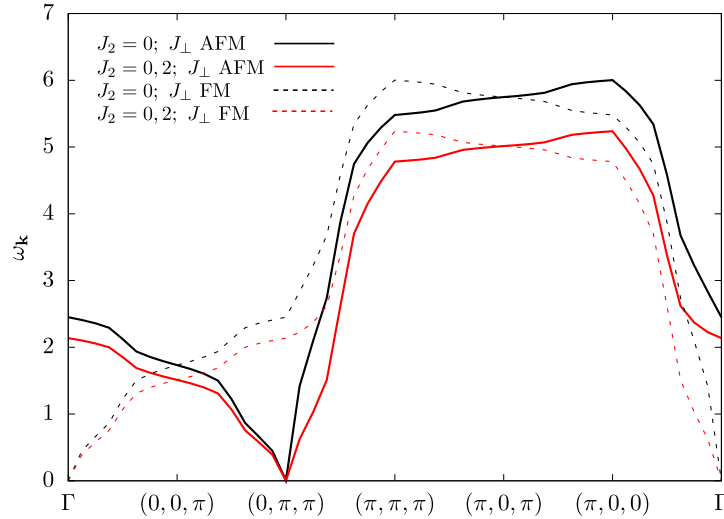
Figura 18 – Parâmetro de anisotropia crítico  $D_c$  como função de  $J_2$  para  $J_1 = -1$ ,  $J_y = 0, 1$  e  $J_z = 0$ .



Na fig.(19) apresentamos a relação de dispersão, em temperatura zero e  $J_1 = -1, 0$ , ao longo de uma trajetória na zona de Brillouin. Nesse esquema, as linhas tracejadas representam acoplamentos IC,  $J_\perp = -0, 1$  ferromagnéticos, e as linhas sólidas, os acoplamentos IC  $J_\perp = 0, 1$  antiferromagnéticos. É notório que a influência de  $J_2$  na dispersão  $\omega_k$  é fraca. De modo geral, os comportamentos entre as curvas representando acoplamentos FM e AFM são relativamente parecidos indicando apenas um deslocamento do ponto de mínimo:  $\Gamma = (0, 0, 0)$  para acoplamentos IC FM e  $(0, \pi, \pi)$  para acoplamentos IC AFM. Nesses casos o gap é nulo no ponto mínimo, quando  $D = D_c$ .

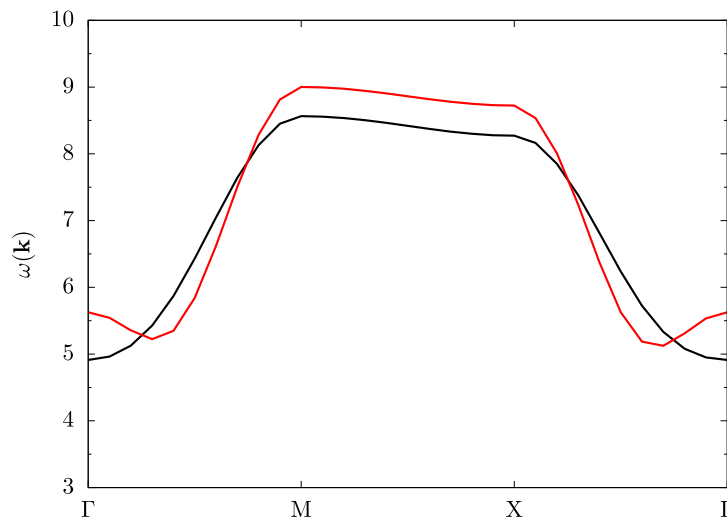
A fig.(20) mostra a relação de dispersão  $\omega_k$  na BZ, com  $J_1 = -1$ ,  $J_\perp = 0, 1$  e

Figura 19 – Relação de dispersão para acoplamentos entre cadeias, FM (linhas tracejadas) e AFM (linhas cheias), com  $J_{\perp} = \pm 0.1$  e variações das curvas para  $J_2 = 0$  ou  $J_2 = 0, 2$



$D = 6, 0$  para  $J_2 = 0, 15$  (linha preta) e  $J_2 = 0, 45$  (linha vermelha). Como pode ser visto, o principal efeito da frustração se manifesta no limite de grandes comprimentos de onda ( $k \rightarrow 0$ ). O gap da relação de dispersão, na fase desordenada, se anula no parâmetro crítico  $D_c$ , com um vetor de onda marcando o tipo de ordem magnética que aparece abaixo de  $D_c$ . O mínimo de  $\omega_k$  para  $J_2 > J_{2c}$  indica que  $k_{0x} = \cos^{-1}(1/4J_2)$  é o vetor de onda da fase espiral incomensurável para  $D$  abaixo de  $D_c$ . Além disso, o mínimo da dispersão sofre um deslocamento para diferentes valores da frustração.

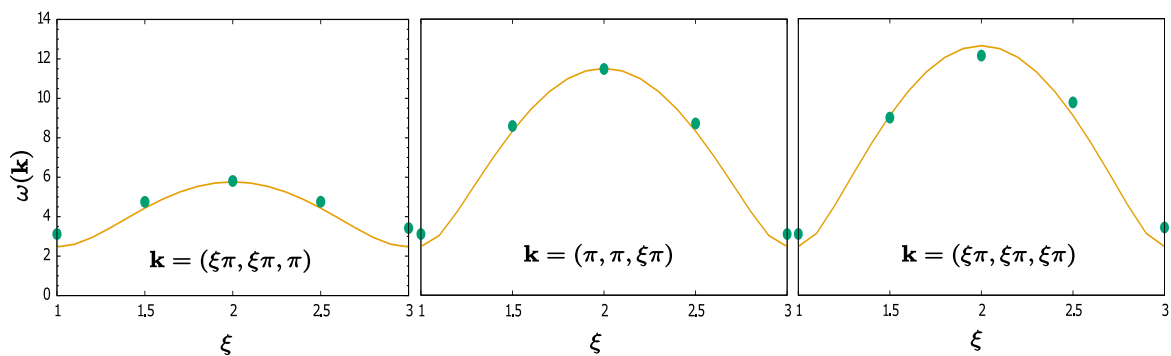
Figura 20 – Relação de dispersão  $\omega_k$  na BZ, para  $J_1 = -1$ ,  $J_{\perp} = 0, 1$ ,  $D = 6, 0$  com  $J_2 = 0, 15$  (linha preta) e  $J_2 = 0, 45$  (linha vermelha).



Até onde sabemos, atualmente, não existe um composto sintetizado descrito por um sistema de cadeia de acoplamento FM de spin 1. Porém, o composto  $\text{NiCl}_2$ -

$4\text{SC}(\text{NH}_2)_2$  (também conhecido como DTN) é um antiferromagneto anisotrópico de spin 1 com anisotropia de íon único [40]. Então, a fim de testar a teoria, na fig.(21), nós ajustamos a relação de dispersão da eq.(4.15) com os dados experimentais da dispersão medida no espalhamento inelástico de nêutrons, da ref. [5]. O ajuste foi obtido usando os valores dos parâmetros dados por  $D = 7,8 \text{ K}$ ,  $J_x = J_y = 0,2 \text{ K}$ ,  $J_z = 1,86 \text{ K}$ , comparados aos valores de  $D = 7,72 \text{ K}$ ,  $J_x = J_y = 0,2 \text{ K}$ ,  $J_z = 1,86 \text{ K}$  usados na ref. [40] em que os autores usaram uma expansão sistemática de  $1/D$  até terceira ordem para ajustar os dados.

Figura 21 – Relação de dispersão calculada de  $\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{\Lambda_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_{\mathbf{k}}^2}$ , comparado com os dados de espalhamento inelástico de nêutrons.

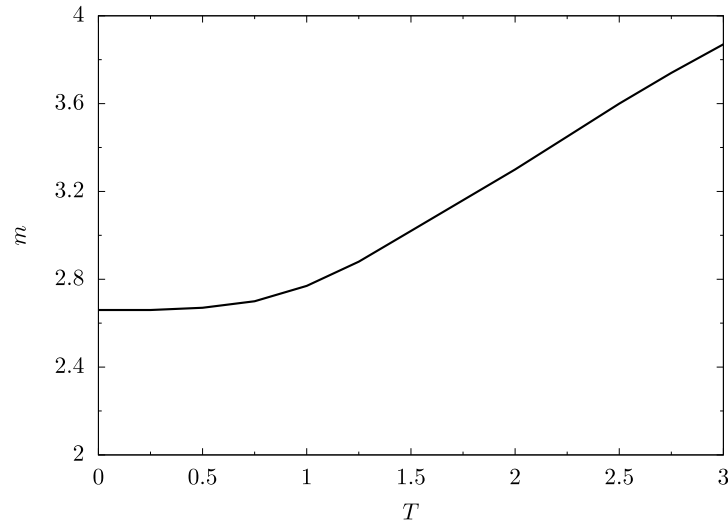


Os autores da ref. [6], usando um método semiclassico e autoconsistente para calcular a dispersão dos mágnons, obtiveram  $D = 8,9 \text{ K}$ ,  $J_x = J_y = 0,18 \text{ K}$ ,  $J_1 = 2,2 \text{ K}$ . Assim, concluímos que o formalismo dos bósons de Schwinger  $\text{SU}(3)$  usado nesse trabalho é uma ferramenta teórica mais adequada de ser trabalhada em relação as teorias usadas nas referências anteriores, e poderia ser utilizada no futuro para análise de dados experimentais.

### 4.1.2 Gap em $T \neq 0$

O gap de energia  $m$ , em  $\mathbf{k}_0 = (0, \pi, \pi)$ , é mostrado na fig.(22) como função da temperatura, para  $J_1 = -1$ ,  $J_2 = 0, 1$ ,  $J_\perp = 0, 1$  e  $D = 5, 0$ .

Figura 22 – O gap  $m$  em  $\mathbf{k}_0 = (0, \pi, \pi)$  como função da temperatura para  $J_1 = -1$ ,  $J_2 = 0, 1$ ,  $J_y = J_z = 0, 1$  e  $D = 5, 0$ .



Como esperado, de acordo com linha preta da fig.(17), um valor de  $D > D_c$  indica um sistema no estado desordenado magneticamente, cujo gap de energia é não-nulo e aumenta com a temperatura. Uma pequena parcela de mágnons são excitados termicamente induzidos por temperaturas não-nulas.

Os resultados e procedimentos trabalhados nesse capítulo foram publicados em um artigo e encontra-se na ref. [41].

## 5 Modelo de Heisenberg anisotrópico e interação de Moryia-Dzyaloshinskii

Um importante tipo de anisotropia do modelo de Heisenberg, é dado pela interação antissimétrica dos spins, chamado de interação de Moryia-Dzyaloshinskii (MD), que surge de um forte acoplamento spin-órbita e da quebra da simetria de inversão. Essa interação, do tipo interfacial por exemplo, foi bastante estudada em virtude do seu papel nas alterações das propriedades magnéticas de um sistema com mais de uma camada entre metais de transição e elementos pesados [42–45]. Moon e colaboradores estudaram a influência da interação MD interfacial na propagação das ondas de spin, comparando as propriedades medidas nas ondas de spin de bicamadas do tipo ferromagneto/metal normal e outras estruturas artificiais [46]. O modelo de Heisenberg, de spin 1/2, com anisotropia de interação MD foi investigado extensivamente, no estudo do diagrama de fase, expoente crítico, comportamento do ponto crítico triplo, da energia do estado fundamental, as excitações de baixa energia e a função correlação de vizinhos mais próximos [47–55].

Nesta seção, vamos estudar o modelo de Heisenberg AFM de spin 1, na rede quadrada, com anisotropias de plano fácil  $xy$  (ou íon único) e interação de Moryia-Dzyaloshinskii (MD) ao longo das diagonais da rede quadrada. O Hamiltoniano desse modelo é dado por

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + D \sum_i (S_i^z)^2 + H_{\text{MD}} , \quad (5.1)$$

em que

$$H_{\text{MD}} \equiv A \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \left( S_i^x S_j^y - S_i^y S_j^x \right) , \quad (5.2)$$

onde o índice  $\langle\langle i,j \rangle\rangle$  indica uma soma sobre os vizinhos NNN da rede quadrada, isto é, os vizinhos ao longo da diagonal. Reescrevendo o Hamiltoniano em termos dos operadores de spin “escada”  $S^+$  e  $S^-$ , temos

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \left( \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right) + D \sum_i (S_i^z)^2 - A \frac{1}{2i} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \left( S_i^+ S_j^- - S_i^- S_j^+ \right) . \quad (5.3)$$

Vamos trabalhar o modelo na região desordenada  $D > D_c$ . Utilizando o formalismo dos bósons de Schwinger SU(3) (Eq.3.4) e utilizando a aproximação de condensação dos bósons  $t$  em virtude da região  $D > D_c$ , como foi justificado nos capítulos anteriores,

obtemos o Hamiltoniano

$$\begin{aligned}
H = & J \sum_{\langle i,j \rangle} t^2 \left[ (d_i + u_i^\dagger) (d_j^\dagger + u_j) \right. \\
& \quad \left. + (d_i^\dagger + u_i) (d_j + u_j^\dagger) \right] \\
& + J \sum_{\langle i,j \rangle} (u_i^\dagger u_i - d_i^\dagger d_i) (u_j^\dagger u_j - d_j^\dagger d_j) \\
& + D \sum_i (u_i^\dagger u_i - d_i^\dagger d_i)^2 \\
& + iAt^2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \left[ (d_i + u_i^\dagger) (d_j^\dagger + u_j) \right. \\
& \quad \left. - (d_i^\dagger + u_i) (d_j + u_j^\dagger) \right] . \tag{5.4}
\end{aligned}$$

Vamos introduzir o potencial químico  $\mu_i$  pelo método dos multiplicadores de Lagrange, incluindo o vínculo  $u^\dagger u + d^\dagger d + t^2 = 1$ . Na aproximação de campo médio, tomamos  $\mu_i$  independente da posição e escrevemos  $\mu_i = \mu$ . Os termos com 4 operadores são desacoplados usando (3.10). Além disso, usaremos a relação (3.8) para escrever  $(u_i^\dagger u_i - d_i^\dagger d_i)^2 = u_i^\dagger u_i + d_i^\dagger d_i$  devido ao vínculo de ocupação única por sítio. Com isso, convertemos a soma sobre os índices de sítio para vetores de posição na rede  $\mathbf{r}$  a fim de obtermos

$$\begin{aligned}
H = & \frac{1}{2} t^2 \sum_{\mathbf{r}, \delta \mathbf{r}} J \left( u_{\mathbf{r}}^\dagger u_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{r}} + d_{\mathbf{r}}^\dagger d_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{r}} + u_{\mathbf{r}}^\dagger d_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{r}}^\dagger + d_{\mathbf{r}}^\dagger u_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{r}}^\dagger \right. \\
& \quad \left. + u_{\mathbf{r}} u_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{r}}^\dagger + d_{\mathbf{r}} d_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{r}}^\dagger + u_{\mathbf{r}} d_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{r}} + d_{\mathbf{r}} u_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{r}} \right) \\
& + \frac{1}{2} J \sum_{\mathbf{r}, \delta \mathbf{r}} \left[ \frac{1}{2} (1 - t^2) (u_{\mathbf{r}}^\dagger u_{\mathbf{r}} + d_{\mathbf{r}}^\dagger d_{\mathbf{r}} + u_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{r}}^\dagger u_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{r}} + d_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{r}}^\dagger d_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{r}}) \right. \\
& \quad \left. - p (u_{\mathbf{r}} d_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{r}} + d_{\mathbf{r}} u_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{r}} + \text{h.c.}) \right] \\
& + (D - \mu) \sum_{\mathbf{r}} (u_{\mathbf{r}}^\dagger u_{\mathbf{r}} + d_{\mathbf{r}}^\dagger d_{\mathbf{r}}) \\
& + \frac{1}{2} t^2 \sum_{\mathbf{r}, \delta \mathbf{d}} iA \left( u_{\mathbf{r}}^\dagger u_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{d}} + u_{\mathbf{r}}^\dagger d_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{d}}^\dagger + d_{\mathbf{r}} d_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{d}}^\dagger + d_{\mathbf{r}} u_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{d}} \right. \\
& \quad \left. - u_{\mathbf{r}} u_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{d}}^\dagger - u_{\mathbf{r}} d_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{d}} - d_{\mathbf{r}}^\dagger d_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{d}} - d_{\mathbf{r}}^\dagger u_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{d}}^\dagger \right) \\
& + J \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \delta \mathbf{r}} \left[ -\frac{1}{2} (1 - t^2)^2 + 2p^2 \right] - \mu N (t^2 - 1) . \tag{5.5}
\end{aligned}$$

Vamos utilizar a transformação de Fourier para os operadores. Como a interação MD é antissimétrica, consideraremos  $A$  positiva ao longo de  $\delta \mathbf{d} = \hat{i} + \hat{j}$  ou  $\delta \mathbf{d} = \hat{i} - \hat{j}$ , e negativa nas direções opostas. Portanto temos

$$\begin{aligned}
iA \sum_{\delta \mathbf{d}} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta \mathbf{d}} & = iA \left[ e^{i(k_x+k_y)} + e^{i(k_x-k_y)} - e^{-i(k_x+k_y)} - e^{-i(k_x-k_y)} \right] \\
& = iA \left[ (e^{ik_x} - e^{-ik_x}) (e^{ik_y} + e^{-ik_y}) \right] \\
& = -4A \cos k_x \sin k_y = -ZAm_{\mathbf{k}} . \tag{5.6}
\end{aligned}$$

O procedimento de trocar  $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$  também faz  $m_{\mathbf{k}} \rightarrow -m_{\mathbf{k}}$  e assim

$$H_{\text{MD}} = \frac{1}{2} t^2 \sum_{\mathbf{k}} Z A m_{\mathbf{k}} \left( -u_{\mathbf{k}}^{\dagger} u_{\mathbf{k}} - u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^{\dagger} - u_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{-\mathbf{k}}^{\dagger} - d_{-\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} + u_{-\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}}^{\dagger} u_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right). \quad (5.7)$$

Com a transformação de Fourier para os operadores dos mágnons, obtemos

$$\begin{aligned} H = & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \left[ Z t^2 (J \gamma_{\mathbf{k}} - A m_{\mathbf{k}}) + \lambda \right] \left( u_{\mathbf{k}}^{\dagger} u_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right) \right. \\ & \left. + \left[ Z t^2 (J \gamma_{\mathbf{k}} + A m_{\mathbf{k}}) + \lambda \right] \left( d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right) \right\} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ Z \left[ J \gamma_{\mathbf{k}} (t^2 - p) - t^2 A m_{\mathbf{k}} \right] \left( d_{-\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right) \right. \\ & \left. + Z \left[ J \gamma_{\mathbf{k}} (t^2 - p) + t^2 A m_{\mathbf{k}} \right] \left( u_{-\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}}^{\dagger} u_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right) \right\} \\ & + \mu N (1 - t^2) - \frac{1}{4} N Z J (1 - t^2)^2 + N Z J p^2 - N \lambda, \end{aligned} \quad (5.8)$$

ou

$$\begin{aligned} H = & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[ (\Lambda_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}}) \left( u_{\mathbf{k}}^{\dagger} u_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right) \right. \\ & \left. + (\Lambda_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}) \left( d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right) \right] \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[ (\Delta_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}}) \left( u_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + d_{-\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} \right) \right. \\ & \left. + (\Delta_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}) \left( u_{-\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}}^{\dagger} u_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right) \right] \\ & + C - N \lambda, \end{aligned} \quad (5.9)$$

em que

$$\Lambda_{\mathbf{k}} = Z t^2 J \gamma_{\mathbf{k}} + \lambda; \quad \Delta_{\mathbf{k}} = (t^2 - p) Z J \gamma_{\mathbf{k}}; \quad a_{\mathbf{k}} = Z t^2 A m_{\mathbf{k}}, \quad (5.10)$$

$$C = \mu N (1 - t^2) - \frac{1}{4} N Z J (1 - t^2)^2 + N Z J p^2, \quad (5.11)$$

$$\lambda = D - \mu + \frac{1}{2} Z J (1 - t^2), \quad (5.12)$$

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} (\cos k_x + \cos k_y); \quad m_{\mathbf{k}} = \cos k_x \sin k_y, \quad (5.13)$$

onde  $Z$  é o número de vizinhos ao longo de  $x, y$  e da interação  $A$ , coincidindo-se como  $Z = 4$ . Colocando o Hamiltoniano na forma matricial  $H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \mathbf{M} \Psi_{\mathbf{k}} + E_g$ , onde  $\Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} = (u_{\mathbf{k}}^{\dagger}, d_{\mathbf{k}}^{\dagger}, u_{-\mathbf{k}}, d_{-\mathbf{k}})$ , a matriz  $\mathbf{M}$  será dada por (observando que  $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$  leva  $a_{\mathbf{k}} \rightarrow -a_{\mathbf{k}}$ )

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \Lambda_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}} & 0 & 0 & \Delta_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}} \\ 0 & \Lambda_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}} & \Delta_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & \Delta_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}} & \Lambda_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}} & 0 \\ \Delta_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}} & 0 & 0 & \Lambda_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \quad (5.14)$$



Diagonalizando a matriz através do método da matriz paraunitária  $\mathbf{T}$  obtemos a matriz  $\bar{\mathbf{E}} = \text{diag}(\omega_{1\mathbf{k}}, \omega_{2\mathbf{k}}, -\omega_{1\mathbf{k}}, -\omega_{2\mathbf{k}})$  tal que  $H = \frac{1}{2} \bar{\Xi}_{\mathbf{k}}^{\dagger} (\mathbf{T}^{\dagger} \rho_3 \mathbf{M} \mathbf{T}) \bar{\Xi}_{\mathbf{k}} + E_g$  com  $\bar{\mathbf{E}} = \mathbf{T}^{\dagger} \rho_3 \mathbf{M} \mathbf{T}$  e  $\rho_3 \equiv \text{diag}(1, 1, -1, -1)$  e  $\bar{\Xi}_{\mathbf{k}}^{\dagger} = (\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \alpha_{-\mathbf{k}}, \beta_{-\mathbf{k}})$ . Assim calculamos os autovalores de  $\rho_3 \mathbf{M}$ , fornecendo

$$\omega_{1\mathbf{k}} = \sqrt{\Lambda_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_{\mathbf{k}}^2 + f_{\mathbf{k}}}; \quad \omega_{2\mathbf{k}} = \sqrt{\Lambda_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_{\mathbf{k}}^2 - f_{\mathbf{k}}} \quad (5.15)$$

$$\omega_{3\mathbf{k}} = -\omega_{1\mathbf{k}}; \quad \omega_{4\mathbf{k}} = -\omega_{2\mathbf{k}}, \quad (5.16)$$

em que

$$f_{\mathbf{k}} = 2(\Lambda_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}}) a_{\mathbf{k}}. \quad (5.17)$$

Assim temos

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{1\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}} + \omega_{2\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \beta_{\mathbf{k}} - \omega_{3\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \alpha_{-\mathbf{k}} - \omega_{4\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \beta_{-\mathbf{k}}) + C - N\lambda. \quad (5.18)$$

Quando trocamos  $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ , temos  $a_{\mathbf{k}} \rightarrow -a_{\mathbf{k}}$ ,  $f_{\mathbf{k}} \rightarrow -f_{\mathbf{k}}$  e, conseqüentemente  $\omega_{3\mathbf{k}} \rightarrow -\omega_{2\mathbf{k}}$  e  $\omega_{4\mathbf{k}} \rightarrow -\omega_{1\mathbf{k}}$ . Então

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{1\mathbf{k}} + \omega_{2\mathbf{k}}) (\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \beta_{\mathbf{k}}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{1\mathbf{k}} + \omega_{2\mathbf{k}}) + C - N\lambda. \quad (5.19)$$

A energia do estado fundamental por sítio é dada por  $e_0 = (1/N) \left[ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{1\mathbf{k}} + \omega_{2\mathbf{k}}) + C - N\lambda \right]$  e a energia livre de Gibbs é dada por

$$\begin{aligned} G &= N e_0 - \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln [1 + n(\omega_{1\mathbf{k}})] - \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln [1 + n(\omega_{2\mathbf{k}})] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{1\mathbf{k}} + \omega_{2\mathbf{k}}) + C - N\lambda \\ &\quad - \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln [1 + n(\omega_{1\mathbf{k}})] [1 + n(\omega_{2\mathbf{k}})], \end{aligned} \quad (5.20)$$

em que  $n(\omega_{\mathbf{k}}) = (e^{\beta\omega_{\mathbf{k}}} - 1)^{-1}$  e  $\beta = (k_B T)^{-1}$ . Assim, obtemos as equações autoconsistentes calculando o ponto de sela  $\partial G / \partial l = 0$ , ou seja

$$0 = \frac{\partial G}{\partial l} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left( [1 + 2n(\omega_{1\mathbf{k}})] \frac{\partial \omega_{1\mathbf{k}}}{\partial l} + [1 + 2n(\omega_{2\mathbf{k}})] \frac{\partial \omega_{2\mathbf{k}}}{\partial l} \right) + \frac{\partial C}{\partial l} - N \frac{\partial \lambda}{\partial l}. \quad (5.21)$$

Para cada  $l = p, t^2, \mu$  obtemos

$$2(2 - t^2) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ [1 + 2n(\omega_{1\mathbf{k}})] \frac{(a_{\mathbf{k}} + \Lambda_{\mathbf{k}})}{\omega_{1\mathbf{k}}} - [1 + 2n(\omega_{2\mathbf{k}})] \frac{(a_{\mathbf{k}} - \Lambda_{\mathbf{k}})}{\omega_{2\mathbf{k}}} \right\}, \quad (5.22)$$

$$\mu = \frac{Z}{2N} \sum_{\mathbf{k}} (\Lambda_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}}) \left\{ \frac{(J\gamma_{\mathbf{k}} + Am_{\mathbf{k}})}{\omega_{1\mathbf{k}}} [1 + 2n(\omega_{1\mathbf{k}})] + \frac{(J\gamma_{\mathbf{k}} - Am_{\mathbf{k}})}{\omega_{2\mathbf{k}}} [1 + 2n(\omega_{2\mathbf{k}})] \right\}, \quad (5.23)$$

$$p = -\frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} \left\{ [1 + 2n(\omega_{1\mathbf{k}})] \frac{(\Delta_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}})}{\omega_{1\mathbf{k}}} + [1 + 2n(\omega_{2\mathbf{k}})] \frac{(\Delta_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}})}{\omega_{2\mathbf{k}}} \right\}. \quad (5.24)$$

## 5.1 Resultados

Para  $T = 0$ , podemos desprezar a contribuição da variável  $p$ , em duas e três dimensões [28], conforme foi discutido nos capítulos anteriores. Para investigar a transição de fase quântica, procuramos pelo valor de  $D_c$ . Primeiramente, reescrevemos as frequências como

$$\begin{aligned} \omega_{i\mathbf{k}} &= \sqrt{\Lambda_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_{\mathbf{k}}^2 \pm f_{\mathbf{k}}} \\ &= \lambda \sqrt{1 + yh_{\mathbf{k}}^{\pm}}, \end{aligned} \quad (5.25)$$

em que

$$y \equiv \frac{2Zt^2}{\lambda}; \quad h_{\mathbf{k}}^{\pm} \equiv (J\gamma_{\mathbf{k}} \pm Am_{\mathbf{k}}), \quad (5.26)$$

e as equações de autoconsistência podem ser simplificadas como (Fazendo  $J = 1$  e  $Z = 4$ )

$$2(2 - t^2) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{2 + yh_{\mathbf{k}}^+}{\sqrt{1 + yh_{\mathbf{k}}^+}} + \frac{2 + yh_{\mathbf{k}}^-}{\sqrt{1 + yh_{\mathbf{k}}^-}} \right) \quad (5.27)$$

$$\mu = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{h_{\mathbf{k}}^+}{\sqrt{1 + yh_{\mathbf{k}}^+}} + \frac{h_{\mathbf{k}}^-}{\sqrt{1 + yh_{\mathbf{k}}^-}} \right). \quad (5.28)$$

Se definirmos as integrais

$$I_1 = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \left( \frac{1}{\sqrt{1 + yh_{\mathbf{k}}^+}} + \frac{1}{\sqrt{1 + yh_{\mathbf{k}}^-}} \right) d^2\mathbf{k}, \quad (5.29)$$

$$I_2 = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \left( \sqrt{1 + yh_{\mathbf{k}}^+} + \sqrt{1 + yh_{\mathbf{k}}^-} \right) d^2\mathbf{k}. \quad (5.30)$$

então podemos reescrever as equações de autoconsistência como

$$2(2 - t^2) = I_1 + I_2, \quad (5.31)$$

$$\mu = \frac{4}{y}(I_2 - I_1). \quad (5.32)$$

Assim, podemos escrever uma expressão para  $D$  em relação a  $y$

$$D = 18 - \left(\frac{8}{y} + 1\right)I_1 - I_2. \quad (5.33)$$

No estado desordenado,  $D > D_c$ , a dispersão (5.25) é mínima em  $(\pi, \pi)$ . Quando  $D \rightarrow D_c$ , o gap se anula nesse ponto, com  $h_{\pi, \pi}^{\pm} \rightarrow -1$  e  $y \rightarrow 1$ . Portanto, o  $D_c$  que marca a transição de fase quântica é

$$D_c = 18 - 9I_1 - I_2. \quad (5.34)$$

Para qualquer  $h_{\mathbf{k}}^{\pm}$  na BZ, o  $y$  crítico é dado por

$$y_{c1} = -\frac{1}{h_{\mathbf{k}}^+}; \quad y_{c2} = -\frac{1}{h_{\mathbf{k}}^-}, \quad (5.35)$$

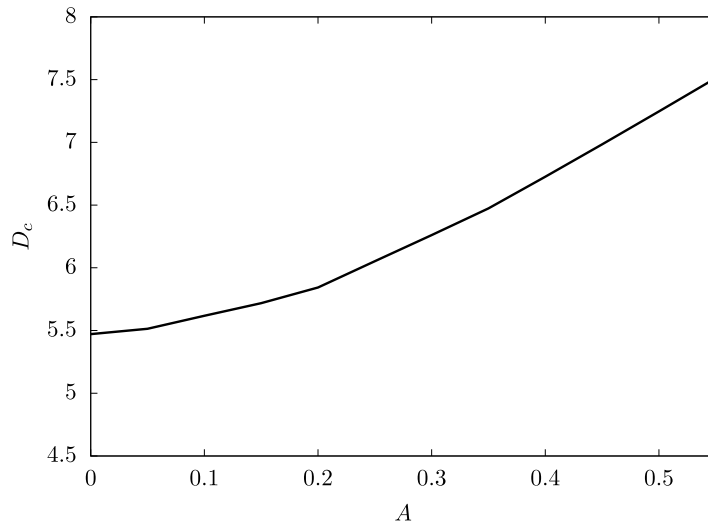
ou

$$y_{c1} = -\frac{1}{(\gamma_{\mathbf{k}} + Am_{\mathbf{k}})}; \quad y_{c2} = -\frac{1}{(\gamma_{\mathbf{k}} - Am_{\mathbf{k}})}, \quad (5.36)$$

para as frequências  $\omega_{1\mathbf{k}}$  e  $\omega_{2\mathbf{k}}$ , respectivamente. No ponto mínimo,  $y_{c1} < y_{c2}$ . Assim, encontramos  $D_c$  quando  $\omega_{1\mathbf{k}} = 0$

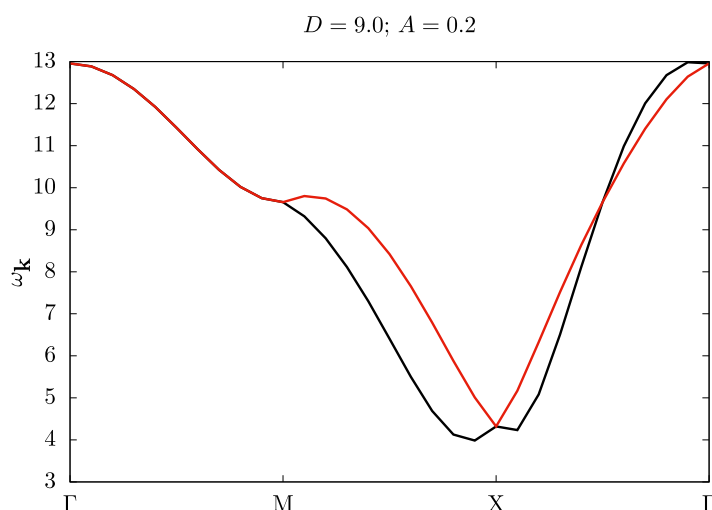
O valor de  $D_c$  é mostrado na fig.(23) em função da interação MD,  $A$ , indicando a transição de fase quântica. conforme pode ser observado, é de fortalecer o acoplamento entre os spins, contribuindo para um aumento no valor de  $D_c$ .

Figura 23 –  $D_c$  em função da interação MD,  $A$ , indicando a transição de fase quântica.



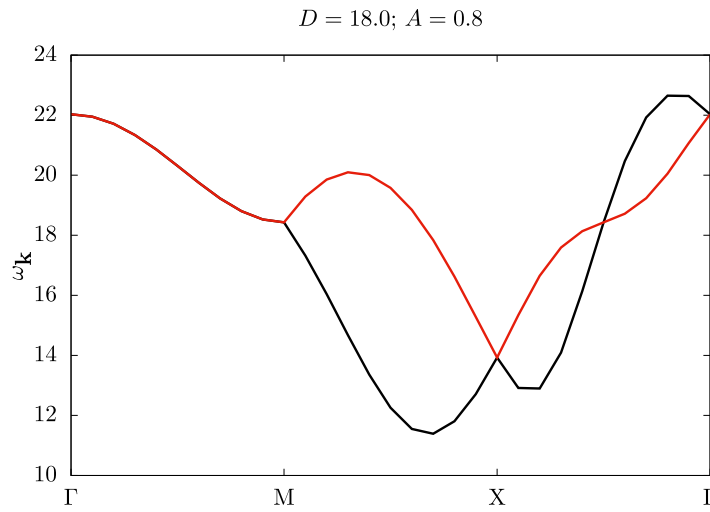
Os dois ramos da relação de dispersão, para os valores  $D = 9,0$  e  $A = 0,2$ , são mostrados na fig.(24). De acordo com o gráfico, as dispersões  $\omega_{k_1}$  e  $\omega_{k_2}$  possuem valores mínimos em diferentes valores de  $k$ . Para o caso de  $A = 0$  (ausência da interação MD), as frequências se tornam iguais, de acordo com a equação (5.25) e o modelo correspondente (anisotrópico de plano fácil) foi estudada por Wang [28]. A interação MD, na fase desordenada, provoca um deslocamento dos mínimos de cada frequência das ondas de spins para diferentes valores de  $k$ . O mínimo para  $\omega_{k_2}$  (linha vermelha) acontece em  $\mathbf{X} = (\pi, \pi)$  e para  $\omega_{k_1}$  (linha preta), o mínimo corresponde ao gap e se dá em um ponto próximo a  $\mathbf{X}$ , entre  $(\pi, 0)$  e  $(\pi, \pi)$ .

Figura 24 – Relação de dispersão de  $\omega_{k_1}$  (linha preta) e  $\omega_{k_2}$  (linha vermelha) para  $D = 9,0$  e  $A = 0,2$ . Aqui,  $\Gamma = (0, 0)$ ;  $\mathbf{M} = (\pi, 0)$  e  $\mathbf{X} = (\pi, \pi)$ .



Na fig.(25) podemos ver o efeito de pronunciamento relativo entre  $\omega_{k_1}$  (linha preta) e  $\omega_{k_2}$  (linha vermelha) no intervalo de  $(\pi, 0)$  e  $(0, 0)$ . O valor mínimo de  $\omega_{k_1}$  sofre um maior deslocamento em relação ao ponto  $\mathbf{X} = (\pi, \pi)$ . Além disso, as frequências dos mágnons aumentam com o aumento de  $D$  como pode ser verificado, comparando os eixos verticais das figuras (24) e (25).

Figura 25 – Relação de dispersão de  $\omega_{k1}$  (linha preta) e  $\omega_{k2}$  (linha vermelha) para  $D = 18,0$  e  $A = 0,8$ .



### 5.1.1 Resultados para $T$ não-nula

A anisotropia de plano fácil  $D$  induz os spins a serem distribuídos ao longo do plano  $xy$ , tal que  $\langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle \neq \langle (S^z)^2 \rangle$ . Essa relação é válida, também, para o estado fundamental da região magneticamente desordenada, indicando uma fase nemática cujo parâmetro de ordem  $Q = \left( \langle (S^z)^2 \rangle - \frac{2}{3} \right) \neq 0$ . Sabemos que o aumento da temperatura também provoca flutuações na direção dos spins, gerando, eventualmente, a transição de fase termodinâmica.

Na fig.(26) observamos o comportamento de  $\langle (S^z)^2 \rangle$  em função da temperatura  $T$ , para duas configurações dos parâmetros. Na curva preta, foram usados os valores  $A = 0,4$ ,  $J = 1,0$  e  $D = 12,0$ . Na curva vermelha, foram usados  $A = 0$ ,  $J = 1,0$  e  $D = 9,0$ . O valor de  $\langle (S^z)^2 \rangle$  para o AFM isotrópico, com spin 1, na fase paramagnética, vale  $2/3$  e ambas as curvas atingem esse valor com o aumento da temperatura. A curva vermelha representa  $\langle (S^z)^2 \rangle$  para o modelo mais simples com anisotropia de plano fácil, dado pela eq.(2.125), enquanto a curva preta mostra a influência da interação MD. De acordo com a fig.(23), essa interação fortalece o acoplamento entre os sítios, justificando o comportamento de  $\langle (S^z)^2 \rangle \rightarrow 2/3$  para uma temperatura maior, em relação ao modelo da eq.(2.125)

O parâmetro de ordem nemático  $Q = \left( \langle (S^z)^2 \rangle - \frac{2}{3} \right)$  em função da temperatura, pode ser observado na fig.(27) para os valores  $A = 0$ ,  $J = 1,0$  e  $D = 9,0$  correspondentes à curva vermelha e  $A = 0,4$ ,  $J = 1,0$  e  $D = 12,0$  para curva preta. Em ambos os casos, as transições de fase termodinâmica, nemática-paramagnética, são contínuas e acontecem em  $T = 7,65$  K (linha vermelha) e  $T = 9,79$  K (linha preta).

O artigo correspondente ao trabalho desenvolvido nesse capítulo está em pro-

Figura 26 – Gráfico de  $\langle (S^z)^2 \rangle$  em função da temperatura  $T$ . Os valores dos parâmetros são  $A = 0,4$ ,  $J = 1,0$  e  $D = 12,0$  para linha preta e  $A = 0$ ,  $J = 1,0$  e  $D = 9,0$  para linha vermelha

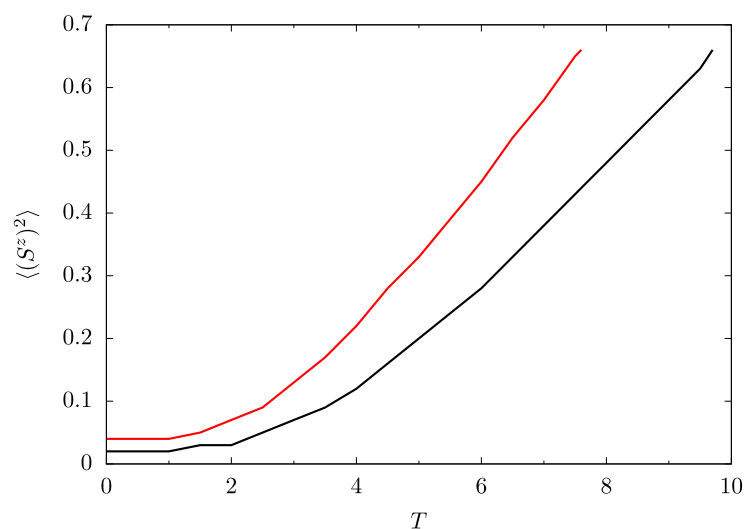
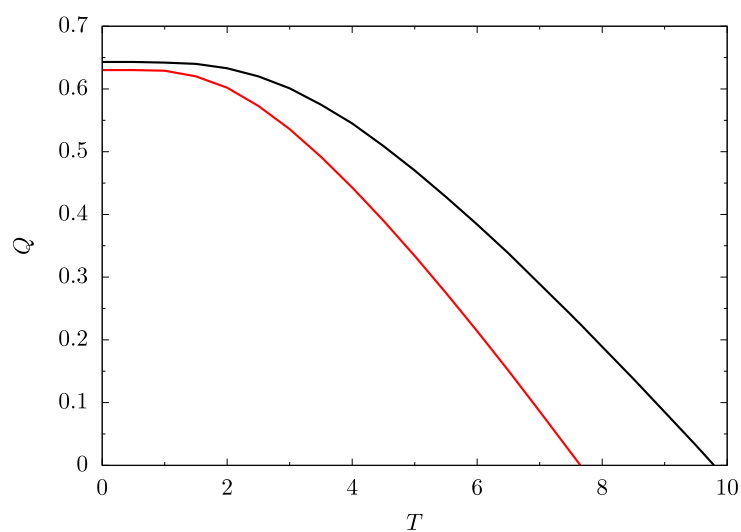


Figura 27 – Gráfico de  $Q$  em função da temperatura  $T$ . Os valores dos parâmetros são  $A = 0,4$ ,  $J = 1,0$  e  $D = 12,0$  para linha preta e  $A = 0$ ,  $J = 1,0$  e  $D = 9,0$  para linha vermelha



cesso de elaboração.

## 6 Conclusão

Nesse trabalho, abordamos 3 problemas com a estrutura base do modelo de Heisenberg com anisotropia de íon-único, do tipo plano fácil (Eq.(2.125)), com spin 1, na fase desordenada. No primeiro problema, trabalhamos o modelo do antiferromagneto proposto por Jain et.al. [27] em sua pesquisa da dinâmica dos modos de Higgs, para o composto  $\text{Ca}_2\text{RuO}_4$ , que inclui um termo de interação pseudodipolar, simétrica, anisotrópica e dependente da direção de ligação na rede quadrada (Eq. 3.1). Nele, inserimos uma interação entre os segundos vizinhos mais próximos, ao longo da diagonal da rede quadrada, a fim de gerar um modelo competitivo  $J_1 - J_2$  e investigar os efeitos da frustração magnética e da anisotropia de plano fácil, para temperatura  $T = 0$ . Analisamos a transição de fase quântica quando  $D = D_c$  e calculamos a relação de dispersão para vários valores dos parâmetros. O diagrama de fase, no regime frustrado, indica a existência de uma região intermediária em que o estado é desordenado, mesmo na ausência de anisotropia  $D = 0$ . Esse problema gerou um importante artigo [35], citado em trabalho de outros autores.

No segundo problema, estudamos o modelo da eq.(2.125) para um ferromagneto ao longo de uma cadeia unidimensional (eixo  $x$ ), incluindo uma interação antiferromagnética  $J_2$  entre segundos vizinhos mais próximos ao longo dessa cadeia, gerando um modelo competitivo  $J_1 - J_2$ , e duas interações antiferromagnéticas  $J_y$  e  $J_z$  ao longo dos eixos  $y$  e  $z$ , respectivamente, criando interações entre cadeias em uma rede cúbica simples (Eq. 4.1). Investigamos a transição de fase quântica e calculamos a relação de dispersão para alguns valores dos parâmetros e analisamos os efeitos dimensional. Concluimos que a descontinuidade no parâmetro  $D_c$  em torno do ponto crítico  $J_{2c}$  está relacionada à dimensão da rede. Mostramos que a maior influência da frustração acontece para grandes comprimentos de onda ( $\mathbf{k} \rightarrow 0$ ), em que os mínimos das relações de dispersão acontecem em pontos distintos da zona de Brillouin, quando  $J_2 > J_{2c}$  e  $J_2 < J_{2c}$ , indicando ordens distintas, no estado fundamental. O desenvolvimento analítico permitiu um ótimo ajuste aos os dados experimentais das relações de dispersão, fornecidos pelo espalhamento inelástico de nêutrons do composto  $\text{NiCl}_2\text{-4SC}(\text{NH}_2)_2$  [5]. Além disso, calculamos o gap de energia, em função da temperatura. O trabalho feito também gerou a publicação de outro artigo [41].

No último problema, investigamos o modelo da eq.(2.125) para um antiferromagneto incluindo uma interação de Moryia-Dzyaloshinskii (MD) interfacial, antissimétrica e anisotrópica, ao longo das diagonais de uma rede quadrada (Eq. 5.1). Analisamos os efeitos da interação MD na transição de fase quântica e nas relações de dispersão, para temperatura  $T = 0$ . Mostramos que ela é mais pronunciada em torno do ponto

$\mathbf{k} = (\pi, \pi)$  na zona de Brillouin, gerando um deslocamento no mínimo de um ramo da dispersão. Para temperatura finita, calculamos  $\langle (S^z)^2 \rangle$  em função da temperatura  $T$  e mostramos que existe uma transição contínua entre as fases paramagnética nemática e paramagnética clássica. O trabalho correspondente a esse último problema está em processo de elaboração para posterior publicação.

Em todos os casos, usamos o formalismo dos bósons de Schwinger SU(3), proposto por Papanicolaou [20], para trabalhar os sistemas com spin 1, na fase desordenada, com a possibilidade do surgimento da fase paramagnética nemática. Concluímos que essa abordagem se mostrou bastante adequada, especialmente no segundo problema, com a comparação dos resultados analíticos e os dados experimentais.

Finalmente, os problemas trabalhados foram importantes devido a possibilidade da sintetização de compostos que podem ser descritos por cada um desses modelos, com o advento da tecnologia e do aperfeiçoamento das técnicas experimentais.



# Referências

- [1] D.C.Mattis: *The Theory of Magnetism Made Simple*. WORLD SCIENTIFIC, 2006. Citado na página 11.
- [2] Schmidt, B. e P. Thalmeir. *Physics Reports*, 703:1–59, 2017. Citado na página 11.
- [3] S.Sachdev: *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 2011. Citado na página 12.
- [4] L. Savary, L. Balents. *Rep. Prog. Phys.*, 80:016502, 2017. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/80/1/016502>. Citado na página 12.
- [5] Zapf, V. S., D. Zocco, B. R. Hansen, M. Jaime, N. Harrison, C. D. Batista, M. Kenzelmann, C. Niedermayer, A. Lacerda e A. Paduan-Filho. *Phys. Rev. Lett.*, 96:077204, 2006. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.96.077204>. Citado 3 vezes nas páginas 12, 59 e 70.
- [6] Zvyagin, S. A., J. Wosnitza, C. D. Batista, M. Tsukamoto, N. Kawashima, J. Krzystek, V. S. Zapf, M. Jaime, N. F. Oliveira e A. Paduan-Filho. *Phys. Rev. Lett.*, 98:047205, 2007. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.98.047205>. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 59.
- [7] Chiatti, O., A. Sytcheva, J. Wosnitza, S. Zherlitsyn, A. A. Zvyagin, V. S. Zapf, M. Jaime e A. Paduan-Filho. *Phys. Rev. B*, 78:094406, 2008. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.094406>. Citado na página 12.
- [8] Huang, Ji Zhou, Yang Shen, Ming Li e Ce Wen Nan. *Journal of Applied Physics*, 110:094106, 2011. <https://doi.org/10.1063/1.3650460>. Citado na página 12.
- [9] Yin, L., J. S. Xia, V. S. Zapf, N. S. Sullivan e A. Paduan-Filho. *Phys. Rev. Lett.*, 101:187205, 2008. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.101.187205>. Citado na página 12.
- [10] Zapf, V. S., P. Sengupta, C. D. Batista, F. Nasreen, F. Wolff-Fabris e A. Paduan-Filho. *Phys. Rev. B*, 83:140405, 2011. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.140405>. Citado na página 12.
- [11] Kohama, Y., A. V. Sologubenko, N. R. Dilley, V. S. Zapf, M. Jaime, J. A. Mydosh, A. Paduan-Filho, K. A. Al-Hassanieh, P. Sengupta, S. Gangadharaiah, A. L. Chernyshev e C. D. Batista. *Phys. Rev. Lett.*, 106:037203, 2011. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.037203>. Citado na página 12.

- [12] Weickert, Franziska, Robert KÜchler, Alexander Steppke, Luis Pedrero, Michael Nicklas, Manuel Brando, Frank Steglich, Marcelo Jaime, Vivien S. Zapf, Armando Paduan-Filho, Khaled A. Al-Hassanieh, Cristian D. Batista e Pinaki Sengupta. *Phys. Rev. B*, 85:184408, 2012. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.85.184408>. Citado na página 12.
- [13] Xu, Guangyong, J. F. DiTusa, T. Ito, K. Oka, H. Takagi, C. Broholm e G. Aeppli. *Phys. Rev. B*, 54:R6827–R6830, 1996. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.54.R6827>. Citado na página 12.
- [14] Shiramura, Wakako, Ken ichi Takatsu, Hidekazu Tanaka, Kenji Kamishima, Mitsue Takahashi, Hiroyuki Mitamura e Tsuneaki Goto. *Journal of the Physical Society of Japan*, 66:1900–1903, 1997. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.66.1900>. Citado na página 12.
- [15] Batista, C. D., K. Hallberg e A. A. Aligia. *Phys. Rev. B*, 58:9248–9251, 1998. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.58.9248>. Citado na página 12.
- [16] Brambleby, Jamie, Jamie L. Manson, Paul A. Goddard, Matthew B. Stone, Roger D. Johnson, Pascal Manuel, Jacqueline A. Villa, Craig M. Brown, Helen Lu, Shalinee Chikara, Vivien Zapf, Saul H. Lapidus, Rebecca Scatena, Piero Macchi, Yu sheng Chen, Lai Chin Wu e John Singleton. *Phys. Rev. B*, 95:134435, 2017. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.134435>. Citado na página 12.
- [17] Nolting, W. e Anupuru Ramakanth: *Quantum Theory of Magnetism*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009. Citado na página 17.
- [18] Auerbach, Assa: *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. Springer-Verlag, 1994. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 21.
- [19] Lacroix, C., P. Mendels e F. Mila: *Introduction to Frustrated Magnetism*. Springer Berlin Heidelberg, 2011. <https://books.google.com.br/books?id=utSV09Zuh0kC>. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 40.
- [20] Papanicolaou, N. *Nuclear Physics B*, 305:367–395, 1988. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0550321388900739>. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 71.
- [21] Pires, A.S.T. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 435:64–68, 2017. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885316328086>. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 56.
- [22] Colpa, J.H.P. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 93:327–353, 1978. <https://EconPapers.repec.org/RePEc:eee:phsmap:v:93:y:1978:i:3:p:327-353>. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 36.

- [23] Samajdar, Rhine, Shubhayu Chatterjee, Subir Sachdev e Mathias S. Scheurer. *Phys. Rev. B*, 99:165126, 2019. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.99.165126>. Citado na página 36.
- [24] Castilla, G., S. Chakravarty e V. J. Emery. *Phys. Rev. Lett.*, 75:1823–1826, 1995. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.75.1823>. Citado na página 40.
- [25] Melzi, R., P. Carretta, A. Lascialfari, M. Mambrini, M. Troyer, P. Millet e F. Mila. *Phys. Rev. Lett.*, 85:1318–1321, 2000. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.85.1318>. Citado na página 40.
- [26] Carretta, P., N. Papinutto, C. B. Azzoni, M. C. Mozzati, E. Pavarini, S. Gonthier e P. Millet. *Phys. Rev. B*, 66:094420, 2002. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.66.094420>. Citado na página 40.
- [27] Jain, A., M. Krautloher e J. et al. Porras. *Nature Phys*, 13:633–637, 2017. <https://doi.org/10.1038/nphys4077>. Citado 3 vezes nas páginas 41, 46 e 70.
- [28] Wang, Han Ting e Yupeng Wang. *Phys. Rev. B*, 71:104429, 2005. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.71.104429>. Citado 5 vezes nas páginas 43, 49, 54, 65 e 67.
- [29] Zhang, Zhifeng, Keola Wierschem, Ian Yap, Yasuyuki Kato, Cristian D. Batista e Pinaki Sengupta. *Phys. Rev. B*, 87:174405, 2013. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.174405>. Citado na página 46.
- [30] Wang, F., S. Kivelson e DH Lee. *Nature Phys*, 11:959–963, 2015. <https://doi.org/10.1038/nphys3456>. Citado na página 47.
- [31] Ma, Fengjie, Zhong Yi Lu e Tao Xiang. *Phys. Rev. B*, 78:224517, 2008. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.224517>. Citado na página 47.
- [32] Stanek, Daniel, Oleg P. Sushkov e Götz S. Uhrig. *Phys. Rev. B*, 84:064505, 2011. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.84.064505>. Citado na página 47.
- [33] Baum, A., H. N. Ruiz, N. Lazarević, Yao Wang, T. Böhm, R. Hosseinian Ahangharnejhad, P. Adelman, T. Wolf, Z. V. Popović, B. Moritz e et al. *Communications Physics*, 2:2399–3650, 2019. <http://dx.doi.org/10.1038/s42005-019-0107-y>. Citado na página 49.
- [34] Jiang, H. C., F. Krüger, J. E. Moore, D. N. Sheng, J. Zaanen e Z. Y. Weng. *Phys. Rev. B*, 79:174409, 2009. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.79.174409>. Citado na página 49.

- [35] Pimenta, Talles H. e A.S.T. Pires: *Nematic phase in the spin one two dimensional anisotropic antiferromagnet*. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 465:58–63, 2018. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030488531733620X>. Citado 2 vezes nas páginas 49 e 70.
- [36] Müller, P., J. Richter e D. Ihle. *Phys. Rev. B*, 95:134407, 2017. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.134407>. Citado 2 vezes nas páginas 51 e 56.
- [37] Matsuda, Masaaki, Kenji Ohoyama e Masayoshi Ohashi. *Journal of the Physical Society of Japan*, 68:269–272, 1999. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.68.269>. Citado na página 51.
- [38] Fong, H. F., B. Keimer, J. W. Lynn, A. Hayashi e R. Ji Cava. *Phys. Rev. B*, 59:6873–6876, 1999. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.59.6873>. Citado na página 51.
- [39] Kuzian, R. O., S. Nishimoto, S. L. Drechsler, J. Málek, S. Johnston, Jeroen van den Brink, M. Schmitt, H. Rosner, M. Matsuda, K. Oka, H. Yamaguchi e T. Ito. *Phys. Rev. Lett.*, 109:117207, 2012. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.109.117207>. Citado na página 51.
- [40] Psaroudaki, C., S. A. Zvyagin, J. Krzystek, A. Paduan-Filho, X. Zotos e N. Papanicolaou. *Phys. Rev. B*, 85:014412, 2012. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.85.014412>. Citado 3 vezes nas páginas 51, 56 e 59.
- [41] Pimenta, Talles H. e A.S.T. Pires: *Effect of interchain coupling in the frustrated spin one heisenberg model with easy plane single ion anisotropy*. *Solid State Communications*, 314–315:113947, 2020. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0038109820300788>. Citado 2 vezes nas páginas 60 e 70.
- [42] Bode, M., M. Heide, K. von Bergmann, P. Ferriani, S. Heinze, G. Bihlmayer, A. Kubetzka, O. Pietzsch, S. Blügel e R. Weisendanger. *Nature*, 447:190, 2007. <https://doi.org/10.1038/nature05802>. Citado na página 61.
- [43] Ferriani, P., K. von Bergmann, E. Y. Vedmedenko, S. Heinze, M. Bode, M. Heide, G. Bihlmayer, S. Blügel e R. Wiesendanger. *Phys. Rev. Lett.*, 101:027201, 2008. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.101.027201>. Citado na página 61.
- [44] Zimmermann, Bernd, Marcus Heide, Gustav Bihlmayer e Stefan Blügel. *Phys. Rev. B*, 90:115427, 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.115427>. Citado na página 61.

- [45] Schwefflinghaus, B., B. Zimmermann, M. Heide, G. Bihlmayer e S. Blügel. *Phys. Rev. B*, 94:024403, 2016. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.94.024403>. Citado na página 61.
- [46] Moon, Jung Hwan, Soo Man Seo, Kyung Jin Lee, Kyoung Whan Kim, Jisu Ryu, Hyun Woo Lee, R. D. McMichael e M. D. Stiles. *Phys. Rev. B*, 88:184404, 2013. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.184404>. Citado na página 61.
- [47] Cordeiro, C.E., E.V. de Melo e M.A. Continentino. *Z. Phys. B.(Condensed Matter)*, 85:307–310, 1991. <https://doi.org/10.1007/BF01313233>. Citado na página 61.
- [48] de Sousa, J.Ricardo, Douglas F. de Albuquerque e I.P. Fittipaldi. *Physics Letters A*, 191:275–278, 1994. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375960194901392>. Citado na página 61.
- [49] Lacerda, F., J. Ricardo de Sousa e I. P. Fittipaldi. *Journal of Applied Physics*, 75:5829–5831, 1994. <https://doi.org/10.1063/1.355582>. Citado na página 61.
- [50] Benyoussef, A, N Boccara e M Saber. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 19:1983–1991, 1986. <https://doi.org/10.1088/0022-3719/19/12/012>. Citado na página 61.
- [51] Thio, Tineke e Amnon Aharony. *Phys. Rev. Lett.*, 73:894–897, 1994. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.73.894>. Citado na página 61.
- [52] Zhang, Qi, Guo Zhu Wei e Ya Qiu Liang. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 253:45–50, 2002. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885302000537>. Citado na página 61.
- [53] Jiang, Wei, Guo zhu Weib, An Duc e Lian quan Guoa. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 313:503–512, 2002. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437102009597>. Citado na página 61.
- [54] Htoutou, K., A. Oubelkacem, A. Ainane e M. Saber. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 288:259–266, 2005. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885304010376>. Citado na página 61.
- [55] Pires, A.S.T. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 223:304–308, 2001. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885300012762>. Citado na página 61.

- [56] Sun, Guang Hou e Xiang Mu Kong. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 370:585–590, 2006. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2006.03.025>. Citado na página 72.
- [57] Silva, Joeliton Barros da: *Modelo de Heisenberg com campo aleatório e interação Dzyaloshinskii-Moriya*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Sergipe, 2018. Citado na página 72.
- [58] Blundell, Stephen: *Magnetism in Condensed Matter*. Oxford University Press, 2001. Citado na página 72.
- [59] Pereira, Afranio Rodrigues e Antonio Sérgio Teixeira Pires: *Teoria Quântica de Campos em Sistemas Magnéticos de Baixas Dimensões*. dpf-ufv. Citado na página 72.