

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

Propriedades Termodinâmicas de Sistemas Magnéticos  
Frustrados

Griffith Mendonça Andrade Sousa

Belo Horizonte  
Agosto/2013

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

**Propriedades Termodinâmicas de Sistemas Magnéticos  
Frustrados**

Griffith Mendonça Andrade Sousa

Orientador: Dr. Antônio Sérgio Teixeira Pires  
Agência Financiadora: FAPEAM

Tese apresentada ao Programa de Pós-  
Graduação em Física como requisito parcial à  
obtenção do título de DOUTOR EM FÍSICA

Belo Horizonte  
Agosto/2013

Sobrenome, Nome

Título do trabalho. Local de Publicação,  
Entidade publicadora, data de publicação.

Páginas.

Inclui Bibliografia

.....

Palavras chaves.

# DEDICATÓRIA

Dedico aos meus pais, familiares e amigos...

**Griffith Mendonça Andrade Sousa**

Tese aprovada em \_\_\_\_ de \_\_\_\_\_ de 2013, pela banca examinadora constituída dos seguintes membros:

Banca Examinadora:

---

Prof. Dr. Antônio Sergio Teixeira Pires  
Orientador  
UFMG

---

Prof. Dr.  
Examinador Interno  
UFMG

---

Prof. Dr.  
Examinador Externo

---

Prof. Dr.  
Examinador Externo

---

Prof. Dr.  
Examinador Externo

# **AGRADECIMENTOS**

Agradeço aos professores que colaboraram com esse trabalho, em especial ao Antonio Sérgio por ter me orientado.

A FAPEAM, CAPES e CNPQ por financiarem este trabalho.

# RESUMO

Neste trabalho, apresentamos algumas propriedades termodinâmicas do modelo de Heisenberg anisotrópico com interações antiferromagnéticas em duas e três dimensões. Primeiramente, usando a teoria de ondas de spin linear, determinamos o diagrama de fase quântico do modelo de Heisenberg ferrimagnético em uma rede quadrada com uma anisotropia espacial  $\Theta$  entre os segundos vizinhos. Mostramos que a anisotropia entre os segundos vizinhos pode induzir uma fase magneticamente desordenada no caso  $(1,1/2)$ , somente quando a frustração entre os spins  $1/2$  é maior que a frustração entre os spins  $1$ . Em seguida, usando a teoria de ondas de spin modificada, estudamos o modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin-1, frustrado em uma rede quadrada. Nesse modelo, consideramos uma anisotropia de eixo fácil e uma anisotropia de *exchange* entre os primeiros vizinhos. Determinamos as possíveis regiões desordenadas e calculamos a temperatura crítica do sistema como função dos parâmetros de anisotropia. Na parte final da tese, usamos a técnica do *bond operator* para estudar o modelo de Heisenberg antiferromagnético (spin 1) com anisotropia de plano fácil. Primeiramente, realizamos um estudo da rede cúbica com interação entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos, no qual apresentamos o diagrama de fase do sistema em temperatura zero e finita. Mostramos que a interação entre terceiros vizinhos induz uma fase desordenada no diagrama de fase quântico. Em seguida, estudamos a rede cúbica com interação entre primeiros vizinhos e com acoplamento  $\lambda$  entre os planos. Consideramos o modelo quase bidimensional ( $\lambda \ll 1$ ) com as anisotropias de plano fácil  $D$  e intra-plano  $D_x$ . Aplicando um campo magnético externo  $h$  na direção do eixo  $z$ , calculamos a magnetização  $m$  na direção do eixo  $z$  e a magnetização  $m_x$  perpendicular ao eixo  $z$ . Nossos resultados indicam que a anisotropia  $D_x$  reduz  $m_x$  e a temperatura crítica  $T_c$ , enquanto  $\lambda$  e  $h$  induzem ordem de longo alcance no sistema.

# ABSTRACT

In this work, we present some thermodynamic properties of the anisotropic Heisenberg model with antiferromagnetic interactions in two and three dimensions. First, we study the zero temperature properties of the two-dimensional spatially anisotropic ferrimagnet with competing interactions, using the linear spin-wave theory, and considering pairs of mixed-spins in the set  $(1/2, 1, 3/2)$ . For some values of the anisotropy parameter, we find a small region magnetically disordered in the phase diagram. Using a modified spin wave theory, the ordered phases of the two dimensional  $S=1$  antiferromagnet with next and near next neighbor exchange interactions and easy axis single ion anisotropy on the square lattice are studied. We calculate the phase diagram at  $T = 0$ , and some thermodynamic quantities at finite temperatures. In the final part of the thesis, we use the bond operator technique to study the antiferromagnetic Heisenberg model with spin  $S=1$  with easy plane anisotropy. We study the effects of frustration between nearest, next-nearest neighbor and next-next-nearest neighbors (NNN) of the quantum  $S=1$  anisotropic antiferromagnetic Heisenberg model on a simple cubic lattice with single ion anisotropy. We calculate the phase diagram at zero temperature and the gap as a function of temperature in the disordered paramagnetic phase. Finally, we study the cubic lattice with interaction between nearest neighbors and a coupling between planes. We have considered an in-plane single ion anisotropy  $D$  and an intra-plane anisotropy  $D_x$ . Applying an external magnetic field  $h$  in the  $z$  direction, we calculate: *i*) the magnetization  $m$  in the direction of the field. *ii*) the magnetization  $m_x$  in the plan perpendicular to the  $z$  axis. Our results indicate that the anisotropy  $D_x$  reduces  $m_x$  and critical temperature  $T_c$ , while  $\lambda$  and  $h$  induce long-range order in the system.

## **PUBLICAÇÕES**

1. The spatially anisotropic frustrated Heisenberg ferrimagnetic on a square lattice  
Solid State Communications, Volume 152, Issue 19, October 2012, Pages 1850-1854

M. A. Griffith, A.S.T. Pires, J.R. Sousa.

2. Frustrated antiferromagnetic spin 1 Heisenberg model with single ion anisotropy on a simple cubic lattice

Solid State Communications, Volume 152, Issue 13, July 2012, Pages 1094-1097

M. A. Griffith, A.S.T. Pires.

## **ARTIGOS SUBMETIDOS**

1. The magnetic properties of a quasi two-dimensional spin 1 easy axis Heisenberg antiferromagnet with competing interactions

M. A. Griffith, and A. S. T. Pires.

Journal of Magnetism and Magnetic Materials 2013.

2. Phase diagram of the quasi-two dimensional antiferromagnet with single ion anisotropies.

M. A. Griffith, and A. S. T. Pires.

Journal of Magnetism and Magnetic Materials 2013.

# Índice

AGRADECIMENTOS . . . . .	<i>i</i>
RESUMO . . . . .	<i>ii</i>
ABSTRACT . . . . .	<i>iii</i>
PUBLICAÇÕES . . . . .	<i>iv</i>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Modelos de spin e a frustração magnética.</b>	<b>4</b>
2.1 Interação de <i>exchange</i> . . . . .	4
2.2 Frustração magnética . . . . .	8
2.2.1 Redes bidimensionais frustradas . . . . .	10
2.2.2 Fase desordenada e o estado líquido de <i>spin</i> . . . . .	12
2.3 Anisotropia de íon único . . . . .	13
<b>3 Modelo ferrimagnético <math>J_1 - J_2^{S_1} - J_2^{S_2}</math> na rede quadrada</b>	<b>17</b>
3.1 Fase ferrimagnética . . . . .	17
3.2 Fase colinear . . . . .	21
3.3 Resultados . . . . .	24
3.3.1 Modelo isotrópico . . . . .	24
3.3.2 Modelo anisotrópico . . . . .	27
3.4 Conclusão . . . . .	29
<b>4 Modelo <math>J_1 - J_1' - J_2</math> antiferromagnético <math>2d</math> com anisotropia de eixo fácil</b>	<b>30</b>
4.1 Fase antiferromagnética . . . . .	31
4.2 Fase colinear . . . . .	34
4.3 Resultados . . . . .	36
4.4 Conclusão . . . . .	46
<b>5 Modelo de Heisenberg com anisotropia de plano fácil</b>	<b>48</b>
5.1 Modelo de Heisenberg $J_1 - J_2 - J_3$ na rede cúbica . . . . .	48

5.1.1	Técnica do <i>bond operator</i> . . . . .	49
5.1.2	Resultados. . . . .	53
5.1.3	Conclusão . . . . .	57
5.2	Modelo de Heisenberg antiferromagnético quase 2D . . . . .	58
5.2.1	Introdução . . . . .	58
5.2.2	Equações auto-consistente. . . . .	59
5.2.3	Resultado . . . . .	62
5.2.4	Conclusão . . . . .	70
<b>6</b>	<b>Conclusões e perspectivas futuras</b>	<b>72</b>

## Lista de figuras

2.1	Células unitárias das redes triangular (a) e quadrada (b). . . . .	9
2.2	Magnetização de sub-rede $m_a$ como função do parâmetro $\eta$ . Na região onde $\eta < 0.5$ , o sistema se encontra na fase Néel. Para $\eta > 0.5$ , o sistema se encontra na fase $(0,\pi)$ ou $(\pi,0)$ com ângulos livres . . .	11
2.3	Magnetização de sub-rede $m_a$ como função do parâmetro $\eta$ . Na região onde $\eta < 0.38$ , o sistema está na fase de Néel. Para $\eta > 0.60$ , o sistema se encontra na fase colinear. . . . .	12
3.1	Fases clássicas no modelo ferrimagnético bidimensional na rede quadrada [74]. <i>Spins</i> $S_1 = 1$ estão representados por setas maiores, enquanto <i>spins</i> $1/2$ são representados por setas menores. a) Fase ferrimagnética (Fr). b) Fase <i>canted</i> (C). c) fase Colinear (CL) . . .	16
3.2	Fase ferrimagnética (Fr) . . . . .	17
3.3	Fase colinear (CL) . . . . .	21
3.4	Magnetização de sub-rede "a" nas fases (AF) e (CL) como função de $\eta$ para os casos de <i>spin</i> $1/2$ e 1 na rede quadrada. Linha preta se refere ao caso <i>spin</i> $1/2$ , enquanto a linha azul representa a magnetização para o caso de <i>spin</i> 1 . . . . .	24
3.5	Magnetização de sub-rede "a" e "A" nas fases (Fr) e (CL) como função de $\eta$ para o caso $(1,1/2)$ na rede quadrada. Linha representa a magnetização de sub-rede $m_A$ na fase (Fr), enquanto na fase (CL), os triângulos pretos representam a magnetização $m_A$ , e os triângulos brancos representam $m_a$ . . . . .	25

3.6	Magnetização de sub-rede "a" e "A" nas fases (Fr) e (CL) para o caso de pares de <i>spin</i> (3/2,1) na rede quadrada. Linha preta representa a magnetização de sub-rede $m_a$ na fase (Fr), enquanto as figuras geométricas são as magnetizações de sub-rede $m_A$ e $m_a$ , respectivamente na fase (CL). Triângulos pretos, magnetização $m_A$ enquanto os triângulos brancos representam $m_a$ . . . . .	26
3.7	Magnetização de sub-rede "a" e "A" nas fases (Fr) e (CL) para o caso de pares de <i>spin</i> (3/2,1/2) na rede quadrada. Linha preta representa a magnetização de sub-rede $m_a$ na fase (Fr), enquanto as figuras geométricas são as magnetizações de sub-rede $m_A$ e $m_a$ respectivamente na fase (CL). Triângulos pretos, magnetização $m_A$ enquanto os triângulos brancos, representam $m_a$ . . . . .	27
3.8	Diagrama de fase no plano $\eta$ - $\Theta$ para o caso (1,1/2) anisotrópico na rede quadrada. Frustração entre os <i>spins</i> -1 sempre maior que a frustração entre <i>spins</i> 1/2. Círculos representam a linha de transição de fase entre a fase (Fr) e (CL) . . . . .	28
3.9	Diagrama de fase para o caso (1,1/2) anisotrópico na rede quadrada. Frustração entre os <i>spins</i> 1/2 maior que a frustração entre <i>spins</i> 1. Círculos representam a linha de transição entre a fase ferrimagnética e a fase desordenada. Triângulos representam linha de transição entre a fase colinear e a desordenada. A região magneticamente desordenada é representada pela região cinza . . . . .	29
4.1	Fase antiferromagnética de Néel a). Fase colinear b). . . . .	30
4.2	Diagrama de fase. Magnetizações de sub-rede $m_a$ nas fases (AF) e (CL) para vários valores de $D$ , $\lambda = 1$ . Quadrados $D = 0.1$ , círculos $D = 0.5$ , triângulo $D = 1$ , diamante $D = 1.5$ , estrela $D = 2$ e hexágonos $D = 2.37$ ). . . . .	36

4.3	Frustração crítica $\eta_c$ como função de $D$ ( $\lambda=1$ ) à temperatura zero. Quadrados representam a linha da transição da fase (AF) para (QP) e círculo (CL) para (PQ) . . . . .	38
4.4	Frustração crítica $\eta_c$ como função de $\lambda$ em $T = 0$ . As Linhas de transição de fase (AF) para (PQ) são representadas pelas figuras pretas, enquanto as transições da (CL) para (PQ) é representada pelas figuras brancas. Círculos $D = 0.5$ , triângulo $D = 1$ , estrela $D = 1.5$ e linha tracejada $D = 2.37$ . . . . .	32
4.5	Magnetização de sub-rede $m_a$ como função de $\lambda$ em $T = 0$ para a fase (AF). Quadrado, $D = 0.1$ e $\eta = 0$ , círculo, $D = 0.5$ e $\eta = 0$ , triângulo $D = 1$ e $\eta = 0$ , diamante $D = 0.1$ e $\eta = 0.1$ , estrela $D = 0.5$ e $\eta = 0.1$ , pentágono $D = 1$ , $\eta = 0.1$ . . . . .	40
4.6	Gap da fase (AF) como função de $D$ para $\lambda$ fixo e $\eta = 0$ . Quadrado $\lambda = 1$ , círculo $\lambda = 0.8$ , triângulo $\lambda = 0.6$ e diamante $\lambda = 0.4$ . . . . .	41
4.7	Magnetização de sub-rede $m_a$ como função da temperatura $T$ . Quadrado, $D = 0.1$ , $\eta = 0$ e $\lambda = 1$ . Círculo, $D = 0.5$ , $\eta = 0$ e $\lambda = 1$ . Triângulo, $D = 0.1$ , $\eta = 0.1$ e $\lambda = 0.8$ . Diamante, $D = 0.5$ , $\eta = 0.1$ e $\lambda = 0.8$	43
4.8	a) Temperatura crítica como função de $D$ na fase (AF). a) $\eta = 0$ , onde, quadrado $\lambda = 1$ , círculo $\lambda = 0.8$ , triângulo $\lambda = 0.6$ , diamante $\lambda = 0.4$ e estrela $\lambda = 0.2$ . b). Temperatura crítica como função de $D$ na fase (AF). $\eta = 0.1$ , onde, quadrado $\lambda = 1$ , círculo $\lambda = 0.8$ , triângulo $\lambda = 0.6$ , diamante $\lambda = 0.4$ e estrela $\lambda = 0.2$ . . . . .	44
4.9	Temperatura crítica como função de $\eta$ nas fases (AF) e (CL). Sendo, Quadrado, $D = 0.5$ e $\lambda = 1$ . Círculo, $D = 1$ e $\lambda = 1$ . A fase paramagnética (PM) também foi mostrada . . . . .	45
4.10	Calor específico em baixas temperaturas na fase (AF) para $D = 0.5$ e $\eta = 0.1$ . Quadrado $\lambda = 1$ , círculo $\lambda = 0.8$ , triângulo $\lambda = 0.6$ e diamante $\lambda = 0.4$ . . . . .	46

5.1	Anisotropia crítica $D_c$ como função $\eta$ . Os valores de $D_c$ das fases (AF) e (CL) quando $\alpha = 0.0$ são representados por quadrados e diamantes, respectivamente. O caso $\alpha = 0.1$ é representado por triângulos (AF) e círculos (CL) . . . . .	54
5.2	Temperatura crítica $T_c$ como função de $D$ . A temperatura crítica do modelo com $J_2$ e $J_3$ igual a zero é representado por diamantes para fase (AF). A temperatura crítica para o caso frustrado sem a interação entre os terceiros vizinhos ( $\alpha = 0.0$ ) é representado por quadrados para a fase (AF) com $\eta = 0.2$ e hexágonos para a fase (CL) com $\eta = 0.42$ . O caso com interação entre segundos e terceiros vizinhos com $\alpha = 0.1$ é representado por triângulos para a fase (AF) ( $\eta = 0.2$ ) e círculos para a fase (CL) ( $\eta = 0.42$ ) . . . . .	55
5.3	Temperatura crítica $T_c$ como função de $\eta$ para $D = 5$ . Temos os seguintes casos; $\alpha = 0.0$ é representado por quadrados para a fase (AF) e hexágonos na fase (CL); $\alpha = 0.1$ é representado por círculos para a fase (AF) e diamantes na fase (CL)). Entre as regiões (AF) e (CL) existe a fase (PM) . . . . .	56
5.4	$Gap \Delta$ como função de $T$ para $D = 15$ . Para $\eta = 0.0$ (círculos), $\eta = 0.2$ e $\alpha = 0.0$ (quadrados), $\eta = 0.2$ e $\alpha = 0.1$ (triângulos), $\eta = 0.42$ e $\alpha = 0.0$ (hexágonos), e $\eta = 0.42$ e $\alpha = 0.1$ (pentágonos). . . . .	57
5.5	Magnetização $m$ como função de $h$ . As cores Azul, preto, vermelho e verde representam os casos $D = 6, 7, 8$ e $10$ respectivamente. Fixamos $\lambda = 0.01$ . Os casos de $D_x = 0.01, 0.1$ e $0.8$ são representados por quadrados, círculos e triângulos . . . . .	62
5.6	Magnetização $m_x$ como função de $h$ para $\lambda = 0.01$ . As curvas nas cores Azul, preto, vermelho e verde representam os casos $D = 6, 7, 8$ e $10$ , respectivamente. Os casos de $D_x = 0.01, 0.1$ e $0.8$ são representados por quadrados, círculos e triângulos respectivamente. . . . .	63

5.7	Magnetização $m_x$ como função de da anisotropia $D$ para $h = 5$ , $D_x = 0.001$ e $T = 0$ . Quadrados $\lambda = 0.01$ , círculos $\lambda = 0.1$ e triângulos $\lambda = 0.2$ .	64
5.8	Anisotropia crítica como função de $D_x$ , caso $\lambda = 0.01$ , $h = 1.5$ e $T = 0$ .	65
5.9	Magnetização $m_x$ como função da temperatura $T$ para $h = 5$ . Os casos $D = 6, 7$ e $8$ são representados pelas cores azul, preto e vermelho, respectivamente. Os casos $D_x = 0.01, 0.5$ e $0.8$ são representados por linhas cheias, pontilhada e tracejada, respectivamente. Fixamos $\lambda = 0.01$ .	66
5.10	Magnetização $m$ como função da temperatura $T$ . Fixamos $\lambda = 0.01$ . Os casos $D = 6, 7$ e $8$ são representados pelas cores azul, preto e vermelho, respectivamente. Os casos $D_x = 0.01, 0.5$ e $0.8$ são representados por linha cheia, pontilhada e tracejada, respectivamente.	67
5.11	Temperatura crítica $T_c$ como função do campo magnético externo $h$ . Fixamos $D_x = 0.5$ e $\lambda = 0.01$ . Quadrado $D = 6$ , círculo $D = 7$ e triângulo $D = 10$ .	68
5.12	Temperatura crítica $T_c$ como função do acoplamento entre planos $\lambda$ . Fixamos $h = 1.5$ e $D = 7$ . Quadrado, $D_x = 0.8$ e círculo, $D = 0.01$	69
5.13	Calor específico $C_v$ como função da temperatura $T$ . Fixamos $\lambda = 0.01$ . Os casos $D = 6, 7$ e $8$ são representados pelas cores azul, preto e vermelho, respectivamente. Os casos $D_x = 0.01, 0.5$ e $0.8$ são representados por linha cheia, pontilhada e tracejada, respectivamente.	70

# Capítulo 1

## Introdução

As pesquisas relacionadas com o magnetismo de baixas dimensões evoluíram juntamente com o desenvolvimento da mecânica quântica, por meio de duas conquistas teóricas inovadoras: Primeiro, a introdução do modelo de Ising em uma dimensão em 1929 [1], e segundo, o cálculo exato do estado fundamental do modelo de Heisenberg em uma dimensão através do método do *ansatz* de Bethe 1931 [2].

Nas quatro décadas seguintes muitos resultados exatos foram derivados. O mais notável deles sem dúvida é o teorema de Mermin-Wagner. Esse teorema prova que os sistemas com simetria contínua não exibem quebra espontânea de simetria em temperatura finita.

O capítulo 1 será dedicado à revisão dos conceitos básicos do magnetismo isolante. Apresentaremos também alguns resultados teóricos sobre sistemas de spins clássicos (tipo Ising) e quânticos (tipo Heisenberg) com ênfase especial no ordenamento antiferromagnético (AF).

Na década de 80, as pesquisas em sistemas magnéticos de baixa dimensão voltaram a receber muita atenção depois da descoberta dos supercondutores de alta temperatura [5], cuja descrição teórica ainda representa um grande desafio. Do ponto de vista experimental a busca por materiais que exibem o comportamento da supercondutividade de alta temperatura é feita de forma empírica, já que não existe uma teoria completa para este fenômeno.

Os Cupratos são compostos que podem exibir o fenômeno da supercondutividade de alta temperatura. Nesses materiais, a dinâmica dos portadores de carga, portanto, o estado supercondutor, é eminentemente determinado nos planos  $CuO_2$ . A liga  $La_{2-x}(Sr,Ba)_xCuO_4$  é um exemplo de supercondutor formado por planos de  $CuO_4$  [5]. Este composto puro ( $x = 0$ ),  $La_2CuO_4$ , é um isolante quase bidimensional e possuem uma ordem de longo alcance antiferromagnética abaixo da temperatura crítica  $T_c$ , conhecida como temperatura de Néel. O processo de dopagem do composto  $La_2CuO_4$ , por meio de elementos alcalinos, como  $(Sr,Ba)$ , destrói rapidamente a ordem antiferromagnética quando a

dopagem  $x$  atinge um valor crítico  $x_{Ic}$ . Esse processo favorece o aparecimento de estados desordenados de *spins* nos planos formados por  $CuO_2$  e o desaparecimento da fase antiferromagnética (isolante) é acompanhada pelo surgimento da fase de *pseudo-gap* (condutor não convencional. i.e. apresenta resistividade linear com a temperatura, funções de correlação com decaimento tipo lei de potência, etc...) e da fase supercondutora em temperaturas inferiores a  $36K$ .

Este fenômeno foi estudado por meio de várias abordagens teóricas, por exemplo, teoria de bósons de Schwinger [6] e modelo sigma não-linear [7].

A presença do estado desordenado, juntamente com o aparecimento da fase supercondutora, forma a base da seguinte conjectura: O estudo de sistemas magnéticos que possuem estado fundamental desordenado é muito importante para uma teoria definitiva dos supercondutores de alta temperatura. Modelos de spin magneticamente frustrados são candidatos idéias para tais sistemas. A física de sistemas magnéticos frustrados tornou-se mais atrativa nos últimos anos, tanto do ponto de vista experimental quanto teórico. Sistemas com interações competitivas podem se tornar frustrados. Sistemas frustrados exibem novas fases magnéticas, tais como *Quantum spin liquid* (QSL) [8], *spin ice* [9] e *spin glass* [10]. Anderson [11] propôs que a fase (QSL) está por trás da supercondutividade de altas temperaturas.

Assim como a supercondutividade, estas fases magnéticas possuem um grande potencial científico. Embora a grande motivação inicial para estudar sistemas frustrados esteja relacionado com supercondutores, o estudo desses sistemas não é de uso exclusivo da área da supercondutividade de alta temperatura. O capítulo 2 será dedicado à revisão dos conceitos básicos de sistemas frustrados e do magnetismo isolante.

Os trabalhos desenvolvidos nessa tese de doutorado têm como principal objetivo aplicar técnicas de bosonização em sistemas de spins, inteiros e semi-inteiros, em duas e três dimensões. Nosso principal objetivo é determinar o diagrama de fase do sistema. Através do diagrama de fase, identificaremos possíveis regiões magneticamente desordenadas. A região magneticamente desordenada quando tratada em temperatura nula, é uma boa candidata para suportar um estado (QSL).

No capítulo 3, usaremos a teoria de ondas de spin linear [12] em temperatura zero, para estudar o diagrama de fase de um sistema ferrimagnético frustrado em

uma rede quadrada. Nesse estudo, consideramos que o sistema é formado por *spins* mistos, e com uma anisotropia espacial entre segundos vizinhos. No capítulo 4, estudaremos o diagrama de fase do modelo de Heisenberg antiferromagnético de *spin* 1 em uma rede quadrada com dois tipos de anisotropias: Anisotropia espacial de *exchange* entre primeiros vizinhos e uma anisotropia de eixo fácil. Estudaremos o sistema em temperatura zero e finita. No capítulo 5, aplicamos a técnica do *bond operator* [13] em sistemas de *spin* 1. Na seção 5.1 estudaremos o caso tridimensional com interação entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos. Na seção 5.2, trataremos o caso quase bidimensional com campo magnético externo. Finalmente no capítulo 6, faremos uma conclusão geral dos principais resultados obtido e perspectivas futuras.

## Capítulo 2

### Modelos de *spin* e a frustração magnética

#### 2.1 Interação de *exchange*

A descrição quântica de um material que apresenta propriedades magnéticas envolve o conhecimento da natureza dos portadores dos momentos magnéticos, a origem da interação entre eles e a termodinâmica do sistema constituído por um conjunto de portadores de momento magnético em interação. Os portadores de momento magnético são os elétrons dos átomos que formam o material. Heisenberg 1926 [14] assumiu que a principal contribuição para o forte magnetismo da matéria vem da interação entre os *spins* dos elétrons.

Basicamente, o modelo, usado na descrição do magnetismo isolante, consiste de um sistema de spins localizados nos sítios de uma rede cristalina e acoplados via interação de origem eletrostática. A interação eletrostática entre elétrons das camadas externas de íons adjacentes, tratada quanticamente via teoria de perturbação, produz uma separação dos níveis de energia eletrônicos, que pode ser entendida como a quantidade de energia necessária para trocar os elétrons do átomo ( para uma dedução detalhada ver [15]). Considere por exemplo um sistema de dois elétrons [16,17], especificado pelo seguinte Hamiltoniano

$$H_{12} = H_0 + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} + H' \quad (2.1),$$

onde  $H_0 = (p_1)^2/2m_e + (p_2)^2/2m_e$  é o hamiltoniano do sistema de elétrons livres, o segundo termo representa a energia de interação entre os elétrons e o termo  $H'$  é a energia de interação entre os elétrons e o núcleo.

O princípio de exclusão de Pauli obriga que a função de onda total dos dois elétrons,  $\psi^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) \pm \phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1)]\chi^\pm$ , associada ao estado singlete e tripleto seja anti-simétrica com relação a troca de coordenadas espaciais e *spinoriais*. As funções  $\phi$  e  $\chi$  representam as funções de onda espacial e *spinorial*.

Os índices "+" e "-" em  $\psi$  e  $\chi$  denotam as funções de onda associada ao estado singleto e tripleto respectivamente. Usando teoria de perturbação em primeira ordem para tratar o efeito da interação entre os elétrons, obtêm-se as auto-energias dadas por

$$E^{\pm} = E_0 \pm J_{12} \quad (2.2)$$

com

$$J_{12} = \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \phi_1^*(\vec{r}_1) \phi_2^*(\vec{r}_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \phi_1(\vec{r}_2) \phi_2(\vec{r}_1) \quad (2.3),$$

onde  $E_0$  é a auto-energia na ausência da perturbação colombiana.

A energia de *exchange*  $J_{12}$  corresponde à diferença entre as energias dos estados singleto ( $S = 0$ ) e tripleto ( $S = 1$ ) de um sistema de dois elétrons, ou seja  $J_{12} = E(S=0) - E(S=1)$ . Quando  $J_{12} > 0$ , o estado de menor energia é o tripleto e, portanto, prevalece a orientação dos spins paralelos. Por outro lado, se  $J_{12} < 0$  o estado de menor energia é o singleto, prevalecendo à orientação dos spins antiparalelos.

A energia de troca  $J_{12}$  tem a propriedade de decrescer rapidamente com a distância entre os íons (decaimento exponencial), em contraste com a interação Coulombiana, que decresce mais lentamente ( $\sim 1/r$ ). A razão é que  $J_{12}$  contém o produto de funções de onda de elétrons ligados em diferentes núcleos, portanto,  $J_{12}$  dependerá do *overlap* das funções de onda. Acontece que esse *overlap* decresce exponencialmente com a distância, desta maneira, a interação de troca corresponde a uma interação de curto-alcance.

Usando as relações de operadores de spins  $S^2$  e  $S_i^2$  ( $i=1,2$ ), onde  $S = S_1 + S_2$  ( $S = 0,1$ ), e com base nas autofunções correspondentes às auto energias dada pela Eq. (2.2), Dirac [18] propôs o seguinte Hamiltoniano efetivo de *spins*

$$H_{12} = E_0 - \frac{J_{12}}{2} (1 + 4\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2) \quad (2.4)$$

Pois de fato,  $H_{12}|\phi_{\pm}\rangle = E_{\pm}|\phi_{\pm}\rangle$ , onde  $|\phi_{\pm}\rangle$  correspondem ao auto estados associados aos estados singletos e tripletos, respectivamente.

Generalizando para uma rede cristalina de  $N$  spins localizados, o Hamiltoniano efetivo entre spin-spin é expresso por

$$H = \sum_{i,j}^N J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = \sum_{i,j}^N J_{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) \quad (2.5),$$

sendo que a somatória acima é realizada sobre todos os pares de spins  $i$  e  $j$  (primeiro, segundo,... vizinhos).  $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$  indica o operador de spin no sítio  $i$ . A Eq.(2.5) é conhecida na literatura como modelo de Dirac-Heisenberg. Para  $J_{ij} > 0$  ( $J_{ij} < 0$ ), dizemos que o Hamiltoniano de Heisenberg é ferromagnético (antiferromagnético).

O estado fundamental do Hamiltoniano de Heisenberg ferromagnético corresponde a todos os spins alinhados paralelamente. Por outro lado, o estado fundamental do Hamiltoniano antiferromagnético não corresponde a todos os spins orientados antiparalelamente (estado de Néel), pois este não é auto-estado do Hamiltoniano. Existe uma infinidade de estados de spin total nulo  $S^z = \sum S_i^z = 0$ , que devem ser combinados para formar o estado fundamental do sistema [19]. A dificuldade em estabelecer um estado fundamental é o maior problema teórico que surge no estudo do antiferromagnetismo (AF) do modelo de Heisenberg. Nesta tese usaremos o estado fundamental como sendo o estado de Néel.

O modelo de Heisenberg antiferromagnético em uma dimensão foi resolvido de forma exata através do *Ansatz* de Beth, o estado fundamental é não-degenerado, desordenado e exibe somente correlações de curto-alcance. Para o caso de spin semi-inteiro ( $S = 1/2, 3/2..$ ), o espectro de excitação não tem *gap* (diferença de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental), enquanto o sistema de *spins* inteiros exibe um *gap* no espectro.

O espectro de excitação influencia nas propriedades termodinâmicas do sistema. A ausência de *gap* na cadeia de Heisenberg (Ferro ou Antiferromagnética) de spins semi-inteiro implica que as grandezas termodinâmicas no limite de baixas temperaturas, como calor específico e susceptibilidade, apresentam comportamento do tipo lei de potência. Por outro lado, no caso de spins inteiros, existe um *gap*. Neste caso, a cadeia antiferromagnética apresenta propriedades termodinâmicas qualitativamente diferentes, conforme foi proposto pela conjectura de Haldane [20].

O modelo de Heisenberg (inteiro e semi-inteiro) em uma rede quadrada em  $T = 0$  apresenta ordem de longo alcance, porém devido às flutuações quânticas, o valor da magnetização de sub-rede é reduzido de seu valor clássico ( $S$ ).

Em baixas dimensões, ( $d \leq 2$ ), as excitações térmicas desordenam os spins em temperaturas infinitesimais, e a temperatura de transição  $T_c$  para a fase desordenada ocorre em  $T = 0$ . Mermin e Wagner [3,4] provaram de forma exata que

não existe quebra espontânea de simetria em temperaturas finitas, no modelo  $1d$  ou  $2d$  de Heisenberg com interações de curto alcance.

Vários outros termos de interações (originários de interações Coulombiana) podem ser deduzidos via teoria de perturbação de ordem superior, como por exemplo, o termo bi-quadrático.

$$H^{(1)} = \sum_{i,j}^N J'_{ij} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2 \quad (2.6),$$

ou a interação entre quatro *spins*

$$H^{(2)} = \sum_{i,j}^N J''_{ijkl} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)(\vec{S}_k \cdot \vec{S}_l) \quad (2.7),$$

e assim por diante. Dependendo das intensidades das interações  $J_{ij}$  no Hamiltoniano (simétrico) dado pela Eq. (2.4), podemos ter dois tipos de limite importantes:

### a) Modelo de Ising

Proposto em 1920, por Wilhelm Lenz, como parte do doutoramento de Ernest Ising, o modelo corresponde fisicamente ao limite de Heisenberg anisotrópico, no qual  $J_{ij}^z \gg (J_{ij}^x, J_{ij}^y)$  e, portanto, teremos o seguinte modelo aproximado

$$H^{IS} = \sum_{i,j}^N J_{ij} S_i^z S_j^z \quad (2.8)$$

Este modelo apresenta solução exata para os casos unidimensionais [21] e bidimensionais [22] sem campo externo. No caso  $1d$  o modelo não apresenta magnetização espontânea em  $T > 0$ .

O primeiro resultado quantitativo (exato) no modelo  $2d$  foi apresentado em 1941 por Kramers e Wannier [23], onde os autores calcularam a temperatura crítica para diversas topologias de rede. Resultados publicados por Zenike [24], Ashkin e Lamb [25], Kubo [26], etc., mostraram que é possível existir uma transição de fase ( $T_c$  diferente de zero) em redes  $2d$  e  $3d$ .

Em 1944, Onsager [22] apresentou uma expressão para a magnetização numa rede quadrada, e calculou a temperatura crítica

$$\frac{k_B T_c}{J} = \ln \left[ \frac{2}{1 + \sqrt{2}} \right] \cong 2.2691853142$$

A solução exata do modelo de Ising  $2d$  com campo externo e  $3d$  são problemas em aberto na área da mecânica estatística em sistemas integráveis. A ausência da solução exata, motivou o desenvolvimento de técnicas rigorosas, tais como, expansão em serie [27] e simulação de Monte Carlo [28] que são consideradas soluções exatas, do ponto de vista numérico para o modelo  $3d$ .

## b) Modelo $xy$

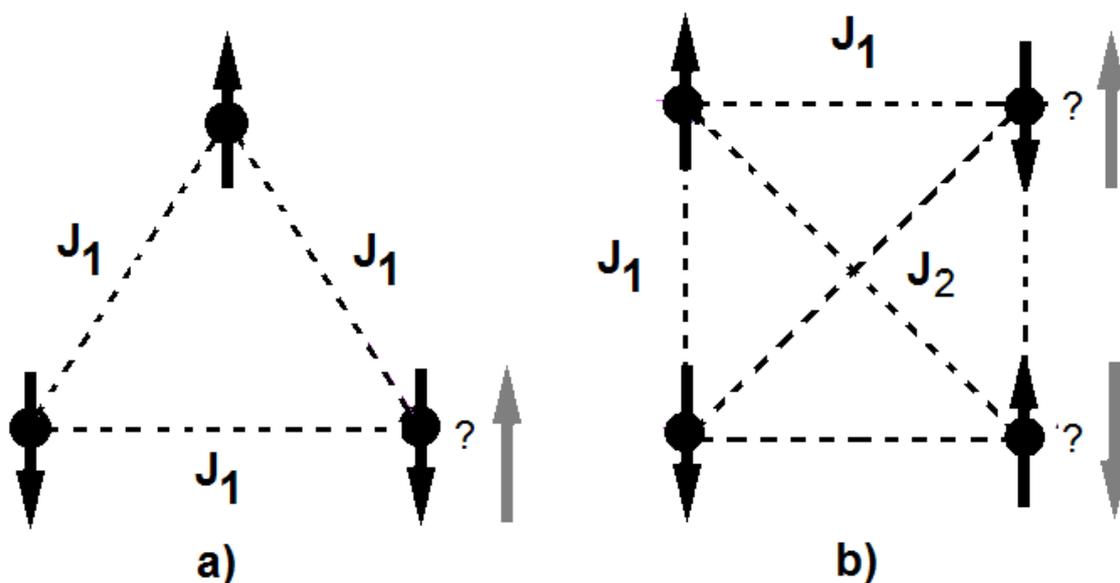
Fisicamente o modelo  $XY$  corresponde ao caso limite de Heisenberg anisotrópico bidimensional, no qual  $J_{ij}^z \ll (J_{ij}^x, J_{ij}^y)$  e, portanto, teremos o seguinte modelo aproximado

$$H^{xy} = \sum_{i,j}^N J_{ij}^x S_i^x S_j^x + J_{ij}^y S_i^y S_j^y \quad (2.9)$$

O modelo  $XY$  ou planar foi introduzido na literatura por Matsubara e Matsuda [29] obtendo solução exata em uma dimensão para o caso de *spin*  $1/2$ . No caso  $2d$ , este modelo anisotrópico não apresenta ordem de longo-alcance em temperatura finita ( $T > 0$ ). Existe uma transição de fase topológica [30], que está associada à formação de vórtices, o modelo não apresenta magnetização espontânea (ordem magnética).

## 2.2 Frustração magnética

A frustração magnética é gerada pelo conflito em minimizar a interação de *exchange* associada a diferentes pares de *spin*. Esse conflito pode resultar da geometria da rede ou devido à competição entre as interações. Considere por exemplo as redes triangular e quadrada em duas dimensões ver Fig. 2.1.



**Figura 2.1:** Células unitárias das redes triangular (a) e quadrada (b)

Essas redes são chamadas de redes bipartidas, porque podem ser divididas em duas sub-redes, "a" e "b". Nas duas sub-redes, todos os *spins* interagem de forma antiferromagnética. Os spins estão localizados nos sítios das redes, com os spins na direção *up* pertencentes à sub-rede "a", enquanto os spins na direção *down* estão na sub-rede *b* (a soma total dos momentos magnéticos em cada sub-rede é diferente de zero, pode-se definir uma magnetização para cada sub-rede,  $m_a$  e  $m_b$ , sendo que  $m_a = -m_b$ . Em materiais antiferromagnéticos, o parâmetro de ordem é a magnetização de sub-rede.

A plaqueta triangular, Fig. 2.1 a), é um exemplo de configuração de spins topologicamente frustrada, enquanto a rede quadrada com interações antiferromagnéticas entre primeiros e segundos vizinhos é um exemplo de rede frustrada devido à competição entre as interações  $J_1$  e  $J_2$ , Fig. 2.1 b). Nos dois casos acima, a energia de um par de *spins* interagindo é minimizada quando os spins estão antiparalelos. No caso da plaqueta triangular, os três pares de spin não podem satisfazer essa condição simultaneamente.

No caso da rede quadrada, o sistema apresenta o mesmo tipo de conflito para minimizar simultaneamente as interações entre primeiros e segundos vizinhos.

Materiais antiferromagnéticos com um número ímpar de ligações em sua célula unitária são sistemas topologicamente frustrados (i. e. rede triangular, Kagomé, Pyrocloro,). Este tipo de conflito não existe em uma rede cuja sua célula

unitária é formada por um número par de ligações, como no caso da rede quadrada com interações apenas entre primeiros vizinhos.

Em uma teoria de campo médio para o antiferromagneto em altas temperaturas, a suscetibilidade é dada por

$$\chi = \frac{C}{T - \theta_{cw}} \quad (2.10),$$

onde  $\Theta_{cw}$  é a temperatura de Curie-Weiss, e  $C$  é a constante de Curie. Neste caso,  $T$  é maior que a temperatura de Néel  $T_N$ . A temperatura de Néel é definida experimentalmente pela a singularidade do calor específico. Do ponto de vista experimental, um material não apresenta frustração se a temperatura de Néel do material for da ordem (módulo) da temperatura de Curie. Por outro lado, se a temperatura de Néel for menor que a temperatura de Curie (módulo) ( $T_N \ll \Theta_{cw}$ ), o material apresenta frustração. Comumente, defini-se um fator de frustração  $f$  como sendo  $\Theta_{cw}/T_N$ . A frustração corresponde à  $f < 1$ .

### 2.2.1 Redes bidimensionais frustradas

O ordenamento antiferromagnético (AF), inicialmente estudado por L. Néel em 1936 [31], não apresenta magnetização na ausência de campo externo. O comportamento dos materiais (AF) é explicado pelo fato de que nesses materiais, abaixo da temperatura crítica  $T_N$  conhecida como temperatura de Néel, os átomos magnéticos interagem de forma a alinhar antiparalelamente a direção de seus spins, resultando assim numa magnetização total nula.

No caso da rede triangular, modelo  $xy$ , o estado fundamental clássico dos spins formam uma estrutura de três sub-redes, ordenadas segundo um ângulo de  $120^\circ$  entre os spins de sub-redes diferentes. O estado fundamental do caso quântico para a rede triangular com *spin*  $1/2$  apresenta ordem (AF) do tipo Néel, Neste caso, as flutuações quânticas não destroem a ordem do estado fundamental clássico.

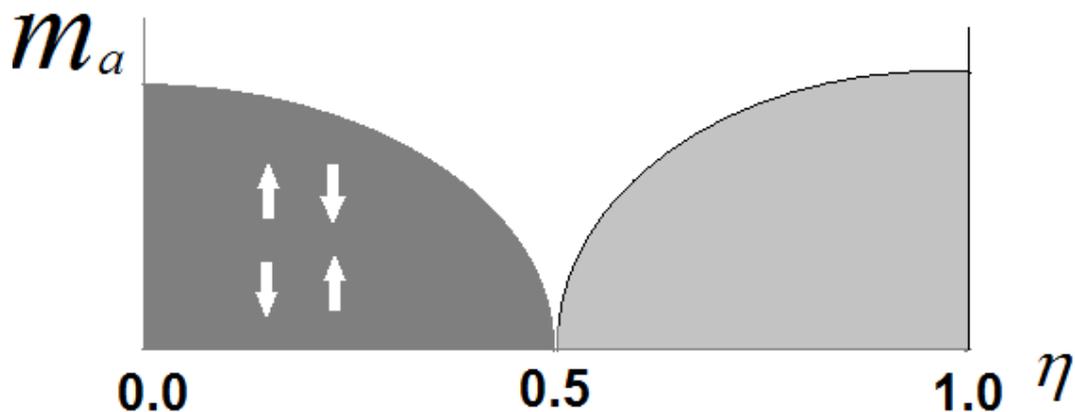
Classicamente, a rede Kagomé, apresenta estado fundamental altamente degenerado, e não tem ordem, nem mesmo em temperatura nula. Assim como no

caso clássico, a rede Kagomé também não apresenta ordem de longo alcance no caso quântico.

Considere a rede quadrada com interações entre primeiros e segundos vizinhos Fig. 2.1 b). Este modelo para *spin* 1/2 foi estudado por diversos métodos [32-55], Teoria de ondas de spin [40], diagonalização exata [40,42,48], expansão em série [46,50-54], Grupo de renormalização [49], método da função de Green [45] e emaranhamento projetado de pares de estados [55].

No caso clássico, modelo de Ising, os spins na rede quadrada com  $J_2 = 0$  estão ordenados no estado antiferromagnético de Néel  $(\pi, \pi)$  (em  $T=0$  a magnetização da sub-rede "a" assume seu máximo valor). Considerando agora a interação entre segundos vizinho, e definindo o parâmetro  $\eta = J_2/J_1$ , podemos variar  $\eta$  para induz competição entre os primeiros e segundos vizinhos, e assim induzir frustração no sistema. A frustração destrói a ordem de Néel, e uma questão extremamente importante surge: Que tipo de estado pode emergir?

A ordem (AF) é destruída para  $\eta_{1c} = 0.5$ , ver Fig. 2.2. Para valores de frustração maior que 0.5, a ordem do sistema passa a ser do tipo  $(\pi, 0)$  ou  $(0, \pi)$  com ângulos livres entre os spins das sub-redes "a" e "b".

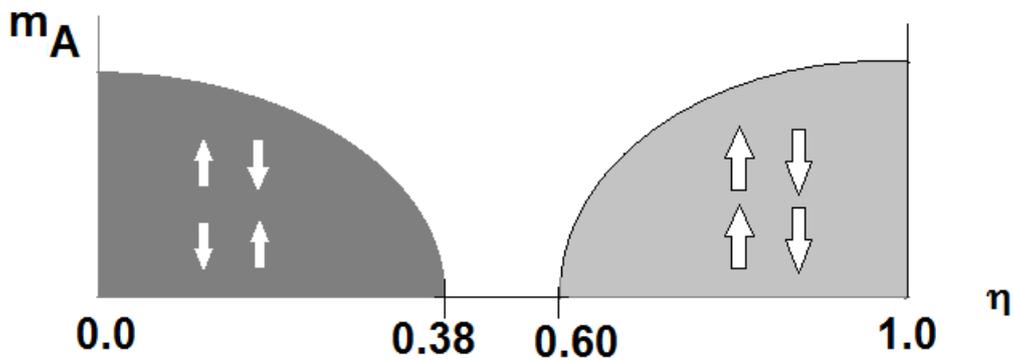


**Figura 2.2:** Magnetização de sub-rede  $m_a$  como função do parâmetro  $\eta$ . Na região onde  $\eta < 0.5$ , o sistema se encontra na fase Néel. Para  $\eta > 0.5$ , o sistema se encontra na fase  $(0, \pi)$  ou  $(\pi, 0)$  com ângulos livres.

No caso quântico, todos os métodos citados acima sugerem que para  $\eta \leq 0.4$  o estado fundamental do modelo é (AF). Porém, para  $\eta \geq 0.6$  os spins se arranjam

em um ordenamento do tipo colinear (CL), Fig. 2.3, onde os *spins* de uma direção espacial estão alinhados antiparalelamente, enquanto na outra direção da rede cristalina, os spins estão alinhados paralelamente. A região intermediária,  $0.38 < \eta < 0.6$ , tem magnetização de sub-rede nula. Acredita-se que esta região paramagnética quântica (PQ), sem ordem de longo alcance, pode ser formada por estados de dímeros [51,55], *plaquette valence bond solid order* [42,47,56] ou um *Quantum Spin Liquid* (QSL) [38,57].

A determinação precisa do valor dos pontos críticos  $\eta_{1c}$  e  $\eta_{2c}$  aonde a magnetização vai a zero, não é conclusiva. Recentemente, usando diagonalização exata [45], os pontos de transição foram estimados em  $\eta_{1c} = 0.35$  e  $\eta_{2c} = 0.66$ . A técnica poderosa de Monte Carlo não é apropriada para aplicar em sistemas frustrados, devido o problema do sinal negativo. Recentemente, usando renormalização da matriz densidade, Jiang e colaboradores [58], encontraram  $\eta_{1c} = 0.41$  e  $\eta_{2c} = 0.62$  em temperatura zero.



**Figura 2.3:** Magnetização de sub-rede  $m_a$  como função do parâmetro  $\eta$ . Na região onde  $\eta < 0.38$ , o sistema se encontra na fase Néel. Para  $\eta > 0.60$ , o sistema se encontra na fase colinear.

### 2.2.2 Fase desordenada e o estado líquido de spin

A fase magneticamente desordenada em  $T = 0$  apresenta uma função de correlação *spin-spin* de curto alcance. O estado fundamental na ausência de ordem de longo alcance pode ser geralmente descrito como "*Quantum Liquid Spin*" (QSL)

ou em português "líquido quântico de *spin*" [38,57]. Um (QSL) é diferente da fase paramagnética clássica, nessa fase, pode-se definir parâmetros de ordem que tem valores esperados diferente de zero no estado (QSL). O nome líquido de *spin* é resultado de uma analogia com o estado líquido usual, no qual as moléculas formam um sistema denso e altamente correlacionado sem nenhuma ordem estática; nos líquidos de *spin*, os *spins* estão altamente correlacionados, mas ainda flutuam fortemente, mesmo em  $T = 0$ .

Líquidos de *spin* quânticos (QSL) são interessantes porque não possuem ordem mesmo quando a temperatura é zero. A formação de um estado (QSL) é favorecida por flutuações quânticas, efeito que é mais acentuado em baixas dimensões e para baixos valores de *spin*.

O estado fundamental desta fase é construído a partir dos estados de Valência, onde dois elétrons formam um singlete com *spin* total nulo devido à interação antiferromagnética.

Outra característica deste estado é a presença de um *gap*  $\Delta$  no espectro de excitação. Do ponto de vista experimental,  $\Delta$  pode ser confirmado através de medidas do calor específico. O calor específico vai para zero de forma exponencial em baixas temperaturas como função do  $\Delta$ ,

$$C \propto \exp\left(-\frac{\Delta}{k_B T}\right).$$

## 2.3 Anisotropia de íon único

A interação de troca, de origem eletrostática, responsável pelo ordenamento magnético na matéria, é de natureza isotrópica e produz ordenamento em vários sítios da rede. Essa interação não é capaz de definir uma orientação privilegiada para os momentos magnéticos, com relação a um eixo cristalino.

O fato de que a distribuição de *spins* ordenados é sempre orientada numa dada direção (eixo de fácil magnetização), implica que devemos ter algum outro tipo de interação que torne o Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico.

Fisicamente, as interações magnéticas dipolares (quadrupolar etc.), são responsáveis pela existência da anisotropia magneto cristalina. A anisotropia é caracterizada pela dependência da energia do cristal nas orientações dos momentos magnéticos dos íons com relação ao eixo cristalino.

A anisotropia de íon único também é capaz de definir eixos de fácil magnetização. Essa anisotropia tem origem microscópica e pode ser entendida como a influência do potencial elétrico da rede cristalina sobre o acoplamento *spin-órbita*. Relembrando, o termo de acoplamento spin-órbita é dado por:

$$\Delta E = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S}, \quad (2.10)$$

onde,  $V(r)$  é a energia potencial de interação elétron-núcleo,  $L_i$  e  $S_i$  são os operadores de momento angular orbital e spin no sítio  $i$ . Usando teoria de perturbação de segunda ordem para a energia spin-órbita, a Eq.(2.10) gera um termo adicional no Hamiltoniano de *spins* (2.5), dado por

$$H = D \sum_i (S_i^z)^2 + E \sum_i [(S_i^x)^2 - (S_i^y)^2] \quad (2.12),$$

onde  $D$  e  $E$  são constantes. O caso  $E = 0$ , reduz-se a anisotropia uniaxial.

O primeiro termo da Eq.(2.12) é denominado de anisotropia de íon-único. A Eq.(2.12) só é relevante para sistemas com spin  $S > 1/2$ , pois para o caso particular de  $S = 1/2$ , temos que  $(S_i^v)^2 = 1/4$  ( $\hbar=1$ ) para qualquer componente  $v$  ( $= x, y, z$ ), dessa forma, este termo se reduz a uma constante, não sendo relevante nos cálculos das propriedades magnéticas do sistema.

Quando consideramos o termo de anisotropia uniaxial no modelo de Heisenberg antiferromagnético para o caso de *spin* 1, os *spins* do sistema passam a ter dois tipos de direções privilegiadas que dependem do sinal da anisotropia  $D$ .

Se  $D > 0$  os *spins* do sistema tendem a se orientarem na direção perpendicular ao eixo  $z$ . Por outro lado, se  $D < 0$  os spins tendem a se orientar na direção do eixo  $z$ . O caso  $D > 0$  é chamado de anisotropia de plano fácil, enquanto o caso  $D < 0$  é chamado de anisotropia de eixo fácil.

## Capítulo 3

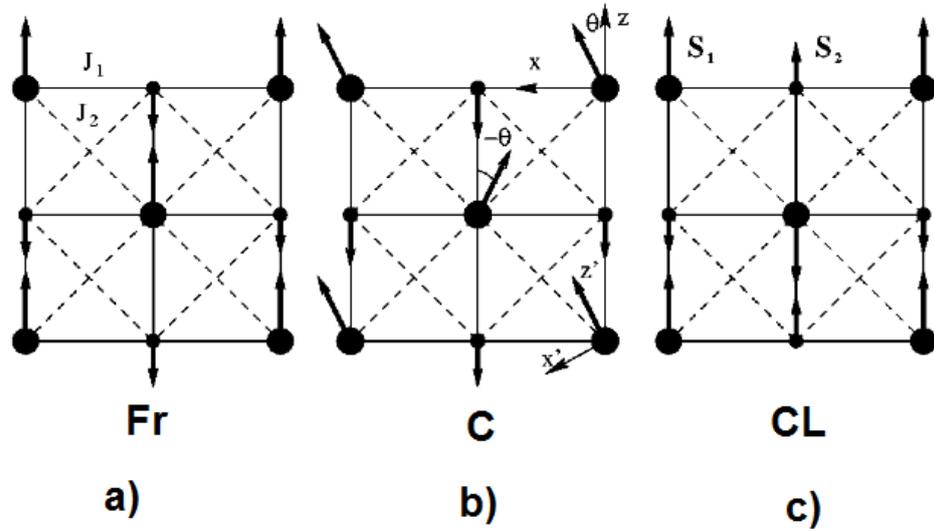
### Modelo Ferrimagnético $J_1 - J_2^{S_1} - J_2^{S_2}$ na rede quadrada

No capítulo anterior, discutimos a importância do modelo de Heisenberg antiferromagnético,  $J_1$ - $J_2$ , e a ligação deste modelo com a procura de estados desordenados em  $T = 0$ . Desde a descoberta do ferrimagnetismo em cadeias bimetalicas [64], vários trabalhos foram realizados em sistemas com *spin* misto [65,66,67].

Sistemas (Fr) são compostos por pelo menos dois tipos de *spins* ( $S_1, S_2$ ) que interagem antiferromagneticamente. Muitos desses materiais são magnetos moleculares contendo dois íons magnéticos diferentes que são distribuídos alternativamente na rede cristalina [60,61]. Nos últimos anos, uma grande variedade de compostos de spins mistos ( $1/2, 1, 3/2, \dots$ ) quase-1d e quase-2d foram sintetizados [62,63].

A liga de terra-rara  $R_2\text{BaNiO}_5$  [68], que pode ser modelada por uma rede bidimensional formada por cadeias acopladas [69,70], é um exemplo de *spin* misto em duas dimensões. Um exemplo de material que pode ser modelado em uma rede quadrada, é o *Fe-Ni* [71]. Modelos ferrimagnéticos foram estudados por teoria de ondas de spin [72] e uma variedade de métodos numéricos [65-67] com ênfase em cadeias de spin.

Recentemente, a interação entre segundos vizinhos no modelo de Heisenberg ferrimagnético, foi alvo de estudo de alguns autores [73,74]. Ivanov e colaboradores [74], usando teoria de ondas de spin, estudaram o modelo  $J_1$ - $J_2$  ferrimagnético (1,1/2) em uma rede quadrada. Neste trabalho, os autores determinaram o diagrama de fase do sistema em  $T = 0$ . Os autores calcularam as flutuações em torno das fases clássicas (Fr) para  $\eta < 0.5$ , *canted* (C) para  $0.25 < \eta < 0.5$  e (CL) para  $\eta > 0.5$ , ver Fig. 3.1. Ivanov encontrou indícios de uma fase quântica na região  $0.46 < \eta < 0.5$ . Essa fase é caracterizada por desordem magnética entre os *spins* 1/2 e ordenamento de Néel entre os *spins* 1.



**Figura 3.1:** Fases clássicas no modelo ferrimagnético bidimensional na rede quadrada [74]. Spins  $S_I = 1$  são representados por setas maiores, enquanto spins  $1/2$  são representados por setas menores. a) Fase ferrimagnética (Fr). b) Fase *canted* (C) e c) case Colinear (CL).

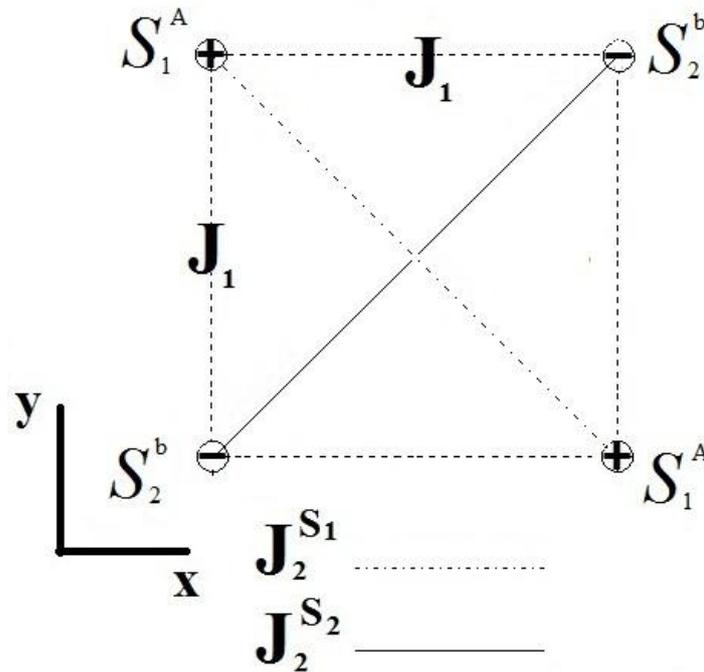
Neste capítulo, também estudaremos o diagrama de fase quântico do modelo de Heisenberg ferrimagnético (Fr) com dois tipos de spins,  $S_1$  e  $S_2$  (casos,  $(1, 1/2)$ ,  $(3/2, 1/2)$  e  $(3/2, 1)$ ). Realizaremos o estudo em uma rede quadrada com interação de *exchange* entre primeiros e segundos vizinhos. Em nossos cálculos, vamos considerar que os *spins*  $S_1$  interagem com outros *spins*  $S_1$  por meio de uma constante de *exchange*  $J_2^{S_1}$ , enquanto os *spins*  $S_2$  interagem com outros spins  $S_2$  via  $J_2^{S_2}$ . Definimos então uma anisotropia,  $\Theta \in [0, 1]$ , tal que, se  $J_2^{S_1} \geq J_2^{S_2}$ , usaremos  $J_2^{S_2} = (1 - \Theta)J_2^{S_1}$  ou  $J_2^{S_1} = (1 - \Theta)J_2^{S_2}$  no caso contrário.

Em nossos cálculos, iremos calcular flutuações quânticas em torno das fases clássicas, (Fr) e (CL). A fase (CL) será tratada em um formalismo com quatro sub-redes Fig. 3.2. A fase (C) será desprezada, sendo assim, as transições de fase ocorreram de duas formas: *i*) Diretamente entre as fases ordenadas (Fr) e (CL). *ii*) Entre as fases ordenadas e uma fase com desordem magnética.

### 3.1 Fase Ferrimagnética (Fr)

Na fase ferrimagnética, consideramos que o estado fundamental tem ordem de Néel, com duas sub-redes "A" e "b", onde a sub-rede "A" contém *spins up* e a sub-rede "b" contém *spins down* (Fig. 3.2). Nesta fase, a rede é formada por dois tipos de *spins*,  $S_1$  e  $S_2$ , distribuídos de forma alternada sobre toda a rede. Os *spins*  $S_1$  são *spins-up*, localizados na sub-rede "A" e apontam no sentido positivo do eixo  $z$ . Os *spins*  $S_2$  são *spins-down*, localizados na sub-rede "b" e apontam para o sentido negativo do eixo  $z$ .

A interação entre primeiros vizinhos ocorre entre os *spins* da sub-rede "A" com os *spins* da sub-rede "b". Por outro lado, a interação entre os segundos vizinhos ocorre somente entre os *spins* de mesma sub-rede, ou seja, "A" com "A" ou "b" com "b".



**Figura 3.2:** Fase ferrimagnética,  $J_2^{S_1}$  e  $J_2^{S_2} < J_1$ .

O Hamiltoniano para a fase ferrimagnética pode ser expresso como:

$$H^{Fr} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i^A \cdot \vec{S}_j^b + \frac{J_2^{S_1}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i^A \cdot \vec{S}_j^A + \frac{J_2^{S_2}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i^b \cdot \vec{S}_j^b \quad (3.1),$$

sendo,  $J_1$  a interação de exchange entre primeiros vizinhos, enquanto  $J_2^{S_1}$  e  $J_2^{S_2}$  são as interações de exchange entre os segundos vizinhos.

A fase (AF) quebra a simetria de rotação do modelo de Heisenberg, e, portanto uma das componentes do *spin* tem um valor esperado finito. É natural buscarmos uma representação no qual descreve as flutuações quânticas em torno do valor esperado clássico do spin. Calcularemos flutuações em torno do estado fundamental clássico, e, portanto, estudaremos o Hamiltoniano (3.1) usando a transformação de ondas de *spin* linear. A teoria de ondas de *spin* linear calcula as flutuações em torno do estado fundamental clássico, propondo um mapeamento dos operadores de *spin* em operadores de bósons. Os graus de liberdade bosônico resultante podem ser identificados como magnons (excitações do sistema) ou ondas de *spin*. Os operadores de spin são trocados por operadores bosônico, através da transformação,

$$\begin{aligned} S_i^{+A} &= \sqrt{2S_1} A_i & S_i^{+b} &= \sqrt{2S_2} b_i^+ \\ S_i^{-A} &= \sqrt{2S_1} A_i^+ & S_i^{-b} &= \sqrt{2S_2} b_i \\ S_i^{zA} &= S_1 - A_i^+ A_i & S_i^{zb} &= -S_2 + b_i^+ b_i \end{aligned} \quad (3.2),$$

Nesta representação,  $A_i^+$  ( $A_i$ ) e  $b_i^+$  ( $b_i$ ) são os operadores de criação e aniquilação no sitio  $i$  nas sub-redes "A" e "b", respectivamente. Esses operadores satisfazem as seguintes relações de comutação  $[A_i, A_i^+] = 1$ ,  $[b_i, b_i^+] = 1$  e  $[A_i, b_i] = 0$ . Substituindo (3.2) em (3.1), e realizando a seguinte transformada de Fourier nos operadores de criação e destruição

$$A_i = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k e^{ik \cdot R_i} A_k \quad b_i = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k e^{-ik \cdot R_i} b_k,$$

o Hamiltoniano (3.1) assume a sua forma bosônica

$$H^{(Fr)} = H^{(0)} + H^{(2)} \quad (3.3),$$

onde a energia do modelo clássico  $H^{(0)}$  e os termos quadráticos  $H^{(2)}$  são dados por

$$H^{(0)} = -N \frac{J_1}{2} S_1 S_2 \left[ 1 - \frac{J_2^{S_2}}{J_1} \frac{S_1}{S_2} - \frac{J_2^{S_1}}{J_1} \frac{S_2}{S_1} \right] \quad (3.4)$$

$$H^{(2)} = J_1 \sum_k A_{0k} A_k^+ A_k + B_{0k} b_k^+ b_k + C_{0k} (A_k b_k + A_k^+ b_k^+) \quad (3.5)$$

Os coeficientes  $A_{0k}$  e  $B_{0k}$  dependem da anisotropia  $\Theta$ , e são definidos por

$$\begin{aligned} A_{0k} &= z_1 S_1 + z_2 (1 - \Theta) \eta_1 S_2 (\gamma_k^{(2)} - 1) \\ B_{0k} &= z_1 S_2 + z_2 \eta_1 S_1 (\gamma_k^{(2)} - 1) \end{aligned} \quad (3.6)$$

Se  $J_2^{S_1} \geq J_2^{S_2}$ , ou

$$\begin{aligned} A_{0k} &= z_1 S_1 + z_2 \eta_2 S_2 (\gamma_k^{(2)} - 1) \\ B_{0k} &= z_1 S_2 + z_2 (1 - \Theta) \eta_2 S_1 (\gamma_k^{(2)} - 1) \end{aligned} \quad (3.7)$$

se  $J_2^{S_1} \leq J_2^{S_2}$ . Sendo que  $\eta_i = \frac{J_2^{S_i}}{J_1}$ ,  $i=1,2$ . As quantidades  $z_1=4$  e  $z_2=4$  representam os números de primeiros e segundos vizinhos na rede quadrada e  $\gamma_k^{(2)} = \cos(k_x) \cos(k_y)$  é o fator de estrutura entre segundos vizinhos. O coeficiente  $C_{0k}$  não depende da anisotropia  $\Theta$  e é expresso por

$$C_{0k} = z_1 \sqrt{S_1 S_2} \gamma_k^{(1)} \quad (3.8).$$

As quantidades  $\gamma_k^{(1)}$  é o fator de estrutura de primeiros vizinhos, definido por  $\gamma_k^{(1)} = \frac{1}{2} (\cos(k_x) + \cos(k_y))$ . Para obter as excitações do sistema, precisamos diagonalizar (3.5), para isso, definimos a seguinte transformação de Bogoliubov

$$A_k = u_k \alpha_k + v_k \beta_k^+ \quad b_k = u_k \beta_k + v_k \alpha_k^+, \quad (3.9)$$

onde  $u_k$  e  $v_k$  são reais e  $\alpha_k$  e  $\beta_k$  são bósons (magnons) que não interagem. A exigência de que os novos bósons,  $\alpha_k$  e  $\beta_k$  também obedecem às relações de comutação bosônica, implica na relação

$$u_k^2 - v_k^2 = 1.$$

Substituindo a transformação (3.8) em (3.5), chegamos a

$$H^{(2)} = J_1 \sum_k \omega_k^{(\alpha)} \alpha_k^+ \alpha_k + \omega_k^{(\beta)} \beta_k^+ \beta_k + \xi_k (\alpha_k \beta_k + \alpha_k^+ \beta_k^+) + 2u_k v_k C_{0k} + v_k^2 (A_{0k} + B_{0k}),$$

sendo

$$\begin{aligned} \omega_k^{(\alpha)} &= v_k^2 B_{0k} + u_k^2 A_{0k} + 2u_k v_k C_{0k} \\ \omega_k^{(\beta)} &= v_k^2 A_{0k} + u_k^2 B_{0k} + 2u_k v_k C_{0k} \\ \xi_k &= (v_k^2 + u_k^2) C_{0k} + u_k v_k (A_{0k} + B_{0k}) \end{aligned}$$

O Hamiltoniano (3.5) assumirá forma diagonal se  $\xi_k = 0$ . Fazendo isso, juntamente com a condição  $u_k^2 - v_k^2 = 1$ , teremos duas equações que podem ser usadas para determinar  $u_k$  e  $v_k$  como

$$u_k^2 = \frac{1}{2}(1 + \Gamma_k) \quad v_k^2 = \frac{1}{2}(-1 + \Gamma_k),$$

sendo,  $\Gamma_k = \frac{A_{0k} + B_{0k}}{\sqrt{(A_{0k} + B_{0k})^2 - 4C_{0k}^2}}$ .

A forma diagonal do Hamiltoniano (2.5) é finalmente expressa por

$$H^{(2)} = J_1 \sum_k \omega_k^{(\alpha)} \alpha_k^+ \alpha_k + \omega_k^{(\beta)} \beta_k^+ \beta_k + \sum_k \Lambda_k \quad (3.9),$$

com

$$\Lambda_k = \frac{1}{2}(A_{0k} + B_{0k})(\Gamma_k - 1) + 2 \frac{C_{0k}^2}{w_k},$$

sendo a frequência dos magnons dada por

$$\omega_k^{(\alpha,\beta)} = \frac{(A_{0k} \mp B_{0k})}{2} + \frac{\sqrt{(A_{0k} + B_{0k})^2 - 4C_{0k}^2}}{2}$$

As magnetizações de sub-rede "A" e "B" são as médias das componentes  $S^z$  das sub-redes, respectivamente. A magnetização  $m_A$  é expressa como

$$m_A = \frac{1}{N_{uc}} \sum_i \langle S_i^{zA} \rangle = S_1 - \frac{2}{N} \sum_k \langle A_k^+ A_k \rangle$$

Substituindo (3.9) em  $m_A$  e considerando que os bósons não interagem, obtemos

$$m_A = S_1 - \frac{2}{N} \sum_k u_k^2 \langle \alpha_k^+ \alpha_k \rangle + v_k^2 \langle \beta_k^+ \beta_k \rangle + v_k^2.$$

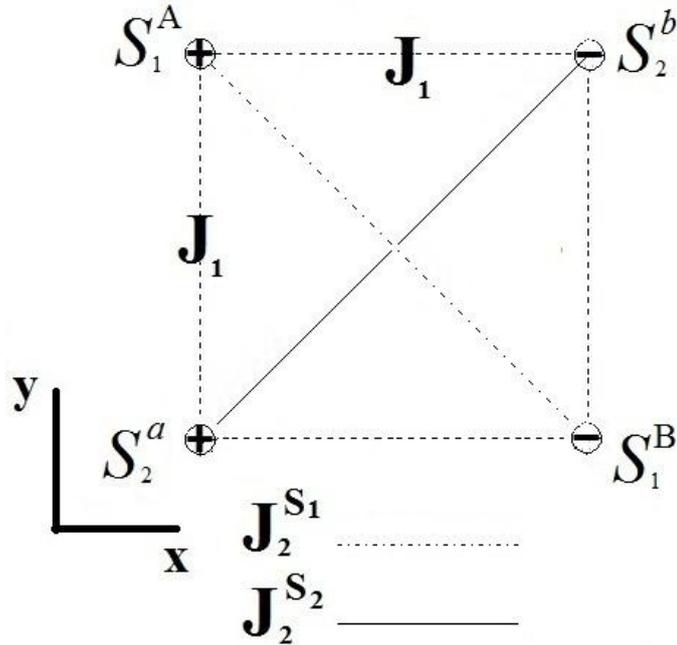
As quantidades

$$\langle \alpha_k^+ \alpha_k \rangle = n(\omega_k^{(\alpha)}) = \frac{1}{e^{\beta\omega^{(\alpha)}} - 1}, \quad \langle \beta_k^+ \beta_k \rangle = n(\omega_k^{(\beta)}) = \frac{1}{e^{\beta\omega^{(\beta)}} - 1} \quad \text{com } \beta = 1/k_B T$$

são os números médios de ocupação dos bósons, ou distribuição de Bose-Einstein. A constante  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  é a temperatura dos sistema. Em temperatura zero, ambas as funções de distribuição tendem a zero, e a magnetização de sub-rede em  $T = 0$  é expressa como

$$m_{A,b} = \pm S_1 \mp \frac{2}{N} \sum_k v_k^2$$

### 3.2 Fase colinear (CL)



**Figura 3.3:** Fase colinear (CL)

Agora considere o caso onde  $\eta$  assume valores a ponto de favorecer a interação antiferromagnética entre os segundos vizinhos. O estado fundamental da fase (CL) tem quatro sub-redes "A", "a", "B" e "b", ver Fig. 3.3. A interação entre primeiros vizinhos acontece de quatro maneiras diferentes, vejamos: Os spins que pertencem a sub-rede "A" interagem com spins das sub-redes "a" e "b", e os spins pertencentes à sub-rede "B" interagem com spins na sub-rede "b" e "a". A interação de exchange de segundos vizinhos  $J_2^{S_1}$  e  $J_2^{S_2}$  conecta os spins da sub-rede "A" com "B" e "a" com "b", respectivamente. Levando em consideração essas interações, o Hamiltoniano de Heisenberg para a fase colinear ferrimagnética é expresso como

$$H^{CL} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i^A \cdot \vec{S}_j^b + \vec{S}_i^A \cdot \vec{S}_j^a + \vec{S}_i^B \cdot \vec{S}_j^a + \vec{S}_i^B \cdot \vec{S}_j^b) + \frac{J_2^{S_1}}{2} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \vec{S}_i^A \cdot \vec{S}_j^B + \frac{J_2^{S_2}}{2} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^b \quad (3.10)$$

A transformação bosônica de ondas de spins em cada sub-rede é dada por

$$\begin{aligned}
S_i^{+A} &= \sqrt{2S_1} A_i & S_i^{+b} &= \sqrt{2S_2} b_i^+ & S_i^{+a} &= \sqrt{2S_2} a_i & S_i^{+B} &= \sqrt{2S_2} B_i^+ \\
S_i^{-A} &= \sqrt{2S_1} A_i^+ & S_i^{-b} &= \sqrt{2S_2} b_i & S_i^{-a} &= \sqrt{2S_1} a_i^+ & S_i^{-B} &= \sqrt{2S_2} B_i \\
S_i^{zA} &= S_1 - A_i^+ A_i & S_i^{zb} &= -S_2 + b_i^+ b_i & S_i^{za} &= S_2 - a_i^+ a_i & S_i^{zB} &= -S_1 + B_i^+ B_i
\end{aligned} \quad (3.11)$$

Substituindo (3.11) em (3.10), podemos reescrever o Hamiltoniano como

$$H^{CL} = H^{(o)} + H^{(2)} \quad (3.12)$$

onde

$$H^{(o)} = -\frac{N}{4} [J_2^{S_1} S_1 + J_2^{S_2} S_2] \quad (3.13)$$

e

$$\begin{aligned}
H^{(2)} &= J_1 \sum_k A_{0k} (A_k^+ A_k + B_k^+ B_k) + B_{0k} (a_k^+ a_k + b_k^+ b_k) + C_{0k} (A_k^+ a_k + B_k^+ b_k + H.c.) \\
&+ F_{0k} (A_k B_k + H.c.) + G_{0k} (A_k b_k + a_k b_k + H.c.) + I_{0k} (a_k b_k + H.c.)
\end{aligned} \quad (3.14)$$

sendo

$$\begin{aligned}
A_{0k} &= 2\eta S_1 \\
B_{0k} &= 2(1 - \Theta)\eta S_2 \\
F_{0k} &= 2\eta S_1 \cos(k_x) \cos(k_y) \\
I_{0k} &= 2(1 - \Theta)\eta S_2 \cos(k_x) \cos(k_y)
\end{aligned}$$

se  $J_2^{S_2} \leq J_2^{S_1}$ , onde  $\eta \equiv \eta_1$  ou

$$\begin{aligned}
A_{0k} &= 2\eta(1 - \Theta)S_1 \\
B_{0k} &= 2\eta S_2 \\
F_{0k} &= 2\eta(1 - \Theta)S_1 \cos(k_x) \cos(k_y) \\
I_{0k} &= 2\eta S_2 \cos(k_x) \cos(k_y)
\end{aligned}$$

se  $J_2^{S_1} \leq J_2^{S_2}$ , sendo neste caso,  $\eta \equiv \eta_2$ . Os coeficientes  $C_{0k}$  e  $G_{0k}$  não dependem da anisotropia, e são dados por

$$\begin{aligned}
C_{0k} &= \sqrt{S_1 S_2} \cos(k_y) \\
G_{0k} &= \sqrt{S_1 S_2} \cos(k_x)
\end{aligned}$$

Para diagonalizar (3.14), recorreremos a um processo de diagonalização generalizado [18], onde escrevemos os operadores  $A_k^+, a_k^+, B_k, b_k$  em termos de novos operadores  $\bar{A}_k^+, \bar{a}_k^+, \bar{B}_k, \bar{b}_k$ , por meio da matriz  $U$  definida por

$$\begin{pmatrix} A_k \\ a_k \\ B_k^+ \\ b_k^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} & U_{14} \\ U_{12} & U_{22} & U_{23} & U_{24} \\ U_{13} & U_{23} & U_{33} & U_{34} \\ U_{14} & U_{24} & U_{34} & U_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{A}_k \\ \bar{a}_k \\ \bar{B}_k^+ \\ \bar{b}_k^+ \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

Os antigos e os novos operadores satisfazem as relações de comutação canônica para bósons. Essa exigência gera mais quatro equações.

$$\begin{aligned} U_{11}^2 + U_{12}^2 - U_{13}^2 - U_{14}^2 &= 1 \\ U_{12}^2 + U_{22}^2 - U_{23}^2 - U_{24}^2 &= 1 \\ U_{33}^2 + U_{34}^2 - U_{13}^2 - U_{23}^2 &= 1 \\ U_{34}^2 + U_{44}^2 - U_{14}^2 - U_{24}^2 &= 1 \end{aligned} \quad (3.16)$$

Substituindo as transformações (3.15) em (3.14), e exigindo que o novo Hamiltoniano seja diagonal, obtemos o seguinte Hamiltoniano (ver apêndice A).

$$H^{(CL)} = J_1 \sum_k (\omega_k^{(A)} \bar{A}_k^+ \bar{A}_k + \omega_k^{(B)} \bar{B}_k^+ \bar{B}_k + \omega_k^{(a)} \bar{a}_k^+ \bar{a}_k + \omega_k^{(b)} \bar{b}_k^+ \bar{b}_k) \quad (3.17),$$

As quantidades  $\omega_k^{(i)}$  são as frequências dos magnons. As magnetizações de sub-rede  $m_A, m_B, m_a, m_b$  em temperatura nula são dadas por

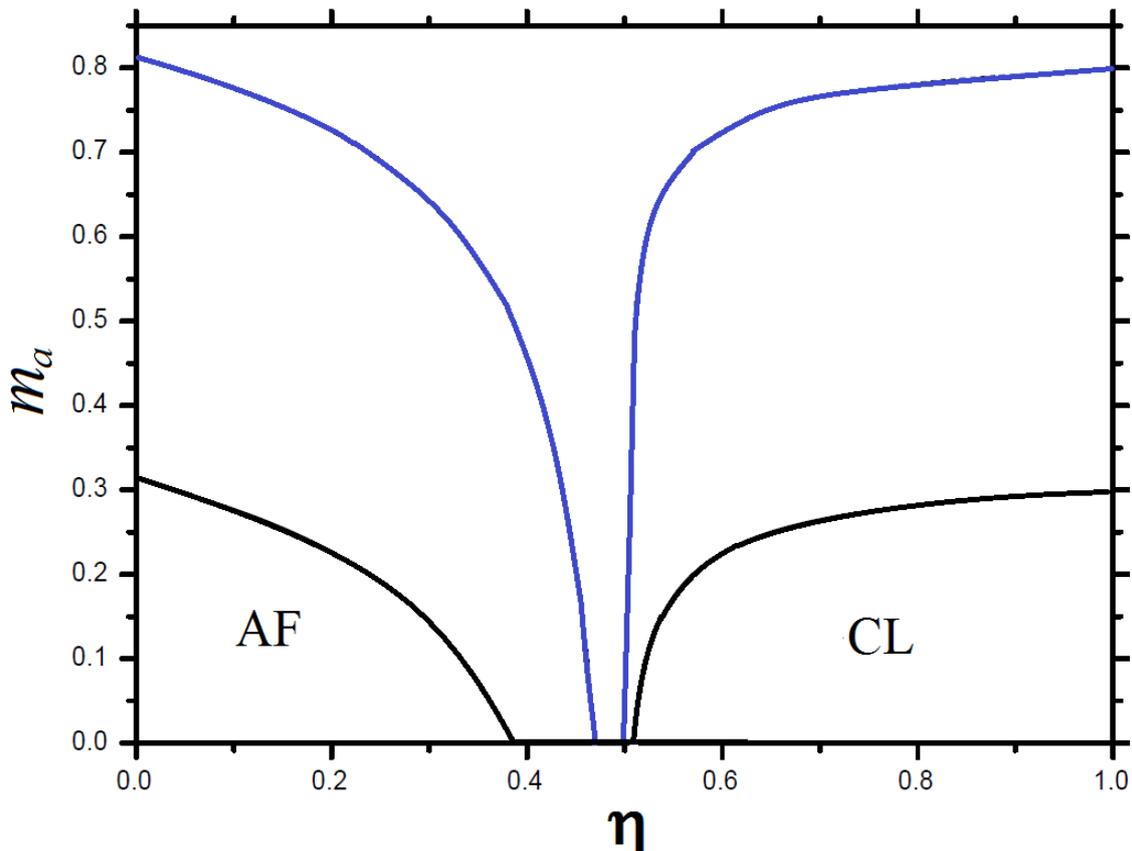
$$\begin{aligned} m_A &= \frac{1}{N_{uc}} \sum_i \langle S_i^{zA} \rangle = S_1 - \frac{4}{N} \sum_k U_{13}^2 + U_{14}^2 = -m_B \\ m_B &= \frac{1}{N_{uc}} \sum_i \langle S_i^{zB} \rangle = -S_1 + \frac{4}{N} \sum_k U_{13}^2 + U_{22}^2 \\ m_a &= \frac{1}{N_{uc}} \sum_i \langle S_i^{za} \rangle = S_2 - \frac{4}{N} \sum_k U_{23}^2 + U_{24}^2 = -m_b \\ m_b &= \frac{1}{N_{uc}} \sum_i \langle S_i^{zb} \rangle = -S_2 + \frac{4}{N} \sum_k U_{14}^2 + U_{24}^2 \end{aligned} \quad (3.17)$$

Em nossos cálculos numéricos fizemos todas as constantes física iguais a um e trocamos as somas por integrais na primeira zona de Brillouin.

### 3.3 Resultados

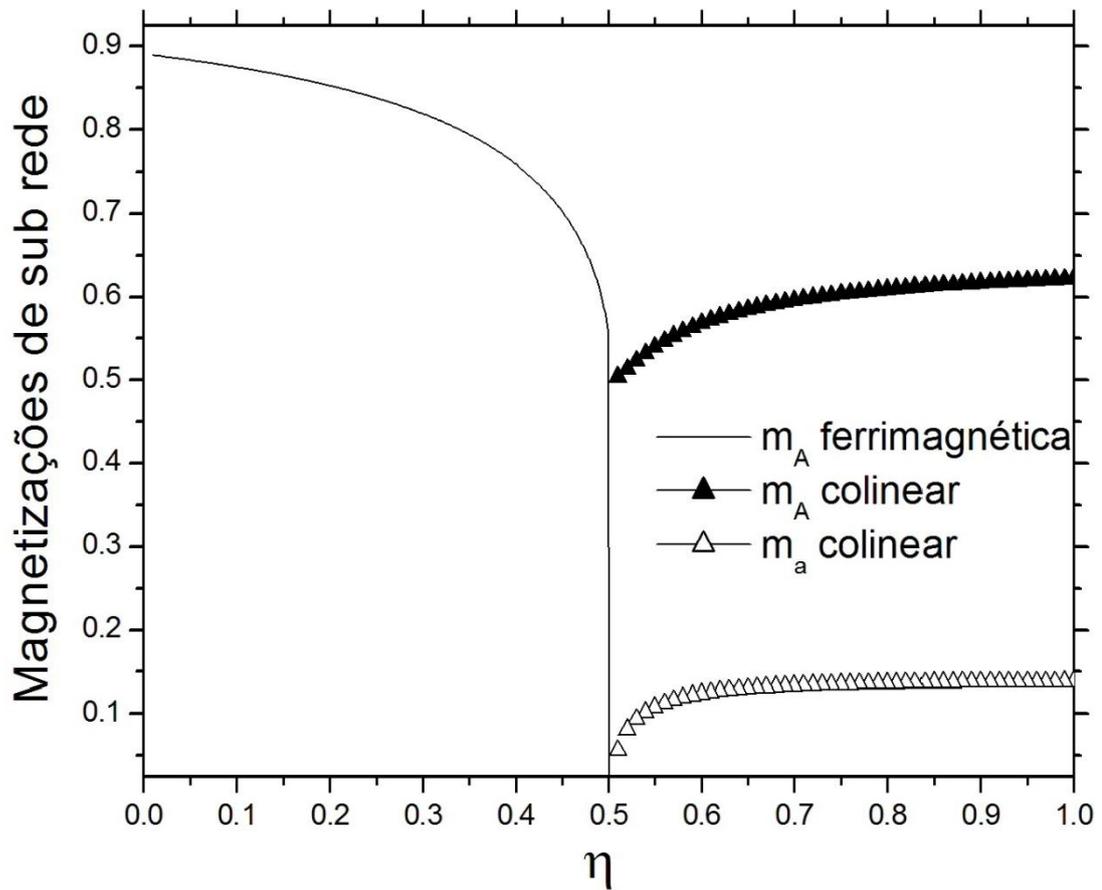
#### 3.3.1 Modelo isotrópico, $\Theta = 0$ .

Primeiramente vamos analisar os casos de *spins*  $S_1 = S_2$  e  $\Theta = 0$ . A Fig. 3.4 a), mostra as fases (AF), colinear (CL) e a fase paramagnética quântica (PQ) para os casos de *spin* 1/2 e 1. Na fase (AF), a magnetização de sub-rede decresce com o aumento  $\eta$  ( $\eta_1 = \eta_2$ ). Por outro lado, na fase (CL), as magnetizações de sub-rede aumentam com  $\eta$ . Os valores de frustração crítica são:  $\eta_{1c} = 0.3846$ ,  $\eta_{2c} = 0.5079$  para o caso de *spin* 1/2, e  $\eta_{1c} = 0.4707$  e  $\eta_{2c} = 0.5002$  para *spin* 1. A região desordenada ocorre no intervalo  $\eta_{1c} \leq \eta \leq \eta_{2c}$ , e decresce gradualmente com a magnitude dos *spins*, devendo desaparecer quando a magnitude dos *spins* tende ao infinito.

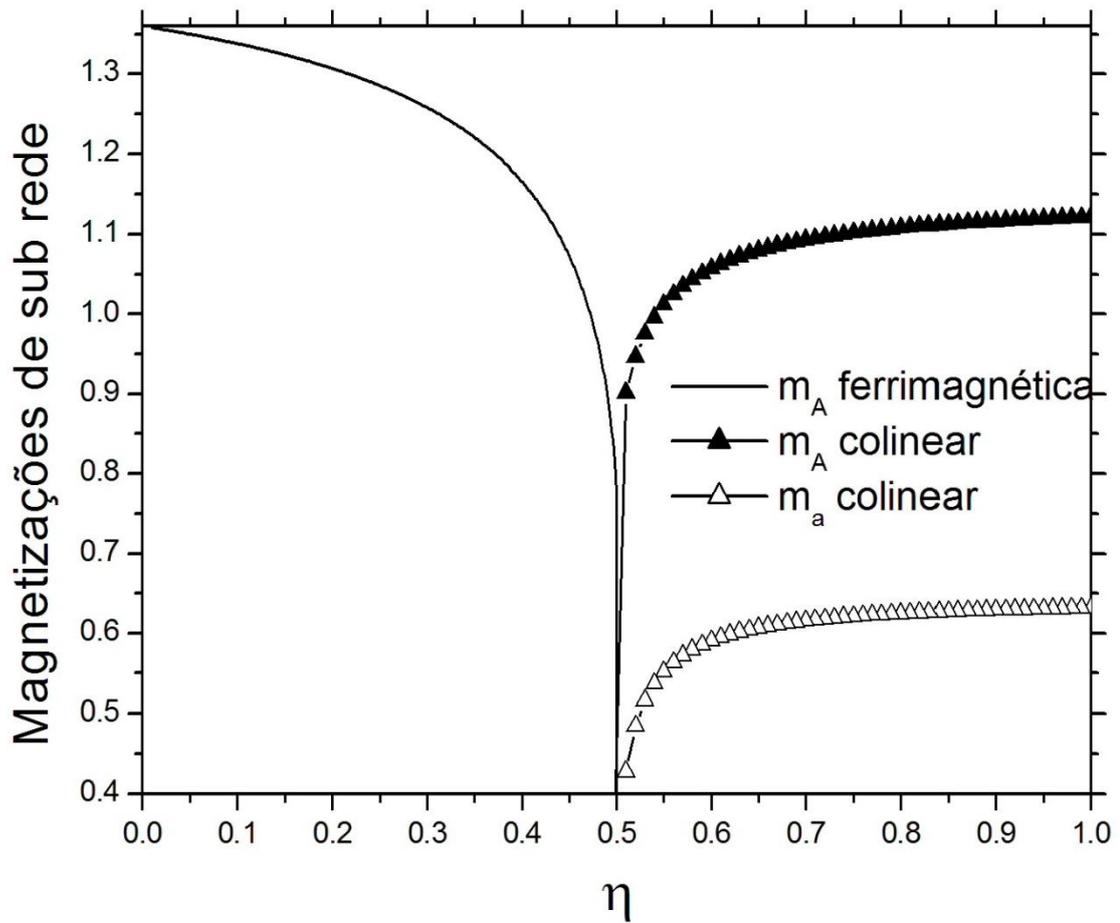


**Figura 3.4:** Magnetização de sub-rede "a" nas fases (AF) e (CL) como função de  $\eta$  para os casos de *spin* 1/2 e 1 na rede quadrada. Linha preta se refere ao caso *spin* 1/2, enquanto a linha azul representa a magnetização para o caso de *spin* 1.

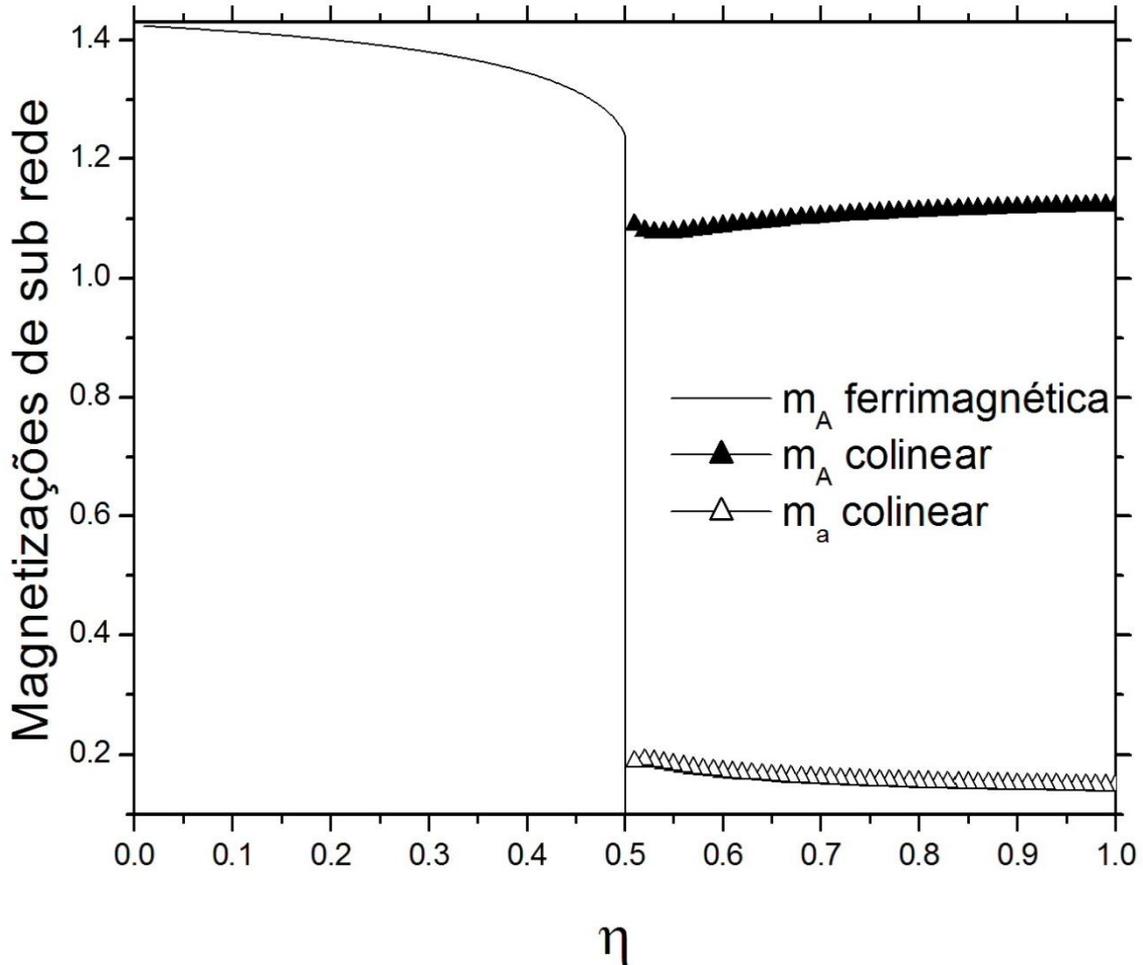
Quando consideramos o caso (Fr),  $S_1 \neq S_2$ , observamos nas Fig. 3.5, 3.6 e 3.7 que a fase desordenada desaparece completamente em todas as sub-redes. Neste caso, a transição de fase ocorre de forma direta entre as fases ordenadas.



**Figura 3.5:** Magnetização de sub-rede "a" e "A" nas fases (Fr) e (CL) como função de  $\eta$  para o caso  $(1,1/2)$  na rede quadrada. Linha cheia representa a magnetização de sub-rede  $m_A$  na fase (Fr), enquanto na fase (CL), os triângulos pretos representam a magnetização  $m_A$ , e os triângulos brancos,  $m_a$ .



**Figura 3.6:** Magnetização de sub-rede "a" e "A" nas fases (Fr) e (CL) para o caso de pares de spin  $(3/2,1)$  na rede quadrada. Linha preta representa a magnetização de sub-rede  $m_a$  na fase (Fr), enquanto as figuras geométricas são as magnetizações de sub-rede  $m_A$  e  $m_a$  respectivamente na fase (CL). Triângulos pretos, magnetização  $m_A$  enquanto os triângulos brancos representam a magnetização  $m_a$ .



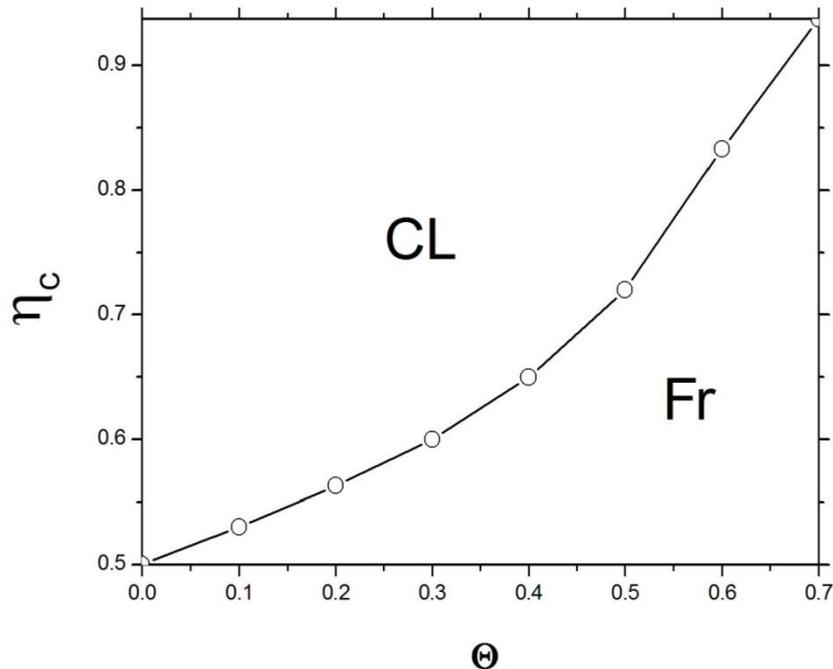
**Figura 3.7:** Magnetização de sub-rede "a" e "A" nas fases (Fr) e (CL) para o caso de pares de *spin* (3/2,1/2) na rede quadrada. Linha cheia representa a magnetização de sub-rede  $m_a$  na fase (Fr), enquanto as figuras geométricas são as magnetizações de sub-rede  $m_A$  e  $m_a$  respectivamente na fase (CL). Triângulos pretos, magnetização  $m_A$  enquanto os triângulos brancos representam a magnetização  $m_a$ .

### 3.3.2 Modelo anisotrópico

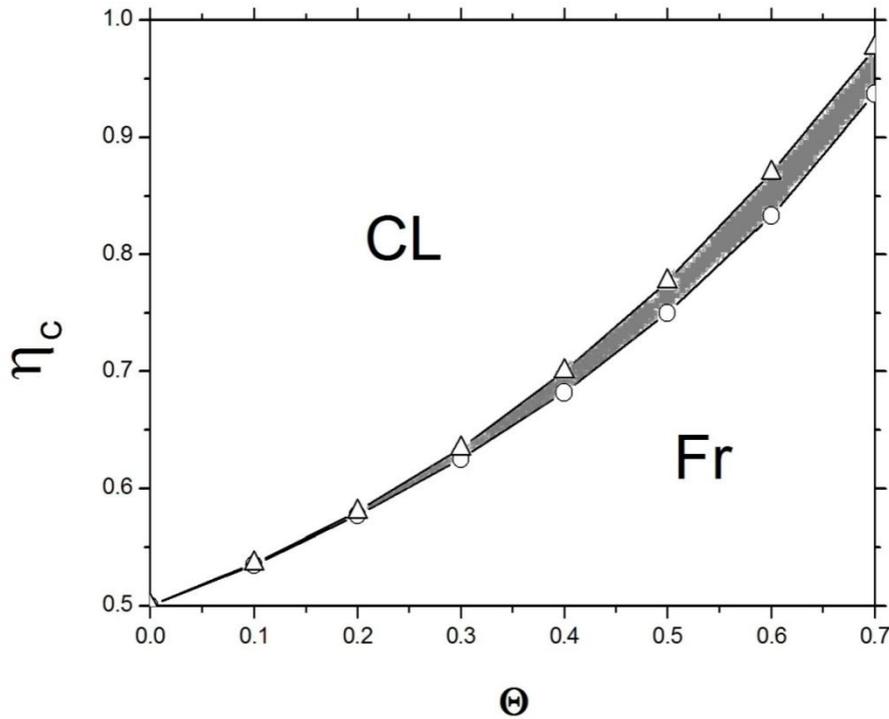
Na Fig. 3.8, mostramos o diagrama de fase no plano  $\eta$ - $\Theta$  para a combinação de spins (1,1/2). Neste caso,  $\Theta$  dá mais peso a frustração  $\eta \equiv \eta_2 = \frac{J_2^{S_1}}{J_1}$  dos spins 1. Pode-se ver neste diagrama, a ausência da fase desordenada. Existe apenas uma linha de transição entre as fases (Fr) e (CL), portanto,  $\eta_{1c} = \eta_{2c}$ , para qualquer valor de  $\Theta$ . Mostramos apenas o comportamento do caso (1,1/2) na Fig. 3.8, pois todas as combinações de spins 1, 1/2 e 3/2, tem o mesmo comportamento mostrado na Fig. 3.8, isto é, ausência de fase desordenada.

Na Fig. 3.9, mostramos que a anisotropia  $\Theta$  pode favorecer o aparecimento de da fase desordenada, apenas quando  $\Theta$  reforça a frustração  $\eta \equiv \eta_2 = \frac{J_2^{S_2}}{J_1}$  dos spins 1/2. Esse comportamento foi observado apenas para o caso (1,1/2). As outras combinações, (3/2,1/2), (3/2,1), não apresentam fase desordenada, mesmo quando  $\Theta$  dá mais peso as interações entre os spins semi inteiros.

Analisando a Fig. 3.9, pode-se ver que para  $\Theta = 0.5$  temos uma pequena fase desordenada no intervalo  $\eta_{1c} < \eta < \eta_{2c}$ , com  $\eta_{1c} = 0.74$  e  $\eta_{2c} = 0.77$ . Essa pequena fase desordenada tende a aumentar, à medida que a anisotropia  $\Theta$  aumenta.



**Figura 3.8:** Diagrama de fase no plano  $\eta$ - $\Theta$  para o caso (1,1/2) anisotrópico na rede quadrada. Frustração entre os *spins* 1 sempre maior que a frustração entre *spins* 1/2. Círculos representam a linha de transição de fase entre a fase (Fr) e (CL).



**Figura 3.9:** Diagrama de fase no plano  $\eta$ - $\Theta$  para o caso (1,1/2) anisotrópico na rede quadrada. Frustração entre os *spins* 1/2 maior que a frustração entre *spins* 1. Círculos representam a linha de transição entre a fase (Fr) e a fase desordenada. Triângulos representam linha de transição entre a fase (CL) e a desordenada. A região magneticamente desordenada foi representada pela região escura.

### 3.4 Conclusão

Estudamos o modelo ferrimagnético com anisotropia nas interações de segundos vizinhos. Usando teoria de ondas de spin linear, calculamos as frustrações críticas para as seguintes combinações de *spins*, (1,1), (1/2,1/2), (1,1/2), (1,3/2) e (3/2,1/2). Quando  $S_1=S_2$  e  $\Theta = 0$ , encontramos uma região desordenada no diagrama de fase que decresce com o aumento do spin. Por outro lado, se  $S_1 \neq S_2$ , a fase desordenada desaparece. O desaparecimento da fase desordenada indica que um sistema Ferrimagnético não é capaz de suportar estados singletos. No entanto, uma pequena anisotropia  $\Theta$  que favorece a frustração dos *spins* 1/2, no caso (1,1/2), é capaz de induzir uma região magneticamente desordenada.

## Capítulo 4

### Modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético $2d$ com anisotropia de eixo fácil

Uma generalização para o modelo  $J_1 - J_2$  é o modelo  $J_1 - J'_1 - J_2$  [75-82], ver Fig. 4.1. Nesse modelo, existem dois tipos de constante de *exchange* entre os primeiros vizinhos. A primeira interação foi chamada de  $J_1$ , no qual conecta os spins na direção  $x$ . A segunda interação foi denominada de  $J'_1 \leq J_1$ , e conecta os spins na direção  $y$ . Entre segundos vizinhos, existe apenas um tipo de interação, essa interação foi denotada por  $J_2$ .

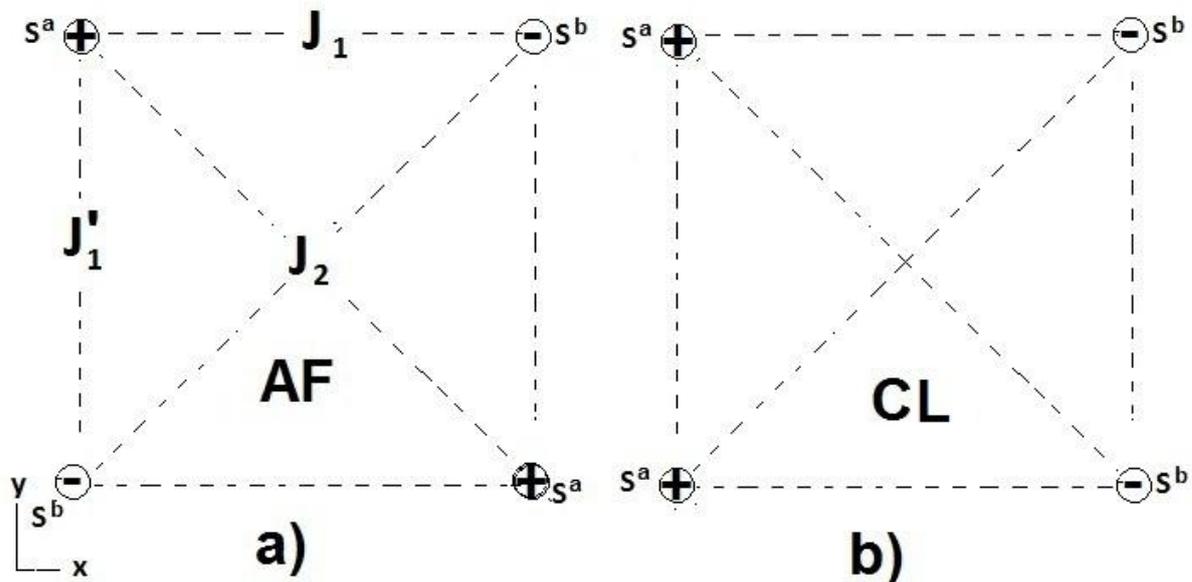


Figura 4.1: Fase antiferromagnética de Néel a). Fase colinear b).

Este modelo para o caso de *spin*  $1/2$  não é um modelo de interesse puramente acadêmico, desde que existe uma grande variedade de materiais a base de fosfato de vanádio ( $\text{Pb}_2\text{VO}(\text{PO}_4)_2$ ,  $\text{SrZnVO}(\text{PO}_4)$ ,  $\text{BaZnVO}(\text{PO}_4)$  e  $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$ ), no qual à sua estrutura apresenta uma anisotropia espacial de *exchange* ao longo das direções  $x$  e  $y$  [83].

Usando técnica de cluster acoplado, Bishop e colaboradores [82] não encontraram uma fase desordenada no diagrama de fase em  $T = 0$  para o modelo  $J_1 - J_1' - J_2$  no caso de *spin* 1. Sistemas com *spin*  $S=1$  podem apresentar anisotropia de íon único  $D$ , como por exemplo, eixo fácil (ver seção 2.3). Em duas dimensões, e na ausência da anisotropia, o sistema não apresenta magnetização espontânea de sub-rede em temperaturas finitas.

O modelo de Heisenberg de *spin* 1 com anisotropia de eixo fácil pode ser estudado em conexão com resultados experimentais baseados em sólidos moleculares em monocamadas de grafite [84].

Em baixas temperaturas, a teoria de ondas de spin padrão é capaz de reproduzir resultados satisfatórios para o modelo de eixo fácil. Correções devido às interações entre as ondas de spin em altas temperaturas podem ser estudadas via tratamento auto-consistente [39]. Usando teoria de ondas de spin modificada, estudaremos neste capítulo o modelo  $J_1 - J_1' - J_2$  em temperatura zero e finita.

## 4.1 Fase de Antiferromagnética (AF)

Para pequenos valores do parâmetro  $\eta$ , a interação entre primeiros vizinhos é favorecida. Supomos então que o estado fundamental clássico do antiferromagneto apresenta ordem de Néel, ou seja, com duas sub-redes "a" e "b", Fig. 4.1 a). Os *spins up* e *down* são representados por "+" e "-", ambos na direção  $z$ . Na fase de Néel, Fig. 4.1 a), os *spins* da sub-rede "a" interagem com os *spins* da sub-rede "b" com interação  $J_1$  ao longo da direção  $x$ . Por outro lado, os *spins* na sub-rede "a" interagem com os *spins* na sub-rede "b" na direção  $y$  por meio de  $J_1'$ .

A interação  $J_2$  entre segundos vizinhos ocorre apenas entre os *spins* da mesma sub-rede, ou seja, *spins* da sub-rede "a" interagem apenas com *spins* da sub-rede "a", e os *spins* da sub-rede "b" interagem apenas com *spins* da sub-rede "b". Na fase (AF), o Hamiltoniano do sistema será escrito como

$$H^{AF} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^b + J_1' \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^b + \frac{J_2}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^a + \vec{S}_i^b \cdot \vec{S}_j^b) - D \sum_i (S_i^z)^2 \quad (4.1)$$

sendo,  $D > 0$ , a anisotropia de eixo fácil. As somas em  $\langle i,j \rangle$ ,  $\langle\langle i,j \rangle\rangle$  são realizadas entre primeiros e segundos vizinhos.

As flutuações em torno do estado fundamental clássico serão calculadas levando em consideração a interação entre as ondas de *spin*, portanto, estudaremos o Hamiltoniano (4.1) usando a transformação de Dyson-Maleev (DM) [85,86]. Na representação de (DM), os operadores de spin são trocados pelos seguintes operadores bosonico

$$\begin{aligned} S_i^+ &= \sqrt{2S} \left( 1 - \frac{a_i^+ a_i}{2S} \right) a_i \\ S_i^- &= \sqrt{2S} a_i^+ \\ S_i^z &= S - a_i^+ a_i, \end{aligned} \quad (4.2)$$

Para a sub-rede "a", e por

$$\begin{aligned} S_i^+ &= \sqrt{2S} b_i^+ \left( 1 - \frac{b_i^+ b_i}{2S} \right) \\ S_i^- &= \sqrt{2S} b_i \\ S_i^z &= -S + b_i^+ b_i, \end{aligned} \quad (4.3)$$

Para a sub-rede "b". Nesta representação,  $a_i^+$  ( $a_i$ ) e  $b_i^+$  ( $b_i$ ) são os operadores de criação e aniquilação no sitio  $i$  nas sub-redes "a" e "b", respectivamente. Aplicando (4.2) e (4.3) em (4.1), e realizando uma transformada de Fourier,

$$A_i = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k e^{ik \cdot R_i} A_k \quad b_i = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k e^{-ik \cdot R_i} b_k \quad (4.4)$$

em  $H_{DM}$ , podemos escrever

$$H_{DM} = H^{(0)} + H^{(2)} + H^{(4)} \quad (4.5)$$

Na Eq. (4.5),  $H^{(0)}$  contém termos constantes,  $H^{(2)}$  contém termos com produto de dois operadores e  $H^{(4)}$  representa a interação entre magnons, portanto é composto por produtos de quatro operadores. A energia clássica  $H^{(0)}$ , e o Hamiltoniano quadrático  $H^{(2)}$  são dados por

$$H^{(0)} = -z_1 N J_1 S^2 \left( 1 + \lambda - \frac{z_2}{z_1} \eta + \bar{D} \right) \quad (4.6)$$

$$H^{(2)} = J_1 \sum_k A_{0k} (a_k^+ a_k + b_k^+ b_k) + C_{0k} (a_k^+ b_k^+ + a_k b_k) \quad (4.7)$$

Os coeficientes  $A_{0k}$  e  $C_{0k}$  são

$$\begin{aligned} A_{0k} &= z_1 S[1 + \lambda] + z_2 S \eta [\gamma^{(2)}(k) - 1] + S \bar{D} \\ C_{0k} &= z_1 S \gamma^{(1)}(k) \end{aligned} \quad (4.8)$$

$$\text{Sendo, } \bar{D} = \frac{D}{J_1} \quad \lambda = \frac{J'_1}{J_1} \quad \eta = \frac{J_2}{J_1} \quad z_1 = 2 \text{ e } z_2 = 4$$

Definimos o fator de estrutura de primeiros vizinhos e segundos vizinhos como

$$\begin{aligned} \gamma^{(1)}(k) &= (\cos(k_x) + \lambda \cos(k_y)) \\ \gamma^{(2)}(k) &= \cos(k_x) \cos(k_y) \end{aligned}$$

O termo de quatro operadores de  $H_{DM}$  é dado por

$$\begin{aligned} H^{(4)} &= \\ &- J_1 \sum_{1,2,3} z_1 [\gamma^{(1)}(1) a_{2+3-1}^+ a_2 a_3 b_1 + \gamma^{(1)}(2+3-1) a_{2+3-1}^+ b_2^+ b_3^+ b_1 - 2\gamma^{(1)}(3-1) a_{2+3-1}^+ a_2 b_3^+ b_1] \\ &+ z_2 \eta [\gamma_2(1) a_{2-1+3}^+ a_2 a_3 a_1^+ + \gamma_2(1-2+3) a_{1-2+3}^+ a_2^+ a_3 a_1 - 2\gamma_2(1-3) a_{1+2-3}^+ a_2 a_3^+ a_1 \\ &+ \gamma_2(1) b_{1-2+3}^+ b_2^+ b_3 b_1 + \gamma_2(2-1+3) b_{2-3+1}^+ b_2^+ b_3^+ b_1 - 2\gamma_2(3-1) b_{1+2-3}^+ b_2 b_3^+ b_1] \\ &- \bar{D} a_{1+2-3}^+ a_2 a_3^+ a_1 - \bar{D} b_{1+2-3}^+ b_2 b_3^+ b_1 \end{aligned} \quad (4.9),$$

sendo que  $\gamma^{(1)}(\dots)$  e  $\gamma_2(\dots)$  são os fatores de estrutura de primeiros e segundos vizinhos definidos acima. Usamos a notação  $1=k_1, 2=k_2, 3=k_3, \dots, j = k_j$ . Definindo a transformação de Bogoliubov como

$$a_k^+ = U_k \alpha_k^+ + V_k \beta_k \quad b_k^+ = V_k \alpha_k + U_k \beta_k^+,$$

e substituindo em (4.7) e (4.9), ficamos com um Hamiltoniano escrito em termos dos operadores  $\alpha_k$  e  $\beta_k$ . Realizando um desacoplamento de campo médio em  $H^{(4)}$  (ver apêndice B), o Hamiltoniano total  $H^{(2)} + H^{(4)}$ , já diagonalizado, pode ser escrito como

$$H_{DM} = J_1 \sum_k \Omega_k (\alpha_k^+ \alpha_k + \beta_k^+ \beta_k) \quad (4.10).$$

A relação de dispersão é dada por

$$\Omega_k = (2A_{0k} + \zeta_1)(U_k^2 + V_k^2) + 2U_k V_k (C_{0k} + \zeta_2) \quad (4.11),$$

e os coeficientes  $U_k$  e  $V_k$  são expressos por

$$(U_k)^2 = \frac{1}{2} \left[ \frac{2A_{0k} + \zeta_1}{\sqrt{(A_{0k} + \zeta_1)^2 - 4(C_{0k} + \zeta_2)^2}} + 1 \right] \quad (V_k)^2 = \frac{1}{2} \left[ \frac{2A_{0k} + \zeta_1}{\sqrt{(A_{0k} + \zeta_1)^2 - 4(C_{0k} + \zeta_2)^2}} - 1 \right],$$

$$\zeta_1 = -2(1 + \lambda)(\Gamma^{(1)} - \Gamma^{(2)}) + 2\eta[(1 - \gamma^{(2)}(k))(2\Gamma^{(1)} - \Gamma^{(3)})] - \bar{D}(\Gamma^{(4)})$$

$$\zeta_2 = -2\gamma^{(1)}(k)(\Gamma^{(1)} - \Gamma^{(2)}).$$

As funções auto-consistentes  $\Gamma^{(i)}$  são dadas por

$$\begin{aligned}\Gamma^{(1)} &= \sum_q (U_q^2 n_q + V_q^2 (1 + n_q)) \\ \Gamma^{(2)} &= \sum_q \cos(q_x) U_q V_q (1 + 2n_q) \\ \Gamma^{(3)} &= \sum_q \gamma^{(2)}(q) (U_q^2 + V_q^2) (1 + 2n_q) \\ \Gamma^{(4)} &= \sum_q (U_q^2 (1 + 4n_q) + V_q^2 (3 + 4n_q))\end{aligned}\quad (4.12)$$

A quantidade  $n_q$ , representa a distribuição de Bose-Einstein, ou seja,

$$\langle \alpha_k^+ \alpha_k \rangle = \langle \beta_k^+ \beta_k \rangle = \frac{1}{\exp(\beta \Omega_k) - 1}$$

com  $\beta = 1/k_B T$ , onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura. Para calcular as propriedades termodinâmicas, precisamos resolver o sistema de equações auto-consistente gerado pelos  $\Gamma_i$  ( $i=1..3$ ).

As propriedades termodinâmicas podem ser obtidas da energia interna

$$U = \sum_k n_k \Omega_k \quad (4.13)$$

As magnetizações de sub-rede são dadas por

$$m_A = S_1 - \frac{2}{N} \sum_k u_k^2 \langle \alpha_k^+ \alpha_k \rangle + v_k^2 \langle \beta_k^+ \beta_k \rangle + v_k^2 \quad (4.14)$$

sendo que  $m_b = -m_a$ .

## 4.2 Fase colinear (CL)

O estado fundamental clássico para a fase (CL) apresenta ordenamento colinear antiferromagnético com duas sub-redes "a" e "b", Fig. 4.1 b). Os spins da sub-rede "a" interagem com os spins da sub-rede "a" na direção  $x$  com interação de exchange  $J_1$ , enquanto os spins na sub-rede "b" interagem com os spins na sub-rede "b" na direção  $y$  por meio de  $J_1$ . A interação entre segundos vizinhos  $J_2$ , conecta os spins "a" com os spins da sub-rede "b". O Hamiltoniano na fase (CL) pode ser expresso por

$$H^{CL} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^b + \frac{J'_1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^a + \vec{S}_i^b \cdot \vec{S}_j^b) + J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^b - D \sum_i (S_i^z)^2 \quad (4.15)$$

O Hamiltoniano para na fase (AF), Eq.(4.1) pode ser transformado em (4.15), por meio da transformação

$$\begin{aligned} z_1 \lambda &\rightarrow z_2 \eta \\ z_2 \eta &\rightarrow z_1 \lambda \\ z_1 \lambda \cos(k_y) &\rightarrow z_2 \eta \gamma^{(2)}(k) \\ \gamma^{(2)}(k) &\rightarrow \cos(k_y) \end{aligned} \quad (4.16)$$

Isso é verdade, porque na fase (AF) a constante  $J_2$  desempenha o papel de  $J'_1$ , na fase (CL). Neste caso, todas as quantidades já calculadas na seção anterior, podem ser rescritas na fase (CL), por meio das transformações (4.16).

As expressões para  $H^{(0)}$  e  $H_{DM}$  são dadas por

$$H^{(0)} = -NJ_1 R(1 - \lambda + 2\eta - \bar{D}) S^2 \quad (4.17)$$

$$H_{DM} = J_1 \sum_k \hbar \Omega_k (\alpha_k^+ \alpha_k + \beta_k^+ \beta_k) \quad (4.18)$$

com

$$\hbar \Omega_k = (2A'_{0k} + \zeta'_1)(U_k^2 + V_k^2) + 2U_k V_k (C'_{0k} + \zeta'_2) \quad (4.19)$$

As quantidades  $U_k$  e  $V_k$  são definidas por

$$(U_k)^2 = \frac{1}{2} [\Lambda_k + 1]$$

$$(V_k)^2 = \frac{1}{2} [\Lambda_k - 1]$$

$$\Lambda_k = \frac{2A'_{0k} + \zeta'_1}{\sqrt{(A'_{0k} + \zeta'_1)^2 - 4(C'_{0k} + \zeta'_2)^2}}$$

e os novos coeficientes,  $A'_{0k}$ ,  $C'_{0k}$ ,  $\zeta'_1$  e  $\zeta'_2$ , são calculados como

$$A'_{0k} = z_1 S + z_1 \lambda S [\cos(k_y) - 1] + z_2 \eta S + DS$$

$$C'_{0k} = z_1 S \cos(k_x) + z_2 \eta S \gamma^{(2)}(k)$$

$$\zeta'_1 = -2\Gamma^{(1)}(1 + 2\eta + \lambda(1 - \cos(k_x) - \bar{D}) + \Gamma^{(3)}\lambda(\cos(k_y) - 1) + 2\Gamma^{(2)} - \bar{D}\Gamma^{(4)})$$

$$\zeta'_2 = -(2\cos(k_x) + 4\eta\gamma^{(2)}(k))\Gamma^{(1)} + (2\cos(k_x)\Gamma^{(2)} + 4\eta\gamma^{(2)}(k)\Gamma^{(5)}),$$

sendo que as funções auto-consistentes  $\Gamma^{(1,2,3 \text{ e } 4)}$ , tem a mesma forma que (4.12).

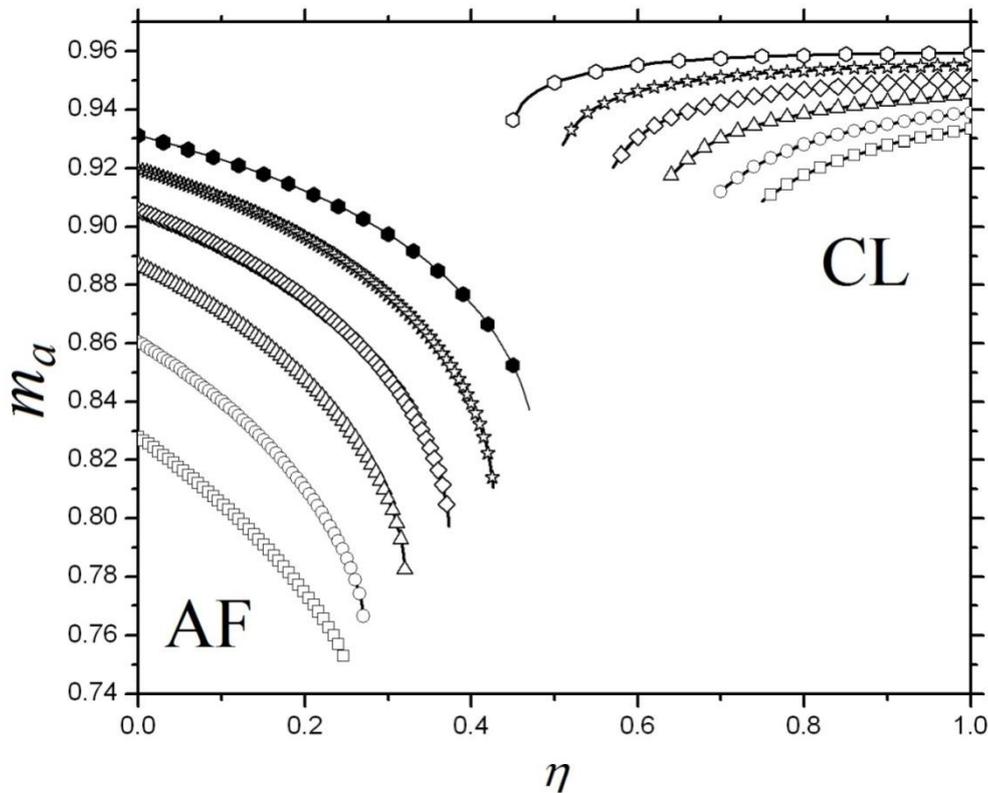
No entanto, a nova função  $\Gamma^{(5)}$  é dada por

$$\Gamma^{(5)} = \sum_{q'} \gamma^{(2)}(q) U_q V_q (1 + 2n_q).$$

Na fase (CL), passamos a ter agora um sistema com cinco equações auto consistentes.

### 4.3 Resultados

Primeiro estudamos o caso em  $T = 0$ . Na Fig. (4.2) mostramos as magnetizações de sub-rede nas fases (AF) e (CL) como função do parâmetro  $\eta$ . Consideramos  $D$  fixo e  $J_1 = J_1'$ . Na fase (AF), a magnetização decresce com  $\eta$ , enquanto na fase (CL), a magnetização aumenta com  $\eta$ . Na vizinhança do parâmetro crítico  $\eta_c$ , as magnetizações em ambas as fases decrescem rapidamente até sofrer uma queda abrupta em  $\eta_c$ . Neste ponto, a magnetização pode ter se tornado zero de forma descontínua, ou simplesmente a sua queda ocorre em um intervalo muito pequeno de  $\eta$ , tal que gere imprecisão numérica na hora de resolver as equações auto-consistentes.



**Figura 4.2:** Diagrama de fase. Magnetizações de sub-rede  $m_a$  nas fases (AF) e (CL) para vários valores de  $D$ ,  $\lambda = 1$ . Quadrados  $D = 0.1$ , círculos  $D = 0.5$ , triângulo  $D = 1$ , diamante  $D = 1.5$ , estrela  $D = 2$  e hexágonos  $D = 2.37$ .

No caso de ondas de spin linear, para pequenos valores de  $D$ , os parâmetros críticos são aproximadamente  $\eta_{1c} = 0.47$  e  $\eta_{2c} = 0.50$  (ver seção 3.4). Existe uma pequena região magneticamente desordenada para  $0.47 < \eta < 0.50$ .

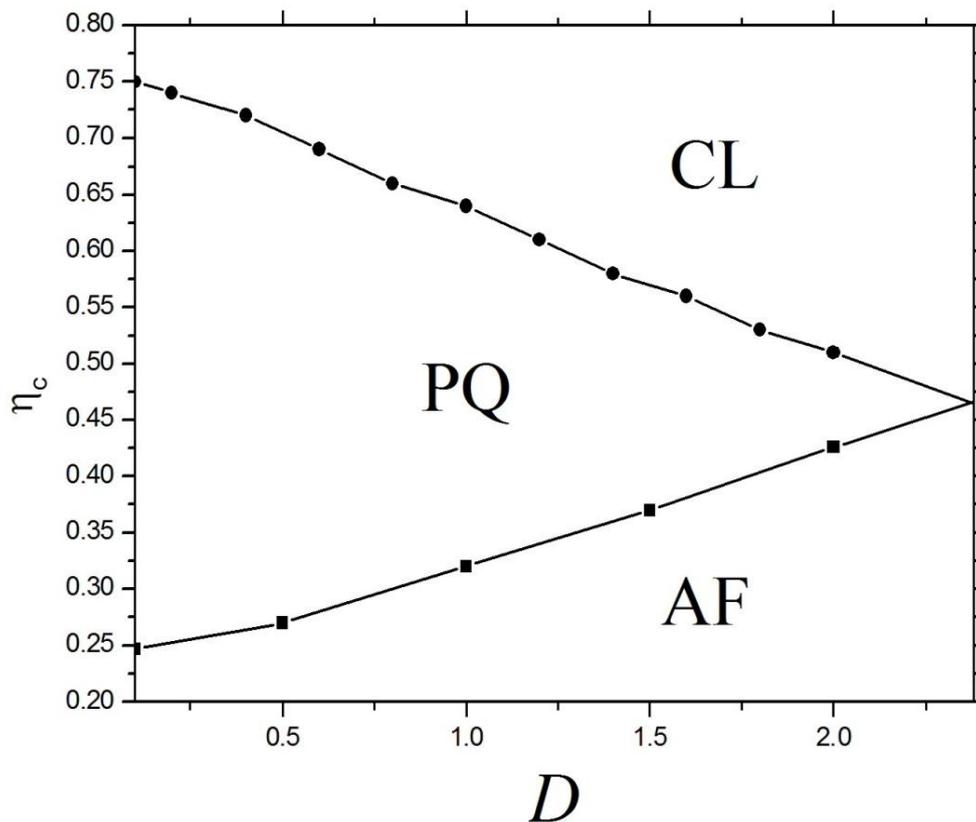
Quando levamos em conta as interações entre magnons, os parâmetros críticos  $\eta_{1c}$  e  $\eta_{2c}$  são reduzidos. Na Fig.(4.2), pode-se ver, por exemplo, que para  $D = 0.1$ , temos que  $\eta_{1c} = 0.24$  e  $\eta_{2c} = 0.75$ . Significa que a interação entre os magnons está destruindo as fases ordenadas e favorecendo a fase desordenada mesmo em  $T=0$  e para pequenos valores de  $D$ .

Na Fig. (4.3), apresentamos  $\eta_c$  como função do parâmetro de anisotropia  $D$  e para  $\lambda = 1$ . Mostramos também as regiões das fases (AF), (CL) e paramagnética quântica (PQ). A anisotropia  $D$  diminui a região magneticamente desordenada entre as fases ordenadas. Isso ocorre porque a anisotropia favorece o ordenamento antiferromagnético. Quando  $D = 0.5$ , os valores críticos de frustração são dados por:  $\eta_{1c} = 0.26$  e  $\eta_{2c} = 0.69$ . Para  $D = 1.5$  e  $2$ , temos respectivamente  $\eta_{1c} = 0.37$ ,  $\eta_{2c} = 0.56$  e  $\eta_{1c} = 0.42$ ,  $\eta_{2c} = 0.51$ . Finalmente se  $D \geq 2.37$ , a região magneticamente desordenada desaparece e não podemos mais encontrar um valor de  $\eta$  onde a magnetização da sub-rede torna-se zero. Neste caso, a magnetização de sub-rede de ambas as fases tem o mesmo valor quando  $\eta = \eta^* (D = 2.37) = 0.47$ . Este resultado está de acordo com o limite para grandes valores de  $D$ , no qual o comportamento físico deve se aproximar das propriedades do modelo clássico de Ising, que possui transição de fase em  $\eta = 0.5$ .

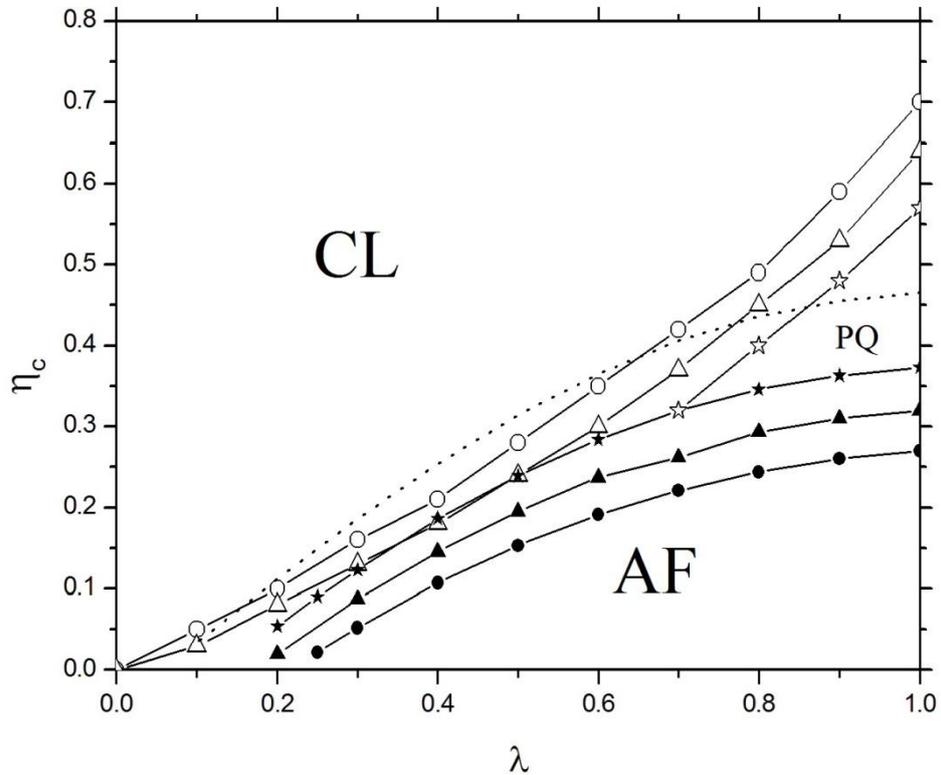
Na Fig. 4.4, mostramos o diagrama de fase no plano  $\eta - \lambda$  para alguns valores de  $D$ . O parâmetro  $\lambda$  representa o acoplamento entre as cadeias unidimensionais na rede  $2d$ . Quando  $\lambda = 0$ , o modelo se aproxima do caso unidimensional sem magnetização espontânea, portanto  $\eta_c$  também tende a zero. Na fase (AF), a frustração crítica vai a zero em um valor de  $\lambda$  diferente de zero. Por outro lado, na fase (CL), à medida que o sistema se torna unidimensional, a frustração crítica se torna nula.

No intervalo  $0 \leq D < 2.37$  existe uma fase magneticamente desordenada (PQ) entre as duas fases ordenadas que decresce com o aumento de  $D$ . Em  $D = 1.5$  (estrela), pode-se notar que as linhas de transição das fases (AF) e (CL) se cruzam

em  $\lambda = 0.7$ . Esse resultado sugere um ponto crítico quântico no diagrama de fase que depende de  $D$ .

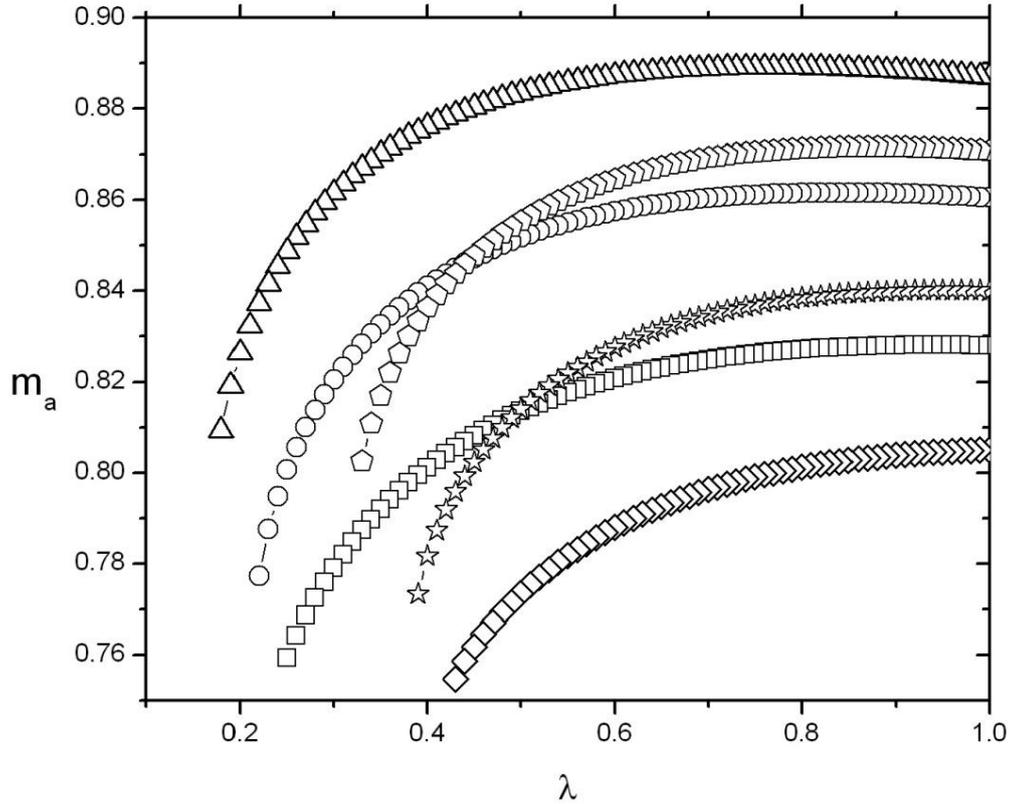


**Figura 4.3:** Frustração crítica  $\eta_c$  como função de  $D$  ( $\lambda=1$ ) à temperatura zero. Quadrados representam a linha da transição da fase (AF) para (QP) e círculo (CL) to (PQ).



**Figura 4.4:** Frustração crítica  $\eta_c$  como função de  $\lambda$  em  $T = 0$  para alguns valores de  $D$ . As Linhas de transição de fase (AF) para (PQ) são representadas pelas figuras pretas, enquanto as transições da fase (CL) para a fase (PQ) é representada pelas figuras brancas. Círculos  $D = 0.5$ , triângulo  $D = 1$ , estrela  $D = 1.5$  e linha tracejada  $D = 2.37$ .

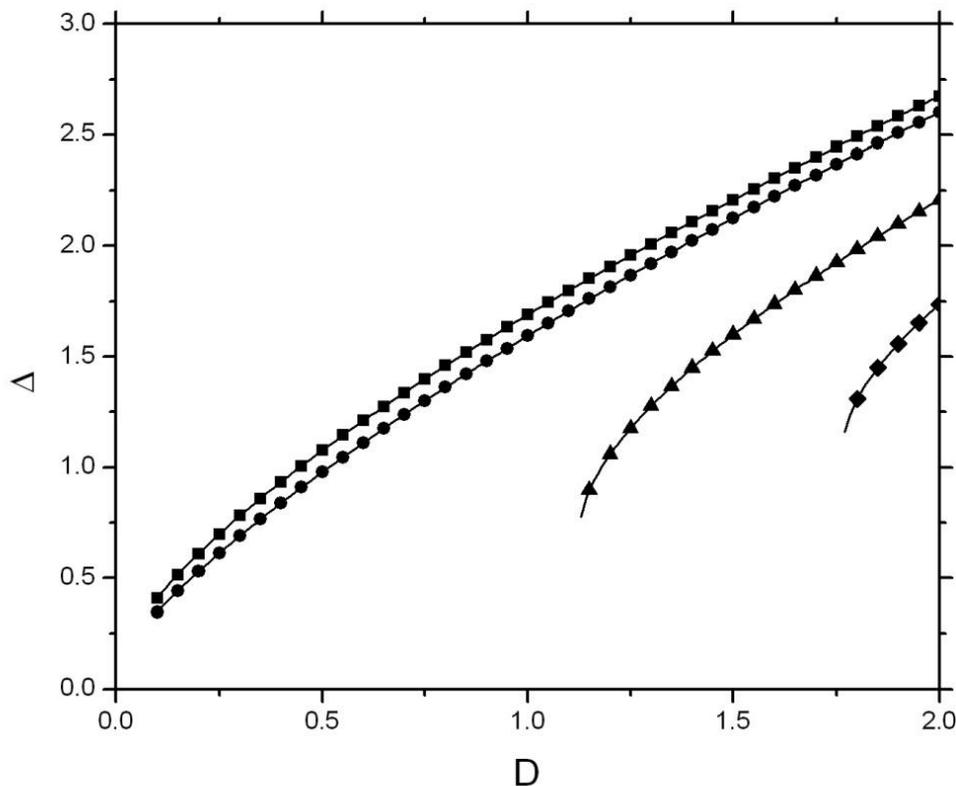
Na Fig. (4.5), analisamos os efeitos dos parâmetros  $\lambda$ ,  $\eta$  e  $D$  sobre a magnetização de sub-rede  $m_a$  da fase (AF). A magnetização decresce com o parâmetro  $\lambda$  e se sofre uma queda abrupta em  $\lambda = \lambda^*$ . A anisotropia  $D$  aumenta a magnetização e diminui  $\lambda^*$ , enquanto  $\eta$  aumenta  $\lambda^*$ .



**Figura 4.5:** Magnetização de sub-rede  $m_a$  da fase (AF) como função de  $\lambda$  em  $T=0$  para  $D$  e  $\eta$  fixos. Quadrado,  $D = 0.1$  e  $\eta = 0$ , círculo,  $D = 0.5$  e  $\eta = 0$ , triângulo  $D = 1$  e  $\eta = 0$ , diamante  $D = 0.1$  e  $\eta = 0.1$ , estrela  $D = 0.5$  e  $\eta = 0.1$ , pentágono  $D = 1$ ,  $\eta = 0.1$ .

O efeito de  $D$  e  $\lambda$  sobre o *gap* ( $\Delta = \Omega(k = \pi)$ ) do sistema pode ser visto na Fig. 4.6. O *gap* tende a se anular em  $D$  próximo de zero no sistema com  $\lambda$  próximo de 1, ver os casos representados por quadrados ( $\lambda=1$ ) e círculos ( $\lambda=0.8$ ). Em modelos quase bidimensionais, ver curvas formadas por triângulos ( $\lambda=0.6$ ) e diamantes ( $\lambda=0.4$ ), o *gap* decresce rapidamente à medida que  $D$  decresce, ou seja, para o

sistema apresentar *gap*, é necessário um alto valor de anisotropia.



**Figura 4.6:** *Gap* da fase (AF) como função de  $D$  para  $\lambda$  fixo e  $\eta = 0$ . Quadrado  $\lambda = 1$ , círculo  $\lambda = 0.8$ , triângulo  $\lambda = 0.6$  e diamante  $\lambda = 0.4$ .

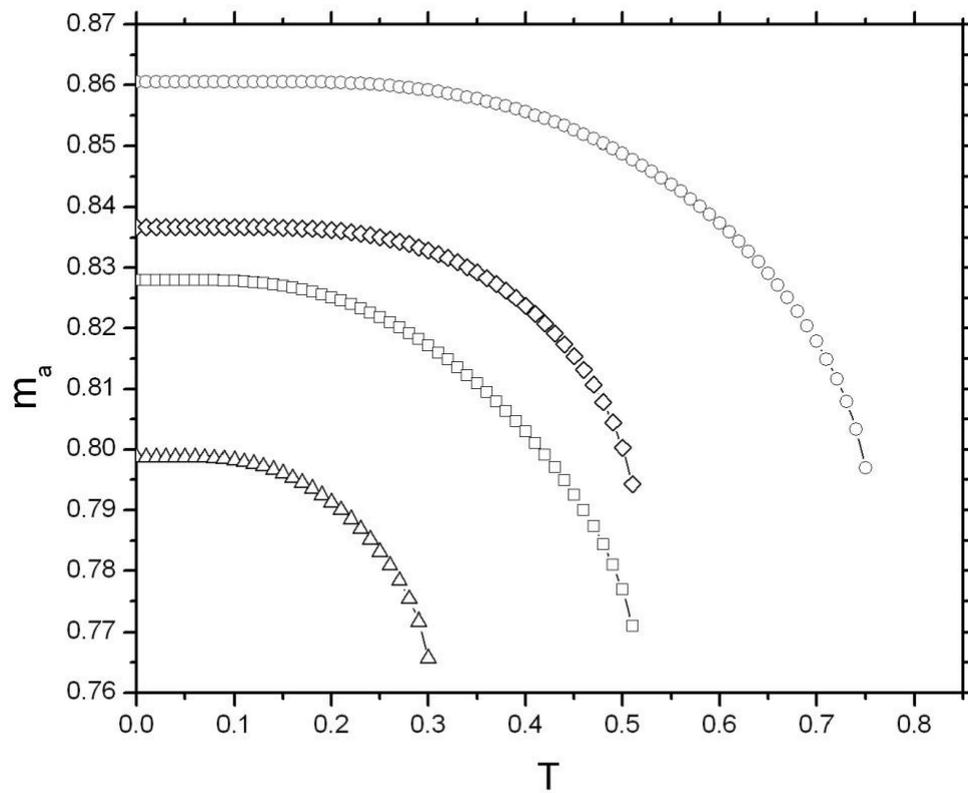
Na Fig. (4.7), apresentamos a magnetização  $m_a$  como função da temperatura. Fixamos  $\lambda$ ,  $\eta$  e  $D$ . Enquanto a anisotropia  $D$  e o parâmetro  $\lambda$  fortalecem a ordem de longo alcance no sistema, aumentando os valores de  $T_c$ , a frustração adiciona flutuações nos *spins* que tendem a favorecer a desordem do sistema com o aumento da temperatura.

A temperatura crítica  $T_N$  como função do parâmetro  $D$  na fase (AF) pode ser vista na vista na Fig. 4.8. Esses resultados podem ser comparados com expansão em série ( $\lambda$ ) [87], mostrados no canto superior da figura 4.8 a). A linha tracejada representa os resultados obtidos via teoria de campo médio, enquanto a linha cheia é o resultado obtido por expansão em série. Quando  $D$  tende a zero, a temperatura crítica precisa ser igual a zero (respeitar o teorema de Mermin-Wagner). A teoria de campo médio não é capaz de reproduzir esse resultado.

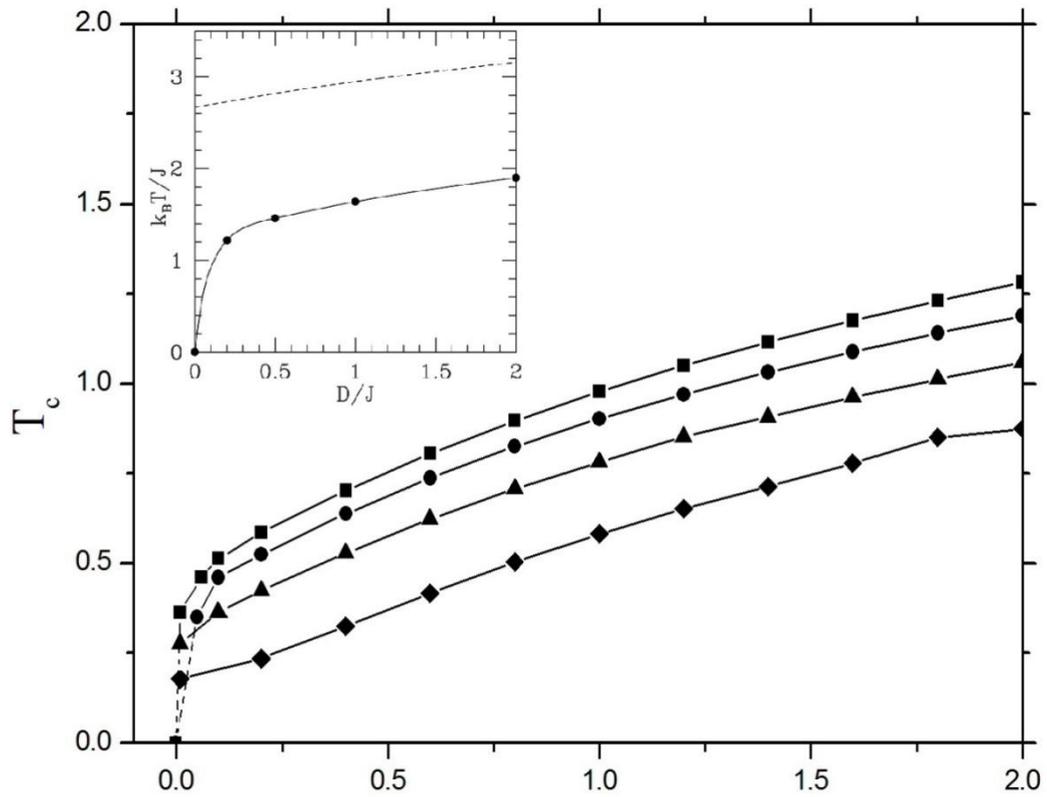
Nossos valores de  $T_c$  para  $1 < \lambda < 0.8$  tendem a zero quando  $D$  tende a zero. No entanto, para  $\lambda < 0.8$ , a temperatura crítica do sistema tende a um valor finito diferente de zero quando  $D$  tende a zero. Isso mostra que o método não é adequado para tratar os limites de baixas dimensões em temperaturas diferente de zero.

Na Fig. (4.9) apresentamos a temperatura crítica como função da frustração  $\eta$ . Para  $D = 0.5$  e  $\eta = 0.1$ , a temperatura crítica  $T_N = 0.591$ , enquanto que para  $D = 1.5$  e  $\eta = 0.1$  temos  $T_N = 0.992$ . A temperatura crítica diminui com  $\eta$  na fase (AF) e aumenta com na  $\eta$  fase (CL). A transição entre a fase (AF) e paramagnética (PM) ocorre de forma contínua. Nesse caso, a magnetização de sub-rede vai a zero em  $T=T_c$ . Por outro lado, a magnetização de sub-rede da fase (CL) sofre uma descontinuidade em  $T_c$ . Entre as fase (AF) e (CL) existe a fase paramagnética (PM).

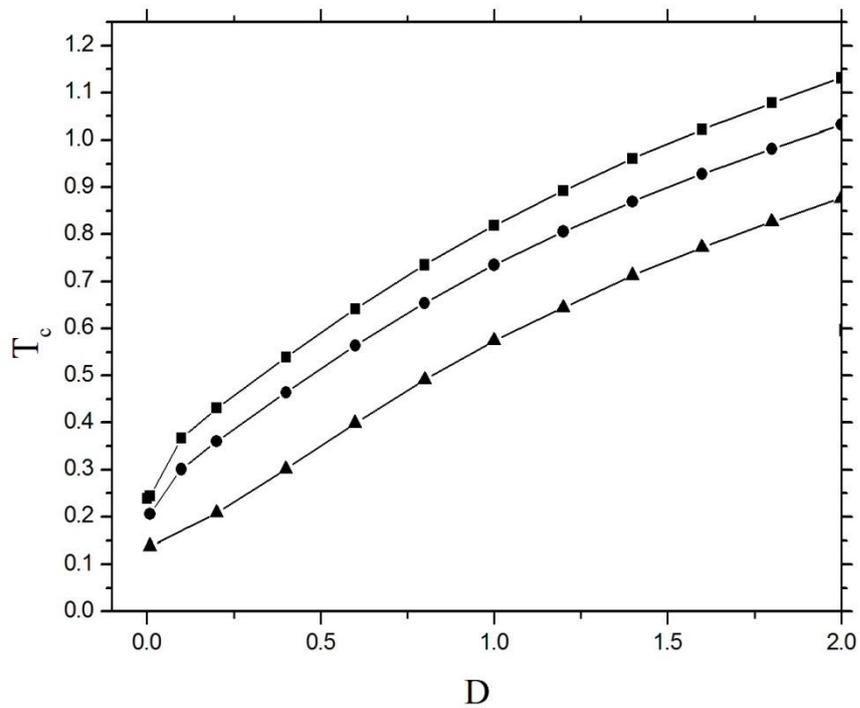
O calor específico na fase (AF) para  $\eta = 0.1$ ,  $D = 0.5$  e  $\lambda$  (1, 0.8, 0.6, 0.4), pode ser visto na Fig. (4.10). Considerando  $\eta = 0.1$  e  $D=0.5$ , estudamos o efeito de  $\lambda$  sobre o calor específico. O calor específico é reduzido à medida que o sistema se aproxima do caso unidimensional.



**Figura 4.7:** Magnetização de sub-rede  $m_a$  como função da temperatura  $T$ . Quadrado,  $D = 0.1$ ,  $\eta = 0$  e  $\lambda = 1$ . Círculo,  $D = 0.5$ ,  $\eta = 0$  e  $\lambda = 1$ . Triângulo,  $D = 0.1$ ,  $\eta = 0.1$  e  $\lambda = 0.8$ . Diamante,  $D = 0.5$ ,  $\eta = 0.1$  e  $\lambda = 0.8$ .

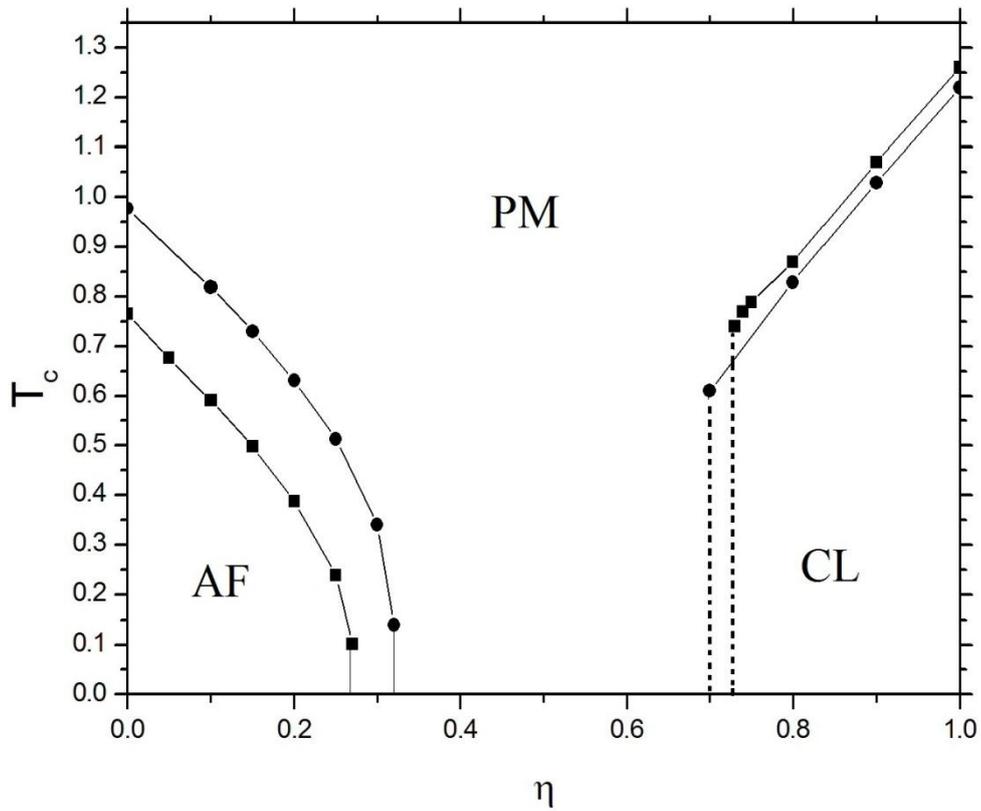


a)  $D$

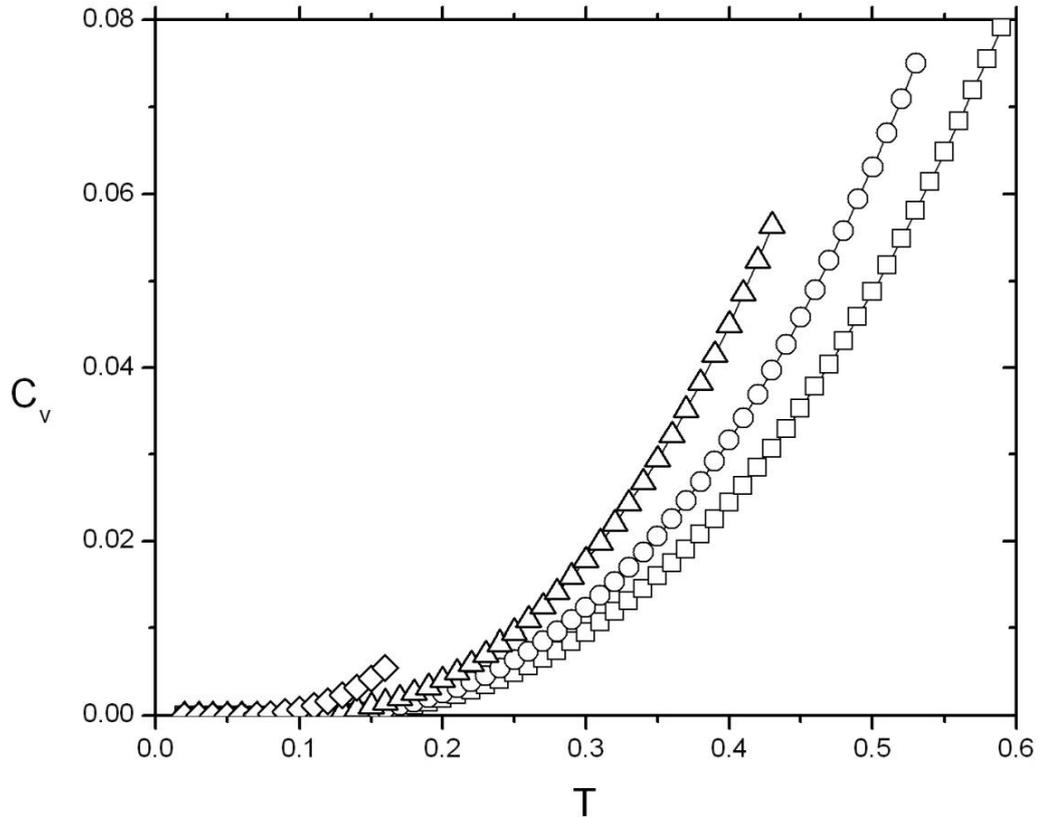


b)

**Figura 4.8:** Temperatura crítica como função de  $D$  na fase (AF). a) Caso sem frustração ( $\eta = 0$ ). b) Caso frustrado. Quadrado  $\lambda = 1$ , círculo  $\lambda = 0.8$ , triângulo  $\lambda = 0.6$ , diamante  $\lambda = 0.4$ .



**Figura 4.9.** Temperatura crítica como função de  $\eta$  nas fases (AF) e (CL) ( $\lambda = 1$ ). Quadrado,  $D = 0.5$ , Círculo,  $D = 1$  e. Linhas pontilhadas representam transições de fase descontínua em  $m_a$ . A fase paramagnética (PM) se encontra entre as fases (AF) e (CL).



**Figura 4.10:** Calor específico em baixas temperaturas na fase (AF) para  $D = 0.5$  e  $\eta = 0.1$ . Quadrado  $\lambda = 1$ , círculo  $\lambda = 0.8$ , triângulo  $\lambda = 0.6$  e diamante  $\lambda = 0.4$ .

#### 4.4 Conclusão

O método baseado na teoria de ondas de spin modificada, via equações auto consistentes, é mais adequado para descrever a região de forte anisotropia em temperaturas finitas. Quando  $D$  tende a zero, o método não é capaz de obter a temperatura crítica zero, embora as temperaturas críticas tendam a zero nesse limite. Diferente do resultado obtido Bishop [82], o diagrama de fase quântico do sistema no plano  $\lambda$ - $\eta$  apresenta uma fase magneticamente desordenada que decresce com os parâmetros  $D$  e  $\lambda$ . Nesse diagrama, encontramos um ponto crítico quântico  $(\eta^*, \lambda^*)$  que determina uma transição diretamente entre as fases (AF) e (CL). Esse ponto crítico pode ser encontrado a partir de  $D = 1.5$ . Para  $D = 1.5$  temos  $\eta^* = 0.3$  e  $\lambda^* = 0.7$ .

A anisotropia  $D$  e o parâmetro  $\lambda$  favorecem as regiões ordenadas, enquanto a interação entre os magnons e a frustração favorece as regiões desordenadas. Para valores grandes de ( $D = 2.37$ ), o valor de frustração crítica é igual a 0.47. Esse está de acordo com os limites conhecidos de Ising ( $\eta_c = 0.5$ ).

## Capítulo 5

# Modelo de Heisenberg com anisotropia de plano fácil

### 5.1 Modelo de Heisenberg $J_1 - J_2 - J_3$ na rede cúbica

Acredita-se que o estado quântico *spin* líquido (QSL) pode ocorrer somente em casos particulares de modelos com *spin* 1/2. Certamente os mais promissores materiais (QSL) têm *spin* 1/2, devido o fato de sofrerem flutuações quânticas mais fortes em baixas temperaturas [88].

As flutuações quânticas decrescem rapidamente com a dimensão e a magnitude do *spin*. No caso de *spin* 1, as flutuações quânticas são menores e uma questão importante surge: Um sistema de *spin* 1 pode suportar um estado desordenado em três dimensões? Para responder essa questão, considere por exemplo o sistema tridimensional isotrópico de *spin* 1/2, com interações entre primeiros e segundos vizinhos. Esse sistema foi estudado por vários métodos analíticos e numéricos [89-100]. O diagrama de fase do modelo  $J_1$ - $J_2$  com *spin* 1/2 em uma rede cúbica foi investigado por Kingshuk [100]. Usando teoria de ondas de *spin* não-linear, Kingshuk encontrou uma transição de fase direta entre a fase (AF) e a (CL), sem a existência da fase paramagnética quântica (PQ). Portanto, se o caso *spin* 1/2 em uma rede cúbica não pode suportar um estado desordenado, então o caso de *spin* 1, isotrópico, também não é promissor. Entretanto, se adicionarmos uma anisotropia de íon único em um sistema de *spin* 1 esse cenário muda drasticamente, levando ao surgimento de uma fase paramagnética que pode ser um estado (QLS).

Nesta seção, vamos estudar uma generalização interessante neste contexto, trata-se do antiferromagneto frustrado com anisotropia de plano fácil em uma rede cúbica com interações entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos ( $J_1, J_2, J_3$ ). O Hamiltoniano do sistema é descrito por

$$H = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} S_i S_j + J_3 \sum_{\langle\langle\langle i,j \rangle\rangle\rangle} S_i S_j + D \sum_i (S_i^z)^2 \quad (5.1)$$

onde,  $\langle i, j \rangle$ ,  $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ , e  $\langle\langle\langle i, j \rangle\rangle\rangle$  representam somas sobre primeiros, segundos e terceiros vizinhos. O Hamiltoniano (5.1) de *spin* 1 com  $J_2 = J_3 = 0$  foi estudado por Wong [59] e Wang [13]. Wong usou a técnica de *cluster* acoplado, enquanto Wang usou o método do *bond operator*. Os estudos mostram que o modelo tem uma transição de fase em  $D = D_c$  (duas dimensões  $D_c = 6.13$  e em três dimensões  $D_c = 10.608$ ). Para  $D < D_c$  o sistema se encontra na fase de Néel, enquanto que para  $D > D_c$  temos uma fase paramagnética com  $S^z = 0$  em todos os sítios da rede.

Esta seção tem como principal objeto estudar o modelo descrito por (4.1) para determinar as possíveis fases desordenadas do sistema. Nossos cálculos se baseiam na técnica do "*bond operator*".

### 5.1.1 Técnica do *bond operator*

Inicialmente a técnica foi proposta por Sachedev e Bhatt [99] para estudar estados singletos em modelos de *spin* 1/2, posteriormente, foi estendida por Wang e Wang [13] para sistemas de *spin* 1 com anisotropia de plano fácil. A técnica do *bond operator* foi usada em vários modelos [13,101-105]. Neste formalismo, três operadores de bósons são introduzidos para denotar os três auto estados do operador  $S^z$ ,

$$|-1\rangle = d^+ |v\rangle \quad |0\rangle = t_z^+ |v\rangle \quad |1\rangle = u^+ |v\rangle \quad (5.2),$$

onde  $|v\rangle$  é o estado de vácuo. Os operadores de spin são mapeados nos operadores bosônicos através das transformações

$$S^+ = \sqrt{2}(t_z^+ d + u^+ t_z) \quad S^- = \sqrt{2}(t_z^+ u + d^+ t_z) \quad S^z = u^+ u - d^+ d \quad (5.3).$$

Em termos desses operadores, podemos imaginar que cada sítio está ocupado por uma das quase-partículas criadas pelos operadores  $u^+$ ,  $d^+$  e  $t_z^+$ , ou equivalentemente, cada sítio está em um dos três estados do operador  $S^z$ .

A condição de que o único estado possível em cada sítio deve ser um dos três estados acima, implica que os operadores devem satisfazer a relação de vínculo,  $u^+ u + d^+ d + t_z^+ t_z = 1$ . O ponto de partida da técnica do *Bond operator* é a região desordenada  $D < D_c$ . Nessa região, o estado fundamental é formado por produtos de estados  $S_i^z = 0$  em todos os sítios. Significa que para  $D < D_c$  a maioria

dos sítos estão no estado  $|0\rangle = t_z^+ |v\rangle$ . Nesse limite, podemos fazer a aproximação da condensação dos bósons  $t$ . Essa aproximação consiste em desprezar a dinâmica dos operadores  $t$ . Para, isso vamos substituir o seu valor  $t$  um valor médio  $\langle t_z^+ \rangle = t$ , correspondendo a um condensado de estados  $|0\rangle$ <sup>1</sup>.

Substituindo (5.3) no Hamiltoniano (5.1), fazendo a aproximação dos  $t^+$  bósons condensados e introduzindo o potencial químico  $\mu_r$  como um multiplicador de Lagrange para impor o vínculo de condição de ocupação única de estado em cada sítio, chegamos a um hamiltoniano bosonico com a seguinte forma.

$$H = H^{(2)} + H^{(4)} \quad (5.4)$$

O Hamiltoniano (5.4) contém termos que envolvem o produto de dois operadores  $H^{(2)}$  e quatro operadores  $H^{(4)}$ . Os termos de quatro operadores serão tratados de forma auto-consistente, ou seja, aplicaremos um desacoplamento do tipo campo médio (ver capítulo 4). Quando desacoplados, esses termos possuem a forma geral dada por

$$(u_r^+ u_r - d_r^+ d_r)(u_{r+\delta}^+ u_{r+\delta} - d_{r+\delta}^+ d_{r+\delta}) = \frac{1}{2}(1-t^2)(u_r^+ u_r + u_{r+\delta}^+ u_{r+\delta}) \\ + \frac{1}{2}(1-t^2)(d_r^+ d_r + d_{r+\delta}^+ d_{r+\delta}) - p(u_r d_{r+\delta} + d_r u_{r+\delta} + H.c.) - \frac{1}{2}(1-t^2)^2 + 2p^2$$

O desacoplamento gera a variável,  $\langle d_r^+ u_{r+\delta_i}^+ \rangle = \langle d_r u_{r+\delta_i} \rangle = p_i$ . Efetuando uma transformada de Fourier definida por,

$$u_i = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k e^{ik \cdot R_i} u_k \quad d_i = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k e^{ik \cdot R_i} d_k \quad ,$$

Nos operadores  $u^+$  e  $d^+$ , o Hamiltoniano no espaço dos momentos é expresso por

$$H = J_1 \sum_{r+\delta_i} (A_k + B_k)(u_k^+ u_k + u_k^+ d_k) + C_k (d_k^+ u_k^+ + d_k u_k) + C \quad (5.5)$$

Os Coeficientes  $A_k$ ,  $B_k$  e  $C_k$  são definidos por

$$A_k = G(k)t^2 + \frac{G(0)}{2}(1-t^2) + D - \mu - \langle d_k^+ d_k \rangle G(0)$$

$$B_k = G(k)t^2 + \frac{G(0)}{2}(1-t^2) + D - \mu - \langle u_k^+ u_k \rangle G(0)$$

<sup>1</sup> A aproximação da condensação de  $d$  ou  $u$  ao invés de  $t_z$  não muda os resultados numéricos. Por outro lado, a condensação de  $t_z$ , indica que o estado fundamental variacional pode também descrever a fase D-grande. A condensação dos bósons  $t_z$  quebra a simetria rotacional e faz a direção  $z$  especial.

$$C_k = G(k)t^2 - F(k)$$

sendo

$$G(k) = z_1\gamma_{1k} + z_2\eta\gamma_{2k} + z_3\alpha\gamma_{3k}$$

$$F(k) = z_1p_1 + z_2\eta p_2 + z_3\alpha p_3$$

$$C = \mu N(1-t^2) - \frac{N}{4}[(z_1 + \eta z_2 + \alpha z_3)(1-t^2)^2 + (z_1p_1^2 + z_2p_2^2 + z_3p_3^2)]$$

Os parâmetros de competição do sistema são:  $\eta = J_2/J_1$  e  $\alpha = J_3/J_1$

Os fatores de estrutura de primeiros, segundos e terceiros vizinhos são dados por

$$\gamma_{1k} = \frac{1}{3}(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z),$$

$$\gamma_{2k} = \frac{1}{3}(\cos k_x \cos k_y + \cos k_x \cos k_z + \cos k_y \cos k_z),$$

$$\gamma_{3k} = \cos k_x \cos k_y \cos k_z,$$

As quantidades  $z_i$  são os números de coordenação, ou seja, o número de primeiros, segundos e terceiros vizinhos na rede cúbica,  $z_1 = 6$ ,  $z_2 = 12$  e  $z_3 = 8$ .

Depois de uma transformada de Bogoliubov em (5.5) (ver seção 3.1), chegamos ao seguinte Hamiltoniano diagonalizando,

$$H = \sum_k \omega_k (\alpha_k^+ \alpha_k + \beta_k^+ \beta_k) + \sum_k (\omega_k - \Lambda_k) + C \quad (5.6),$$

onde a frequência dos magnons (excitação) é dada por

$$\omega_k = \sqrt{\Lambda_k^2 - \Delta_k^2}$$

sendo

$$\Lambda_k = -\mu + D + \frac{1}{2}(1-t^2)(z_1 + \eta z_2 + \alpha z_3) + t^2 G(k)$$

$$\Delta_k = t^2 G(k) - F(k)$$

A energia do estado fundamental por sitio é dada por

$$e_g = \frac{1}{N} \sum_k (\omega_k - \Lambda_k) + \frac{C}{N} \quad (5.7)$$

Os parâmetros  $p_i$ ,  $t$  e  $\mu$ , são obtidos minimizando a energia livre de Gibbs. A energia livre de Gibbs é dada por

$$\bar{G} = Ne_g - \frac{2}{\beta} \sum_k \ln[1 + n_k(\omega)] \quad (5.8)$$

onde,  $n_k(\omega)$  é função de distribuição de Bose-Einstein, dado por  $n_k(\omega) = 1/(\exp(\beta\omega_k) - 1)$ , sendo  $\beta = 1/k_B T$ ,  $k_B$  a constante de Boltzmann e  $T$  e temperatura.

Minimizando  $\bar{G}$ , obtemos as seguintes equações auto-consistentes:

$$p_i = -\frac{1}{2N} \sum_k \frac{\Delta_k}{\omega_k} \gamma_{ik} \coth\left(\frac{\beta\omega_k}{2}\right) \quad (5.9)$$

$$t^2 = 2 - \frac{1}{N} \sum_k \frac{\Lambda_k}{\omega_k} \coth\left(\frac{\beta\omega_k}{2}\right) \quad (5.10)$$

$$\mu = -\frac{1}{N} \sum_k \frac{\Lambda_k - \Delta_k}{\omega_k} G(k) \coth\left(\frac{\beta\omega_k}{2}\right) \quad (5.11)$$

As equações (5.9) - (5.11), descrevem o sistema na fase desordenada,  $D$ -grande,  $D > D_c$ . O *gap* da energia é definido por  $\Delta = \omega_k$ . Começando de um valor de  $D > D_c$ , à medida que  $D$  diminui,  $\Delta$  tende a zero. A transição de fase ocorrerá quando  $\Delta(D_c) = \omega(k_o, D_c) = 0$ . Quando  $D \leq D_c$ , o sistema está em um estado ordenado, sem *gap*. Para determinar o valor de  $D_c$  onde o *gap* se anula, vamos assumir que o valor de  $k_o$  para a fase (AF) é  $(\pi, \pi, \pi)$ , enquanto que para a fase (CL) é  $(0, \pi, \pi)$ .

Em temperatura nula, os  $p_i$  são pequenos (da ordem de  $10^{-2}$ - $10^{-3}$ ) [13] e podem ser desprezados. Dessa forma ficamos apenas com as equações (5.10) e (5.11). Trocando a soma por uma integral sobre a primeira zona de Brillouin, essas equações podem ser reescritas como

$$t^2 = 2 - \frac{1}{2} (I_1(\xi) + I_2(\xi)) \quad (5.12)$$

$$\mu = \frac{1}{y} (I_1(\xi) - I_2(\xi)) \quad (5.13)$$

com

$$\xi = \frac{2t^2}{-\mu + D + \frac{1}{2}(1-t^2)(z_1 + \eta z_2 + \alpha z_3)} \quad (5.14),$$

$$I_1(\xi) = \frac{1}{\pi^3} \iiint \frac{dk_x dk_y dk_z}{\sqrt{1 + \xi G(k)}} \quad \text{e} \quad I_2(\xi) = \frac{1}{\pi^3} \iiint dk_x dk_y dk_z \sqrt{1 + \xi G(k)} \quad (5.15).$$

As integrais são avaliadas  $[0, \pi]$ .

O *gap* em  $k$  pode ser expresso como

$$\omega_k = -\mu + D + \frac{1}{2}(1-t^2)(z_1 + \eta z_2 + \alpha z_3)\sqrt{1 + \xi G(k)} \quad (5.16)$$

Substituindo as equações (5.12) e (5.13) em (5.14), podemos extrair a seguinte equação para  $D(\xi)$ :

$$D - \frac{1}{2}G(0) - \frac{4}{\xi} + \frac{1}{4}G(0)I_2(\xi) + \left[\frac{2}{\xi} + \frac{1}{4}G(0)\right]I_1(\xi) = 0 \quad (5.17)$$

Quando  $D = D_c$ , temos que  $\xi = \xi_c$ , e neste caso, o *gap* vai à zero, sendo assim, pode-se extrair de (5.16) o seguinte valor de  $\xi_c$ .

$$\xi_c(k_o) = \frac{1}{G(k_o)}$$

O *gap* é nulo para um dado valor de  $k_o$ . A transição entre a fase  $D$ -grande e a fase (AF) ocorrerá se

$$\xi \rightarrow \xi_c(k_o) = \frac{1}{6 + 12\eta + 8\alpha},$$

enquanto isso, a transição entre a fase  $D$ -grande e a fase colinear (CL) ocorrerá se

$$\xi \rightarrow \xi_c(k_o) = \frac{1}{2 - 4\eta + 8\alpha}$$

Na transição, a equação crítica assume a seguinte forma

$$D_c = \frac{1}{2}G(0) + \frac{4}{\xi} - \frac{1}{4}G(0)I_2(\xi_c) - \left[\frac{2}{\xi} + \frac{1}{4}G(0)\right]I_1(\xi_c) \quad (5.18)$$

Para determinar  $D_c$ , devemos calcular as integrais definidas por  $I_i(\xi_c)$ .

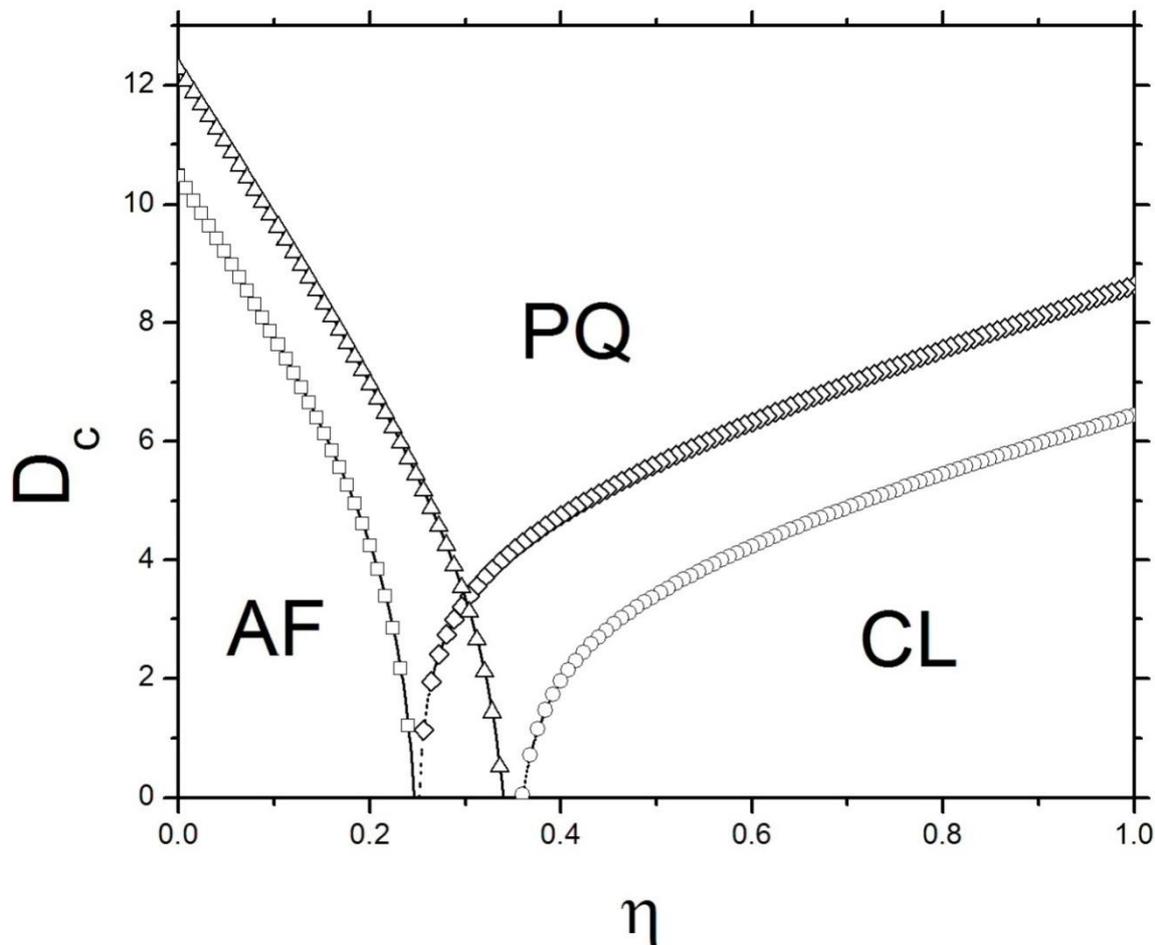
Em temperatura diferente de zero, deve-se considerar o sistema de equações de (5.9)-(5.11). Neste caso, os cálculos agora passam a ser totalmente numéricos. Estas equações foram resolvidas através do método de Newton-Raphson para várias variáveis.

### 5.1.2. Resultados

Na Fig. 5.1, mostramos o diagrama de fase quântico ( $T = 0$ ). As curvas foram obtidas através da equação (5.18) e representam o parâmetro crítico  $D_c$  em função  $\eta$  para  $\alpha = 0$  e  $\alpha = 0.1$ . Neste diagrama, apresentamos três fases; Antiferromagnética (AF) na região abaixo das curvas representadas por quadrados e triângulos. A fase

paramagnética quântica (PQ) pode ser vista para  $D > D_c$ . A fase colinear (CL) ocorre nas regiões abaixo das curvas representadas por diamantes e círculos.

Quando desprezamos a interação entre terceiros vizinhos, caso onde  $\alpha = 0$ , a fase (PQ) só aparece no diagrama quando  $D > 0$ . Quando  $D$  tende a zero, ocorre uma transição de fase entre as duas fases ordenadas, (AF) e (CL) no ponto ( $D_c = 0$ ,  $\eta_c = 0.246$ ), em concordância com a referência [100].



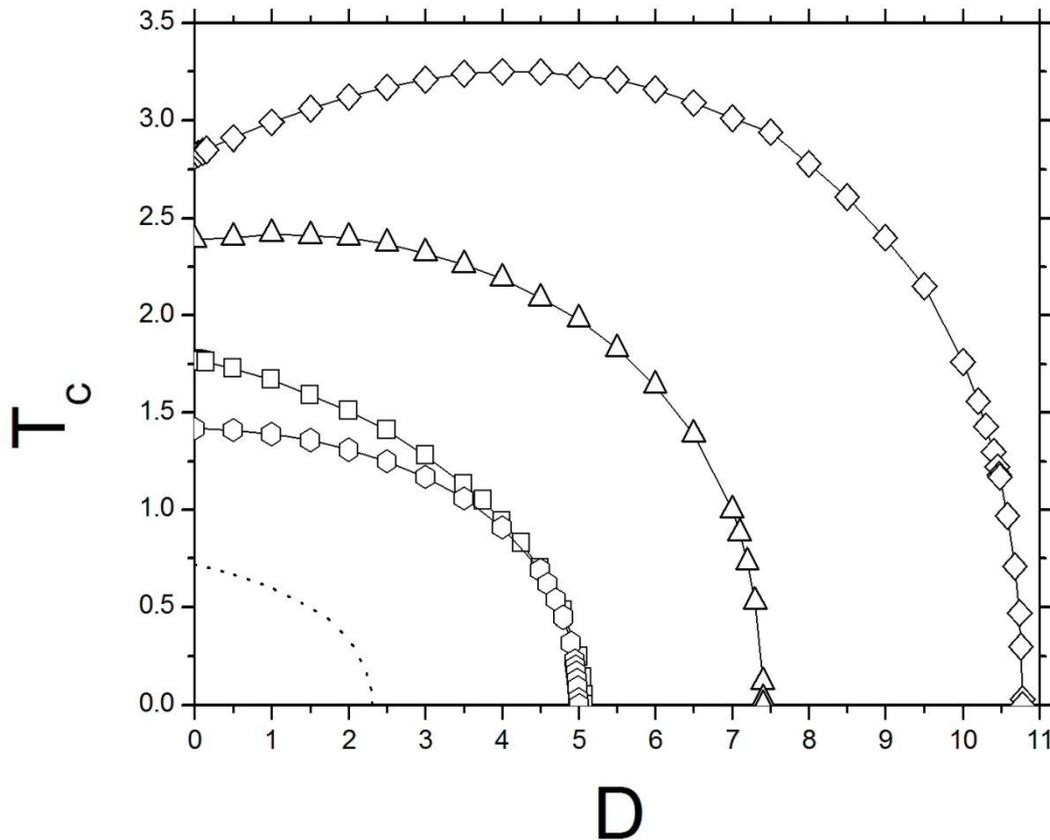
**Figura 5.1:** Anisotropia crítica  $D_c$  como função  $\eta$ . Os valores de  $D_c$  das fases (AF) e (CL) quando  $\alpha = 0.0$  são representados por quadrados e diamantes, respectivamente. O caso  $\alpha = 0.1$  é representado por triângulos (AF) e círculos (CL).

Considerando a interação entre terceiros vizinhos, podemos ver que a fase (PQ) passa a existir para qualquer valor de  $D$ , inclusive em  $D = 0$ . Neste caso, para qualquer valor de  $D$ , existe  $\eta_{1c}$  e  $\eta_{2c}$ , com  $\eta_{1c}$  diferente de  $\eta_{2c}$ . Definimos o parâmetro  $\eta_{1c}$  como sendo a frustração crítica, onde ocorre a transição entre a fase (AF) e (PQ), enquanto  $\eta_{2c}$  é o valor de frustração onde ocorre a transição entre a fase (CL) e (PQ). Quando  $D$  tende a zero, temos que  $\eta_{1c} = 0.34$  e  $\eta_{2c} = 0.36$  e, portanto, agora existe

uma pequena região magneticamente desordenada (delimitada por  $\eta_{1c}$  e  $\eta_{2c}$ ) que aumenta à medida que  $D$  aumenta.

Na Fig. 5.2, mostramos a temperatura crítica  $T_c$  nas fases (AF) e (CL) em função da anisotropia  $D$ , consideramos os seguintes casos; ( $\eta=0, \alpha=0$ ), ( $\eta=0.2, \alpha=0$ ) e ( $\eta=0.2, \alpha=0.1$ ) na fase (AF), e ( $\eta=0.42, \alpha=0$ ), ( $\eta=0.42, \alpha=0.1$ ) na fase (CL).

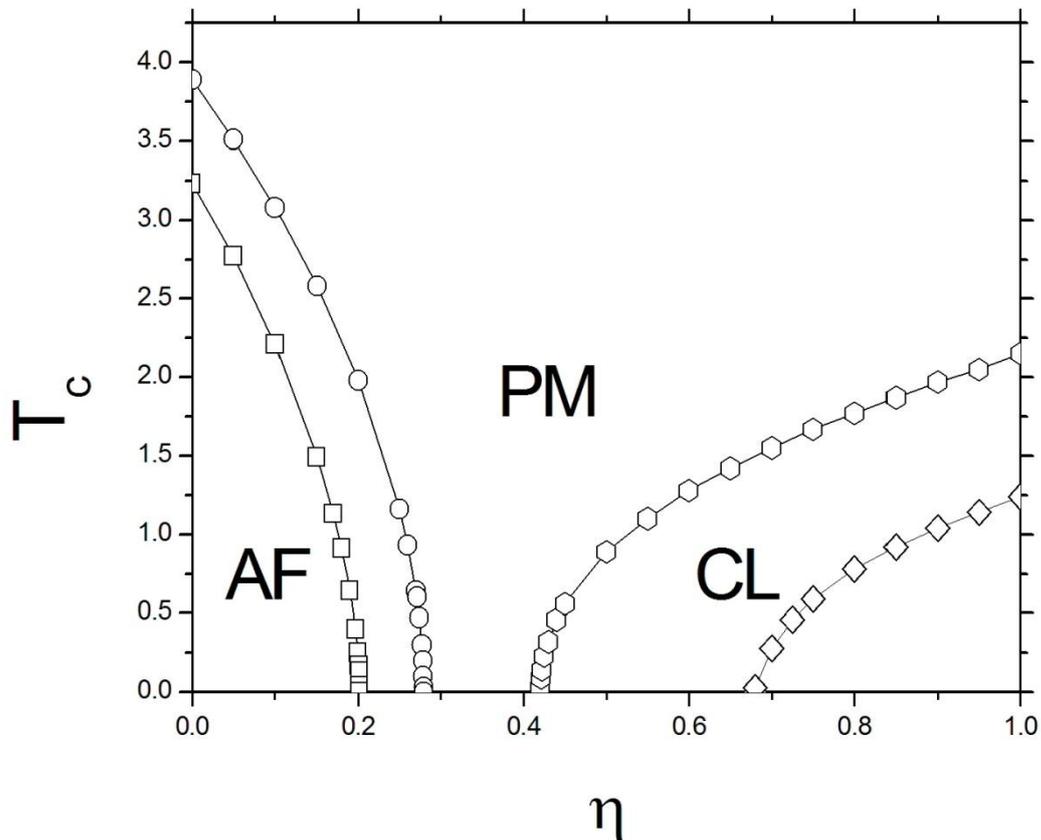
Na fase (AF), a temperatura crítica diminui com a interação entre segundos vizinhos, ver curvas com diamantes e quadrado. Por outro lado, a interação entre os terceiros vizinhos, tende a aumentar a temperatura crítica do sistema, comparar triângulos e quadrados. Na fase colinear, a interação entre terceiros vizinhos tende a diminuir a temperatura crítica do sistema.



**Figura 5.2:** Temperatura crítica  $T_c$  como função de  $D$ . A temperatura crítica do modelo com  $J_2$  e  $J_3$  igual a zero é representado por diamantes para fase (AF). A temperatura crítica para o caso frustrado sem a interação entre os terceiros vizinhos ( $\alpha=0.0$ ) é representado por quadrados para a fase (AF) com  $\eta=0.2$  e hexágonos para a fase (CL) com  $\eta=0.42$ . O caso com interação entre segundos e terceiros vizinhos com  $\alpha=0.1$  é representado por triângulos para a fase (AF) ( $\eta=0.2$ ) e círculos para a fase (CL) ( $\eta=0.42$ ).

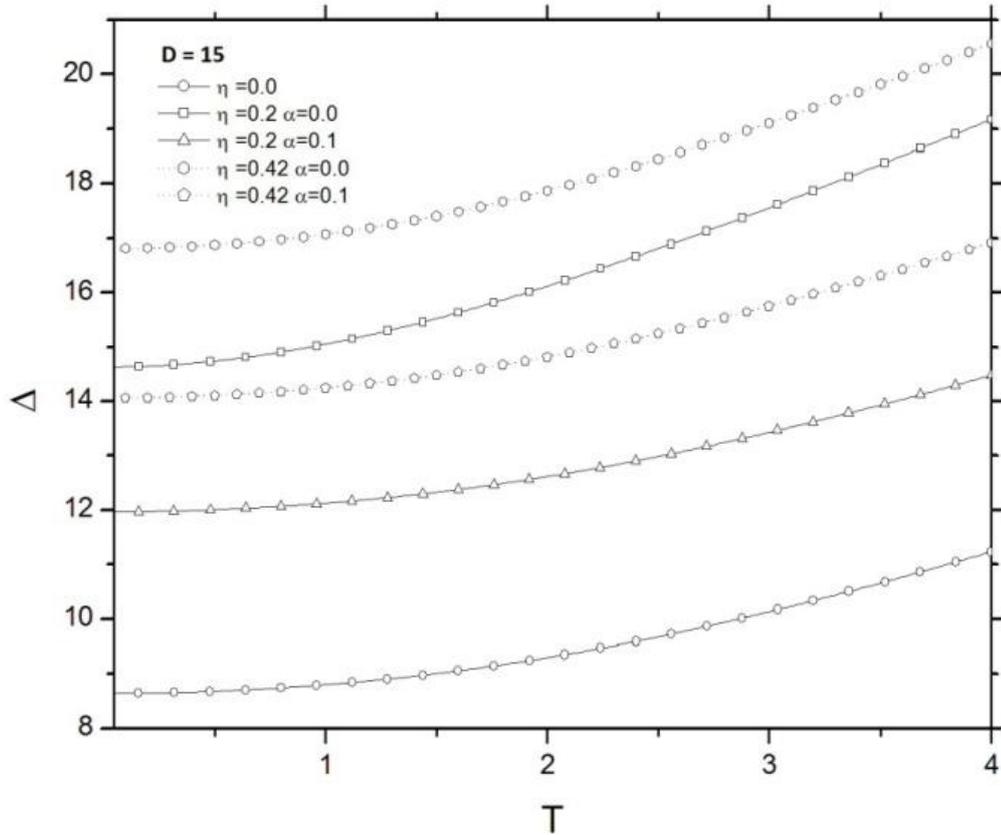
Na Fig. 5.3, mostramos a temperatura crítica  $T_c$  como função de  $\eta$  para  $\alpha = 0$  e  $\alpha = 0.1$ . Fixamos o parâmetro de anisotropia em  $D = 5.0$ .

Em ambos os casos existe uma fase paramagnética (PM) entre a fase (AF) e a fase (CL). Pode-se ver que na fase (AF),  $T_c(\alpha = 0, \eta) < T_c(\alpha = 0.1, \eta)$ , isso indica que nesta fase  $J_3$  aumenta a ordem de longo alcance. Por outro lado, na fase (CL) temos  $T_c(\alpha = 0, \eta) > T_c(\alpha = 0.1, \eta)$ , mostrando que nesta fase, o efeito de  $J_3$  é suprimir a ordem de longo alcance. Esse comportamento deixa claro que quando  $J_3$  pode contribuir em favor do aparecimento de uma região magneticamente desordenada.



**Figura 5.3:** Temperatura crítica  $T_c$  como função de  $\eta$  para  $D = 5$ . Temos os seguintes casos;  $\alpha = 0.0$  é representado por quadrados para a fase (AF) e hexágonos na fase (CL);  $\alpha = 0.1$  é representado por círculos para a fase (AF) e diamantes na fase (CL)). Entre as regiões (AF) e (CL) existe a fase paramagnética (PM).

Na Fig. 5.4, mostramos  $\Delta$  como função da temperatura para  $D = 15$  (fase  $D$ -grande) para vários valores de  $\eta$  e  $\alpha$ . Nessa região o  $gap$  da energia nunca vai à zero.



**Figura 5.4:** Gap  $\Delta$  como função de  $T$  para  $D = 15$ . Para  $\eta = 0.0$  (círculos),  $\eta = 0.2$  e  $\alpha = 0.0$  (quadrados),  $\eta = 0.2$  e  $\alpha = 0.1$  (triângulos),  $\eta = 0.42$  e  $\alpha = 0.0$  (hexágonos), e  $\eta = 0.42$  e  $\alpha = 0.1$  (pentágonos).

### 5.1.3. Conclusão

Estudamos o modelo de Heisenberg com anisotropia de íon único em uma rede cúbica com interação de *exchange* entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos. Na fase (AF),  $J_3$  fortalece a ordem de longo alcance, enquanto que na fase (CL),  $J_3$  induz competição entre as interações, fazendo com que a ordem de longo alcance seja desfavorecida. Essa fato, tende a gerar uma região magneticamente desordenada no diagrama de fase do sistema. O modelo de Heisenberg em três dimensões para *spin*-1 com anisotropia de plano fácil, é capaz de apresentar fases magneticamente desordenadas em temperatura nula, portanto a busca por (QSL) não precisa ser restrita apenas a modelos bidimensionais com *spin* 1/2. Nossos estudos indicam ainda, que a interação entre terceiros vizinhos pode favorecer um estado desordenado no limite de  $D = 0$ .

## 5.2 Modelo de Heisenberg antiferromagnético quase $2d$

### 5.2.1. Introdução

Modelos quase bidimensionais receberam bastante atenção devido a sua importância no entendimento da supercondutividade de altas temperaturas em cupratos quase  $2d$  [106].

Além disso, a busca por materiais magnéticos que sejam capazes de apresentar um comportamento do tipo Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) ainda representa um grande desafio [107], embora esse comportamento possa ser estudado em superfluidos e filmes supercondutores [108].

Estudos teóricos indicam que o caso bidimensional do Hamiltoniano de Heisenberg com anisotropia de plano fácil, pode apresentar um comportamento (BKT) [109]. Entretanto, um cristal real é sempre  $3d$ , e pode ter uma constante de interação  $J^z$  entre os planos que formam o material.

Em materiais quase  $2d$ , a constante de acoplamento entre planos  $J^z$  é muito pequena, alguns dados experimentais sugerem que  $J^z/J$  é da ordem de  $10^{-2}$ - $10^{-6}$  [110].

Para estabelecer ordem de longo alcance  $3d$  em sistemas quase  $2d$ , Knafo e colaboradores [111], estudaram a influência de uma anisotropia intra plano  $D_x < 0$ .

Os autores apresentaram dados experimentais de um composto antiferromagnético,  $\text{BaNi}_2\text{V}_2\text{O}_2$ , quase bidimensional de spin  $S=1$ , e propuseram o seguinte Hamiltoniano para descrever o composto

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + J^z \sum_{\langle in \rangle} S_i S_n + D \sum_r (S_r^z)^2 + D_x \sum_r (S_r^x)^2 - h \sum_r S_r^z \quad (5.19)$$

onde, anisotropia de íon único  $D$  ( $\approx 1\text{meV}$ ) é um fator 10 vezes menor que  $J$ . A anisotropia  $D_x$  é estimado como sendo da ordem de  $4 \cdot 10^{-3}\text{meV}$  [111]. A anisotropia de plano fácil  $D$  confina os spins no plano perpendicular ao eixo  $z$ , enquanto  $D_x$  confina os spins no eixo  $y$ . Knafo e colaboradores aplicaram um campo magnético externo plano  $xy$  e estudaram o comportamento da temperatura crítica como função de  $D_x$  e do campo externo.

O comportamento do Hamiltoniano (5.19), 3D com  $D_x = 0$ ,  $h = 0$  e  $J^z = J$  foi discutido previamente na seção anterior.

Nesta seção estudaremos o modelo (5.19) com o campo perpendicular ao plano  $xy$ ,  $D_x > 0$  no limite  $D_x \ll D$ . Assim como na seção anterior, usaremos a técnica do *bond operator*. Neste caso, estudaremos o ordenamento induzido pelo campo magnético na região  $D > D_c$  quando campo é nulo.

## 5.2.2 Equações auto-consistentes

Substituindo as transformações bosônicas da seção anterior no Hamiltoniano (5.19), considerando o vínculo de estados possíveis em cada sítio, supondo que os  $t_z$  bósons estão condensados, efetuando o desacoplamento de campo médio e realizando uma transformada de Fourier-Bogoliubov, chegamos ao seguinte Hamiltoniano bosônico.

$$H = \sum_k (\omega_k^{(1)} \alpha_k^+ \alpha_k + \omega_k^{(2)} \beta_k^+ \beta_k) + \sum_k (\omega_k - \Lambda_k) + C \quad (5.20)$$

com

$$\begin{aligned} \omega_k^{(1)} &= \sqrt{\Lambda_k^2 - \Delta_k^2} - h + 2m, \\ \omega_k^{(2)} &= \sqrt{\Lambda_k^2 - \Delta_k^2} + h - 2m \end{aligned} \quad (5.22)$$

e

$$\Lambda_k = -\mu + D + D_x t^2 + (1 - t^2)[2 + \alpha] + t^2 f(k),$$

$$\Delta_k = t^2 f(k) - [4p_1 \gamma_k + 2\alpha p_2 \cos k_z] + D_x t^2$$

$$f(k) = 4\gamma_k + 2\alpha \cos(k_z)$$

$$\gamma_k = \frac{1}{2} (\cos q_x + \cos q_y), \quad \alpha = J^z / J$$

$$C = \mu N(1 - t^2) - NR(1 + \alpha/2)(1 - t^2)^2 + NR(4p_1^2 + 2\alpha p_2^2)$$

As quantidades

$$\langle d_r^+ u_{r+\delta}^+ \rangle = \langle d_r u_{r+\delta} \rangle = p_1, \quad \langle d_r^+ u_{r+d}^+ \rangle = \langle d_r u_{r+d} \rangle = p_2 \quad \text{e} \quad m = \langle u_r^+ u_r \rangle - \langle d_r^+ d_r \rangle,$$

foram obtidos do desacoplamento. A variável  $m$  é a magnetização ao longo do eixo  $z$ . As Eq. (5.22)  $\hbar\omega_k^{(i)}$  são as energias dos magnons  $\alpha_k$  e  $\beta_k$ , respectivamente. Os

magnons  $\alpha_k$  possuem energia menor que os magnons  $\beta_k$ , i. e.  $\hbar\omega_k^{(1)} < \hbar\omega_k^{(2)}$ . O *gap* é definido por

$$\omega_k^{(1)} = \sqrt{\Lambda_k^2 - \Delta_k^2} - h + 2m$$

A energia do estado fundamental por sítio é

$$e_g = \frac{1}{N} \sum_k (\omega_k - \Lambda_k) + \frac{1}{N} C. \quad (5.23)$$

Os parâmetros  $t$ ,  $p_1$ ,  $p_2$ ,  $\mu$  e  $m$  serão obtidos via minimização da seguinte energia livre de Gibbs

$$\bar{G} = Ne_g - \frac{1}{\beta} \sum_k \ln[1 + n_1(k)] - \frac{1}{\beta} \sum_k \ln[1 + n_2(k)] \quad (5.24)$$

onde,  $n_i(k) = 1/(e^{\beta\omega_k^{(i)}} - 1)$ ,  $\beta = 1/k_B T$ . Minimizando  $\bar{G}$  com relação aos parâmetros  $p$ ,  $\mu$ ,  $t^2$  e  $m$ , obtemos as seguintes equações auto-consistentes

$$t^2 = 2 - \frac{1}{N} \sum_k \frac{\Lambda_k}{\omega_k} [1 + n(\omega_k^{(1)}) + n(\omega_k^{(2)})], \quad (5.25)$$

$$\mu = \frac{1}{N} \sum_k \left( \frac{\Lambda_k - \Delta_k}{\omega_k} \right) f(k) [1 + n(\omega_k^{(1)}) + n(\omega_k^{(2)})], \quad (5.26)$$

$$p_1 = -\frac{1}{2N} \sum_k \frac{\Delta_k \gamma_k}{\omega_k} [1 + n(\omega_k^{(1)}) + n(\omega_k^{(2)})], \quad (5.27)$$

$$p_2 = -\frac{1}{2N} \sum_k \frac{\Delta_k \cos k_z}{\omega_k} [1 + n(\omega_k^{(1)}) + n(\omega_k^{(2)})] \quad (5.28)$$

e

$$m = \frac{1}{N} \sum_k [n(\omega_k^{(1)}) - n(\omega_k^{(2)})] \quad (5.29),$$

As Equações acima descrevem a fase desordenada  $D$ -grande. No entanto, quando  $D < D_c$ , o sistema está na fase (AF), cujo *gap* é nulo. Quando o *gap* se anula, a função de distribuição dos bósons,  $n(\omega_k^{(i)})$ , diverge. Para evitar essa divergência, vamos assumir que parte das excitações (magnons) está condensada em  $k_o = \pi$ . A condensação de Bose-Einstein induz ordem de longo alcance no sistema quando o *gap* vai à zero, devido o campo magnético aplicado. Isso ocorre porque as excitações são divididas na presença de um campo magnético, de forma que a componente  $\hbar\omega_k^{(1)}$  decresce com o aumento do campo. Em um campo magnético

crítico  $h_{1c}$ , o *gap* da energia vai à zero. À medida que o campo aumenta, assumimos que o *gap* da energia continua sendo zero e parte dos magnons condensa. Este caso é muito diferente do caso com campo nulo. Quando o campo é diferente de zero, somente os bósons  $\alpha_k$  (menor energia), estão condensados.

No espírito da teoria de condensação de Bose-Einstein, vamos considerar que o termo da soma na Eq.(5.25), para  $k = \pi$ , dado por

$$\Lambda_k n(\omega_k^{(1)}) / \omega_k N \equiv n_h(T)$$

mantém-se finito, e representa a quantidade de magnons condensados.

O sub-índice  $h$  em  $n_h$  indica que esta quantidade pode depender do campo aplicado. Extraindo a quantidade  $n_h(T)$  das equações (5.25) - (5.29), as equações auto-consistentes podem ser reescritas da seguinte forma

$$t^2 = 2 - n_h(T) - \frac{1}{N} \sum_k \frac{\Lambda_k}{\omega_k} [1 + n(\omega_k^{(1)}) + n(\omega_k^{(2)})], \quad (5.30)$$

$$\mu = -(4 + 2\lambda) \left( 1 - \frac{\Delta_\pi}{\Lambda_\pi} n_h(T) \right) + \frac{1}{N} \sum_k \left( \frac{\Lambda_k - \Delta_k}{\omega_k} \right) f(k) [1 + n(\omega_k^{(1)}) + n(\omega_k^{(2)})], \quad (5.31)$$

$$p_1 = \frac{1}{2} \frac{\Delta_\pi}{\Lambda_\pi} n_h(T) - \frac{1}{2N} \sum_k \frac{\Delta_k \gamma_k}{\omega_k} [1 + n(\omega_k^{(1)}) + n(\omega_k^{(2)})], \quad (5.32)$$

$$p_2 = \frac{1}{2} \frac{\Delta_\pi}{\Lambda_\pi} n_h(T) - \frac{1}{2N} \sum_k \frac{\Delta_k \cos k_z}{\omega_k} [1 + n(\omega_k^{(1)}) + n(\omega_k^{(2)})], \quad (5.33)$$

A magnetização "*staggered*"  $m$  na direção do campo aplicado é expressa como

$$m = \frac{\omega_\pi}{\Lambda_\pi} n_h(T) + \frac{1}{N} \sum_k [n(\omega_k^{(1)}) - n(\omega_k^{(2)})], \quad (5.34)$$

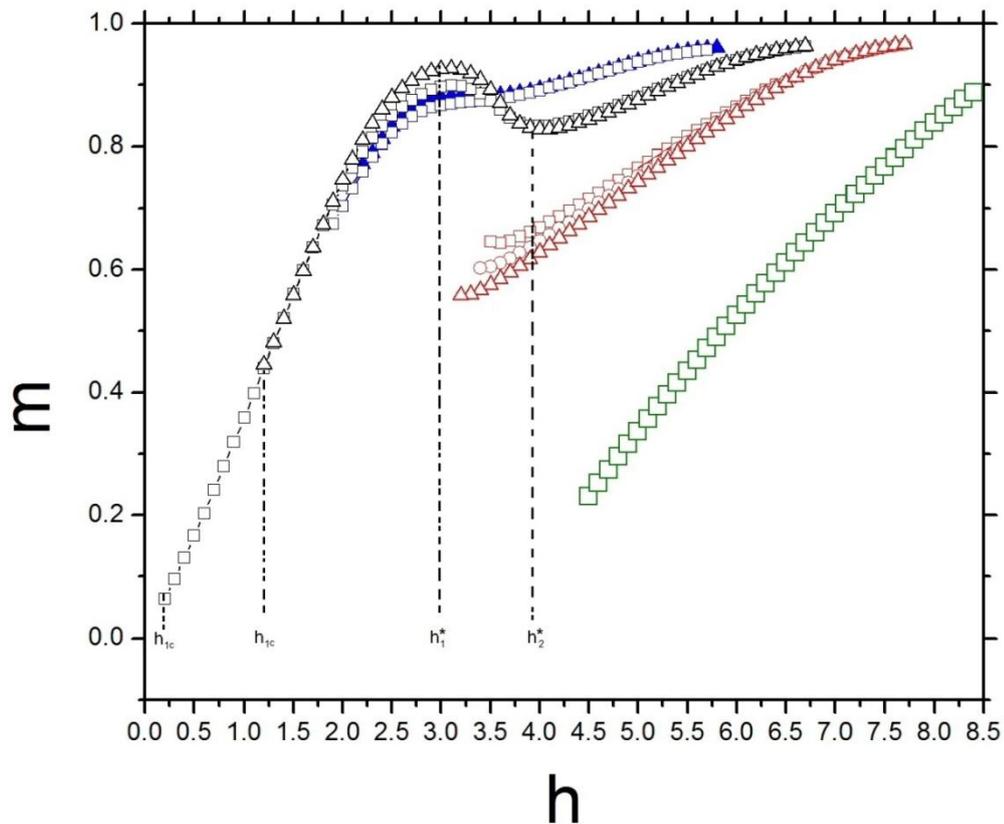
Calculando a correlação  $\langle S_0^x S_r^x \rangle$ , podemos obter a magnetização "*staggered*"  $m_x$  no plano  $xy$ .

$$m_x = \sqrt{2t} \sqrt{n_h(T)} \sqrt{1 - \frac{\Delta_\pi}{\Lambda_\pi}} \quad (5.35)$$

As equações acima representam um sistema de cinco equações auto-consistente, e seis variáveis,  $t$ ,  $\mu$ ,  $p_1$ ,  $p_2$ ,  $m$  e  $n_h(T)$ . Por meio da condição de *gap* nulo em  $k_o = \pi$  podemos obter mais uma equação.

### 5.2.3. Resultados

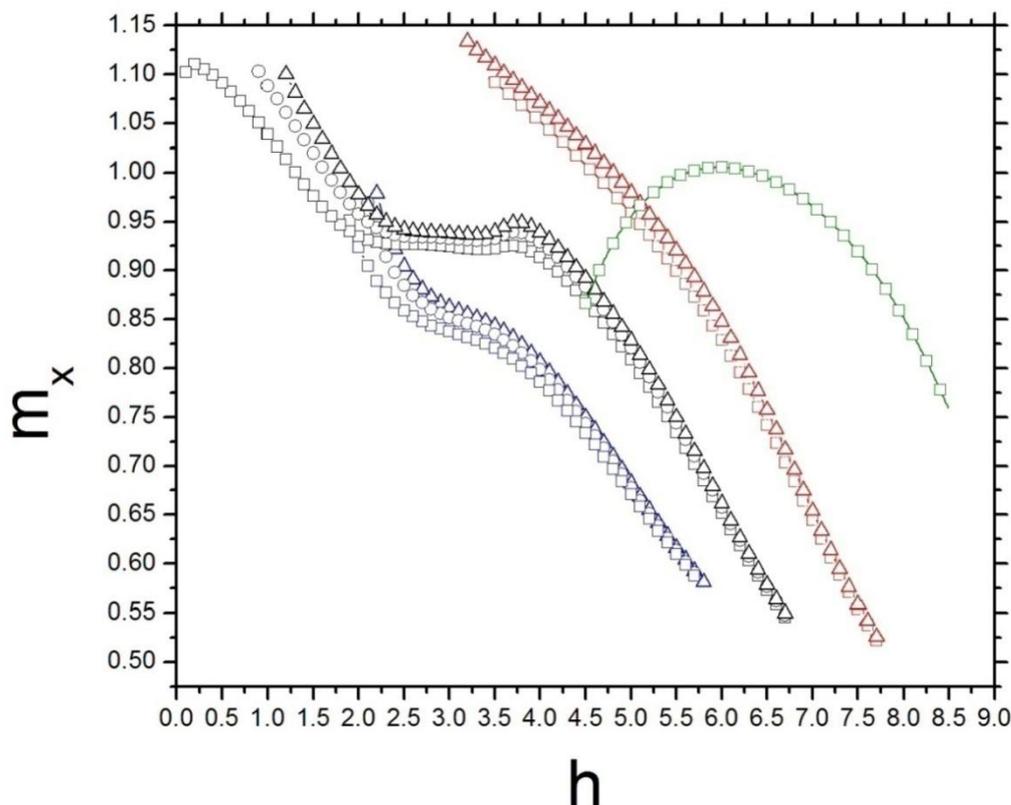
Na Fig. 5.5, a magnetização  $m$  na direção do campo aplicado, aumenta com o campo magnético externo a partir de em  $h_{1c}$ , definido como o campo necessário para induzir ordem de longo alcance. Para os casos de anisotropia  $D = 6, 7$ , a magnetização apresenta um comportamento singular, caracterizado por uma queda da magnetização com o aumento de  $h$  na região  $h_1^* < h < h_2^*$  (o caso  $D = 7$  foi destacado na Fig. (5.5)). A queda da magnetização *staggered* na direção  $z$  está relacionada ao fato de que para esses valores de anisotropia e campo, o sistema se encontra na fase *Spin-Flop* (SF) [113]. A fase (SF) tem ordem ferromagnética na direção  $z$  e antiferromagnética no plano  $xy$ . Por outro lado, para  $h > h_2^*$ , a magnetização cresce novamente. Este comportamento não é alterado por  $D_x$ . Para  $D = 6$ , o efeito de  $D_x$  é praticamente imperceptível na região  $h_2^* - h_1^*$ . A anisotropia  $D_x$  aumenta o valor de  $h_{1c}$ , definido como o campo necessário para induzir a ordem de longo alcance. Verifica-se que  $h_{1c} = 1.88$  para  $D_x = 0.01$  e  $h_{1c} = 2.20$  para  $D_x = 0.8$ .



**Figura 5.5:** Magnetização  $m$  como função de  $h$ . As cores Azul, preto, vermelho e verde representam os casos  $D = 6, 7, 8$  e  $10$  respectivamente. Fixamos  $\lambda = 0.01$ . Os casos de  $D_x = 0.01, 0.1$  e  $0.8$  são representados por quadrados, círculos e triângulos respectivamente.  $h_{1c}$  é o campo magnético necessário para induzir ordem,  $h_1^*$  e  $h_2^*$  são os campos que delimitam a região de comportamento singular.

Para valores de anisotropia  $D > 8$ , a magnetização não apresenta pontos de máximo, e os efeitos de  $D_x$  são mais pronunciados próximo da região  $h_{lc}$ . Finalmente, se  $D = 10$ , a magnetização cresce a partir de  $h_{lc}$ , até atingir a saturação, o efeito da anisotropia  $D_x$  não é perceptível.

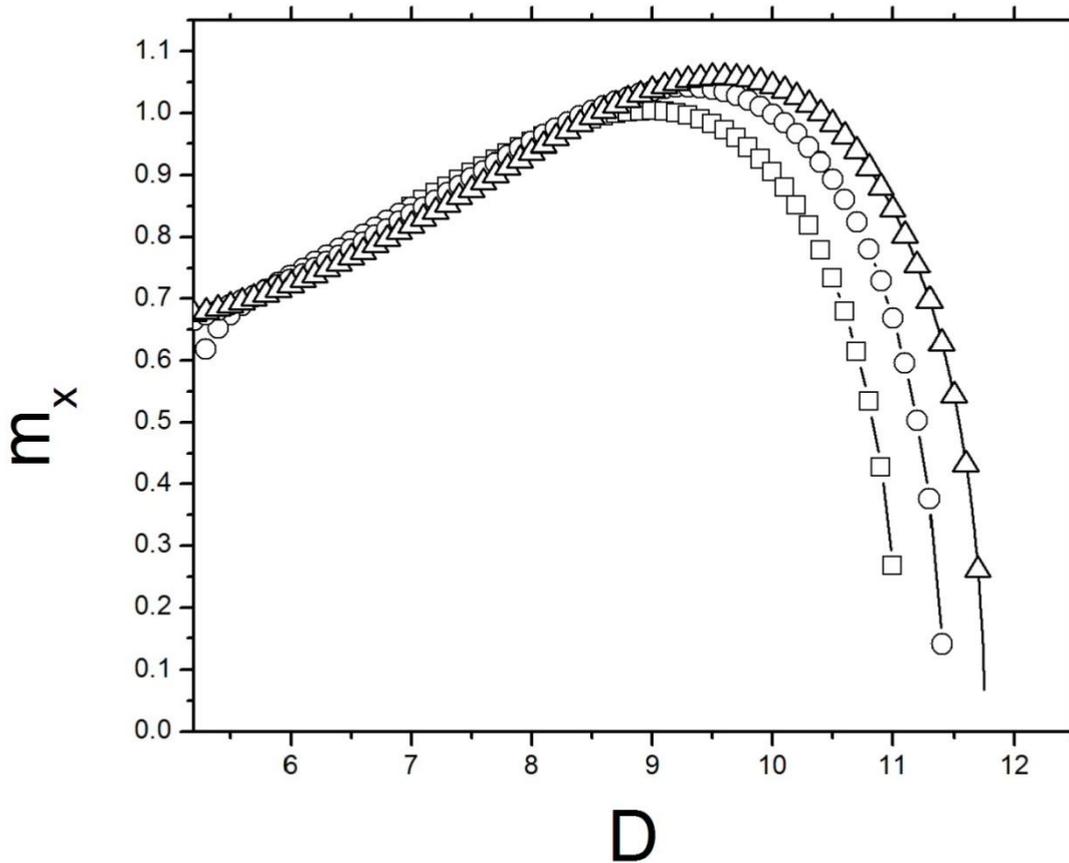
A Fig. 5.6, mostra a magnetização  $m_x$  como função de  $h$ . A magnetização  $m_x$  começa de um valor finito, e decresce com o aumento de  $h$  nos casos onde,  $6 \leq D \leq 8$ . Destacando o caso  $D = 7$ , podemos ver que  $m_x$  apresenta uma região quase constante, que lembra um comportamento do tipo platô. À medida que aumentamos  $D$ , esse efeito desaparece, e para  $D = 10$ , por exemplo, a magnetização  $m_x$  começa de um valor finito e cresce até atingir um ponto de máximo em  $h^* = 5.9$ , ver Fig. 5.6 (linha verde). O efeito da anisotropia  $D_x$  é mais perceptível para valores de campo próximo de  $h_{lc}$ .



**Figura 5.6:** Magnetização  $m_x$  como função de  $h$  para  $\lambda = 0.01$ . As curvas nas cores Azul, preto, vermelho e verde representam os casos  $D = 6, 7, 8$  e  $10$ , respectivamente. Os casos de  $D_x = 0.01, 0.1$  e  $0.8$  são representados por quadrados, círculos e triângulos respectivamente.

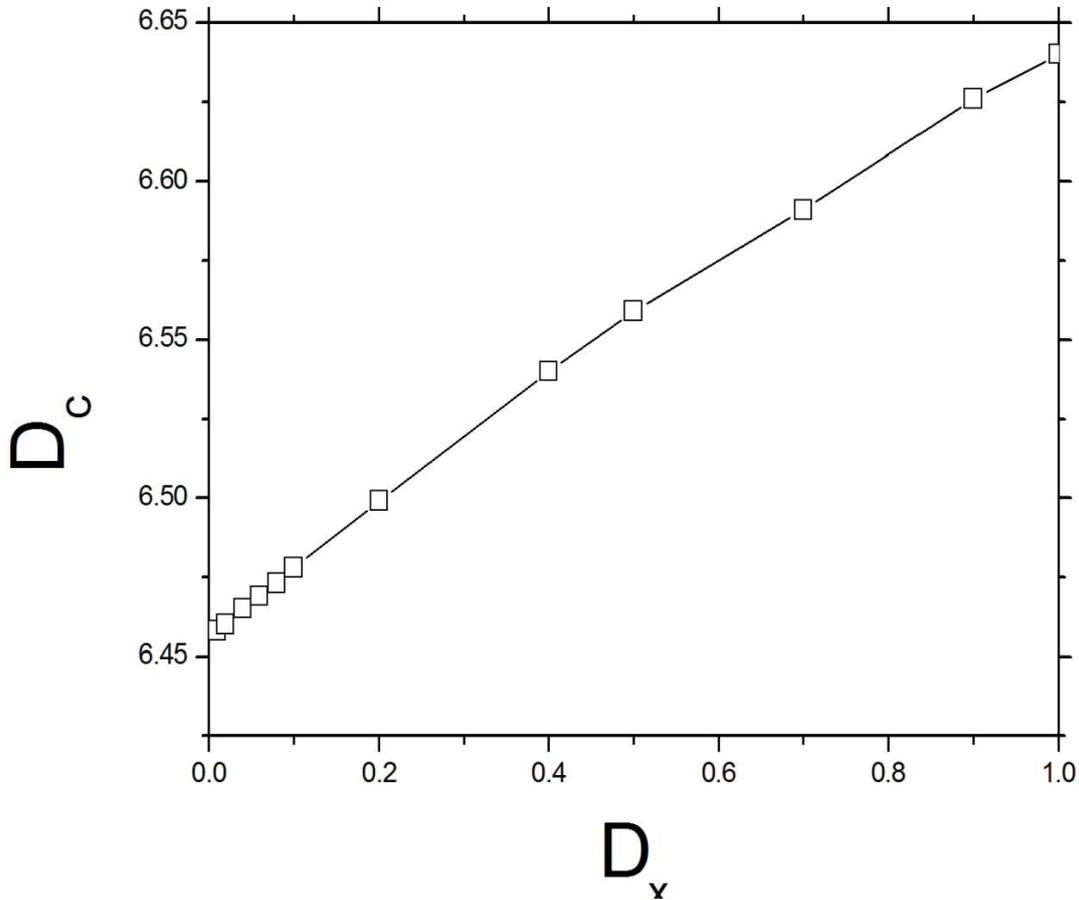
A partir de  $h^*$ , a magnetização decresce até atingir o valor zero, próximo de  $h_{2c} \sim 8.49$ . Para  $D = 10$ ,  $D_x$  não é capaz de induzir efeitos perceptíveis no gráfico.

A Fig. 5.7 mostra a o comportamento da magnetização *staggered*  $m_x$  em  $T = 0$ , como função da anisotropia  $D$ . Inicialmente, a magnetização aumenta com a anisotropia  $D$ , caracterizando uma rotação dos *spins* (fase (SF)) para o campo magnético fixo  $h = 5$ . No entanto, existe um certo valor de  $D$ , no qual a magnetização passa a decresce com  $D$  até se anular em  $D_c$ . O efeito do acoplamento entre planos é aumentar o valor de  $D_c$ .



**Figura 5.7:** Magnetização  $m_x$  como função de da anisotropia  $D$  para  $h = 5$ ,  $D_x = 0.001$  e  $T = 0$ . Quadrados  $\lambda = 0.01$ , círculos  $\lambda = 0.1$  e triângulos  $\lambda = 0.2$ .

A Fig. 5.8 mostra o efeito de  $D_x$  em  $D_c$  para  $h = 1.5$  e temperatura zero. O valor crítico de  $D$  aumenta levemente com  $D_x$ . O gráfico apresenta comportamento quase linear.



**Figura 5.8:** Anisotropia crítica como função de  $D_x$  para o caso  $\lambda = 0.01$ ,  $h = 1.5$  e  $T = 0$ .

A Fig. 5.9 mostra a magnetização  $m_x$  como função da temperatura. Em todos os casos a magnetização  $m_x$  decresce com a temperatura. O efeito de  $D_x$  sobre  $T_c$  é mais pronunciado em  $D = 8$ .

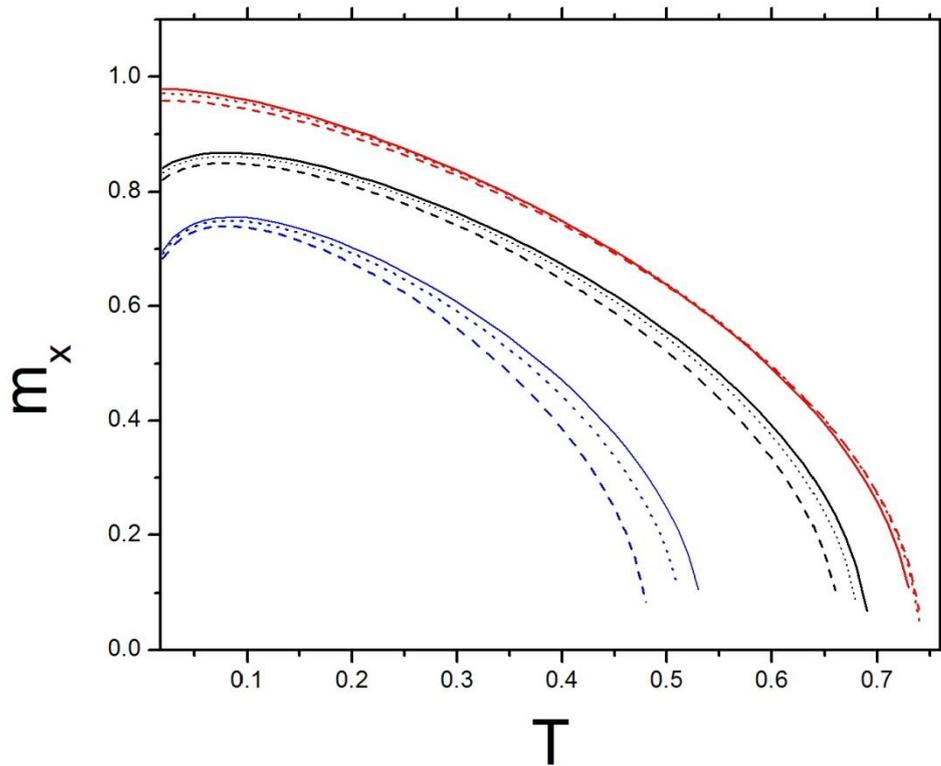
A Fig. 5.10 mostra a magnetização  $m$  como função da temperatura  $T$ . A magnetização também decresce com a temperatura  $T$ . Neste caso, a magnitude de  $m$  diminui com a anisotropia  $D$  e aumenta com a anisotropia  $D_x$ .

A Fig. 5.11 mostra o comportamento da temperatura crítica  $T_c$  como função de  $h$ , fixamos  $D_x = 0.5$  e  $\lambda = 0.01$ . Pode-se ver claramente a indução de ordem de longo alcance por meio de  $h$ . Note que para pequenos valores de  $h$ ,  $T_c$  tende à zero em todos os casos. Para  $D = 6$  (quadrado), temos que o valor de campo  $h_{1c}$ , necessário para o sistema apresentar ordem de longo alcance, é da ordem de  $h_{1c} = 2.51$ . Enquanto o valor de  $h_{2c}$ , no qual a magnetização  $m_x$  vai à zero, é  $7.44$ . Para  $D = 8$  (círculos), o campo  $h_{1c} = 0.43$  e  $h_{2c} = 8.61$ . Para  $D = 10$  (triângulos),  $h_{1c} = 1.70$  e  $h_{2c} =$

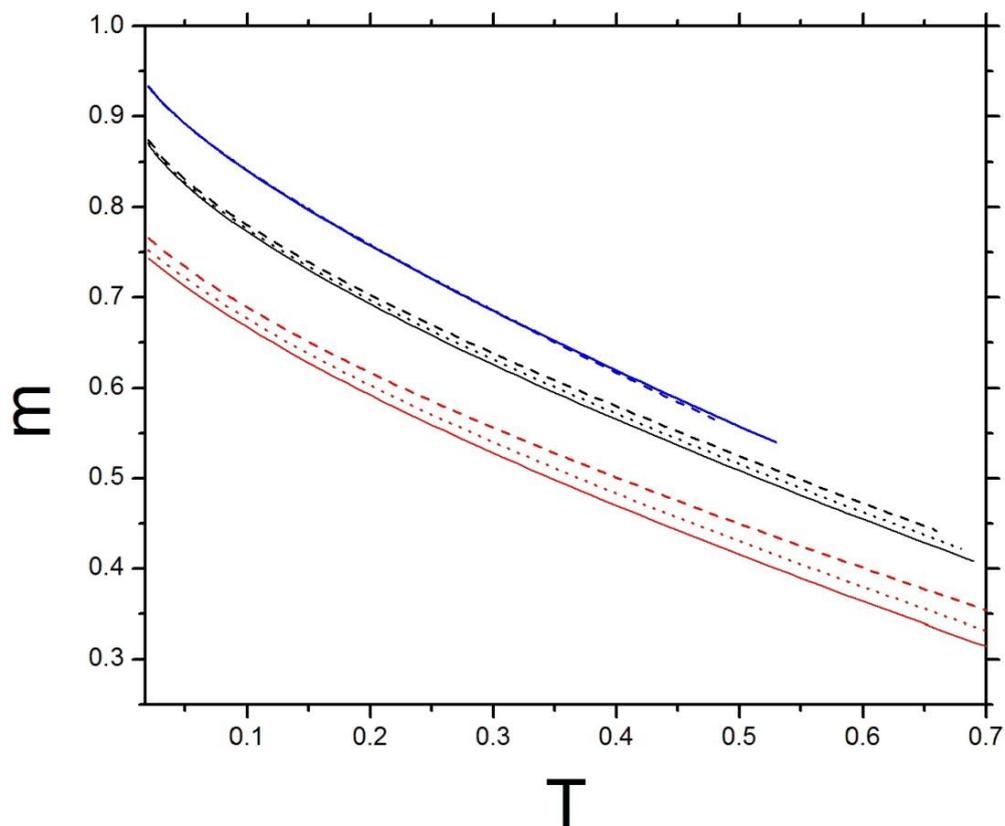
9.62. Os valores de  $h_{1c}$  e  $h_{2c}$  são difíceis de serem calculados, as equações apresentam divergências numéricas próximas a esses pontos. A razão para essa dificuldade pode ser o fato que  $t$  é muito pequeno nessa região, e a idéia da condensação dos bósons  $t$  pode não ser um bom ponto de partida.

A Fig. 5.12 mostra a temperatura crítica  $T_c$  em função de  $\lambda$ . Fixamos  $D = 7$  e  $h = 1.5$ . Estudamos então o efeito de  $D_x = 0.01$  e  $0.8$  sobre  $T_c$ . Em ambos os casos, o aumento do acoplamento entre os planos implica no aumento da temperatura crítica do sistema. Por outro lado,  $D_x$  favorece a queda da magnetização  $m_x$ .

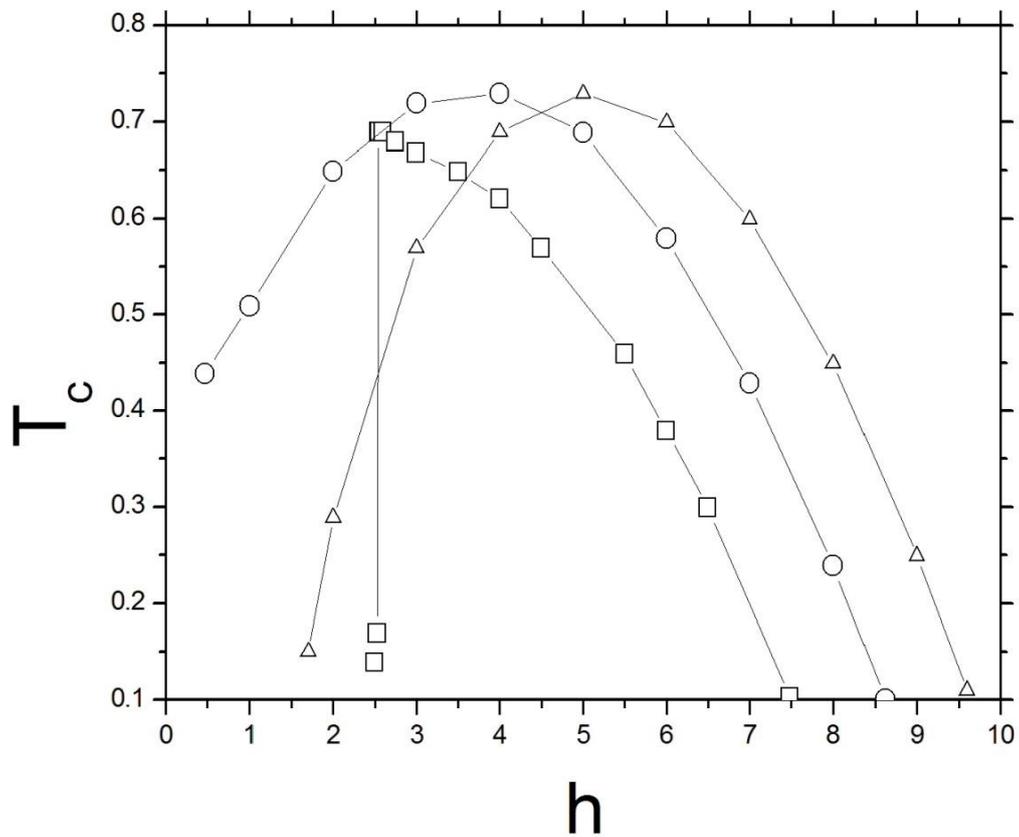
A Fig. 5.13 mostra o calor específico  $C_v$  em baixas temperaturas. As anisotropias  $D$  e  $D_x$  decrescem a magnitude do calor específico.



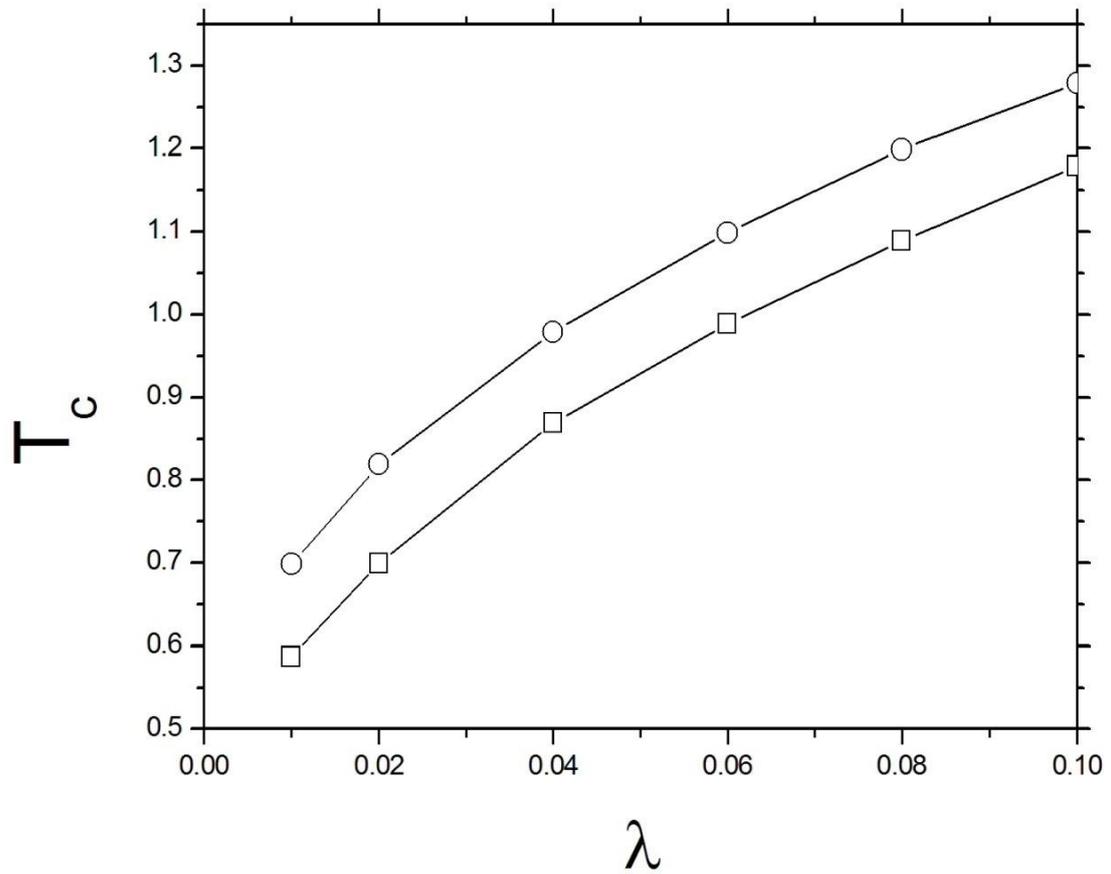
**Figura 5.9:** Magnetização  $m_x$  como função da temperatura  $T$  para  $h = 5$ . Os casos  $D = 6, 7$  e  $8$  são representados pelas cores azul, preto e vermelho, respectivamente. Os casos  $D_x = 0.01, 0.5$  e  $0.8$  são representados por linhas cheias, pontilhada e tracejada, respectivamente. Fixamos  $\lambda = 0.01$ .



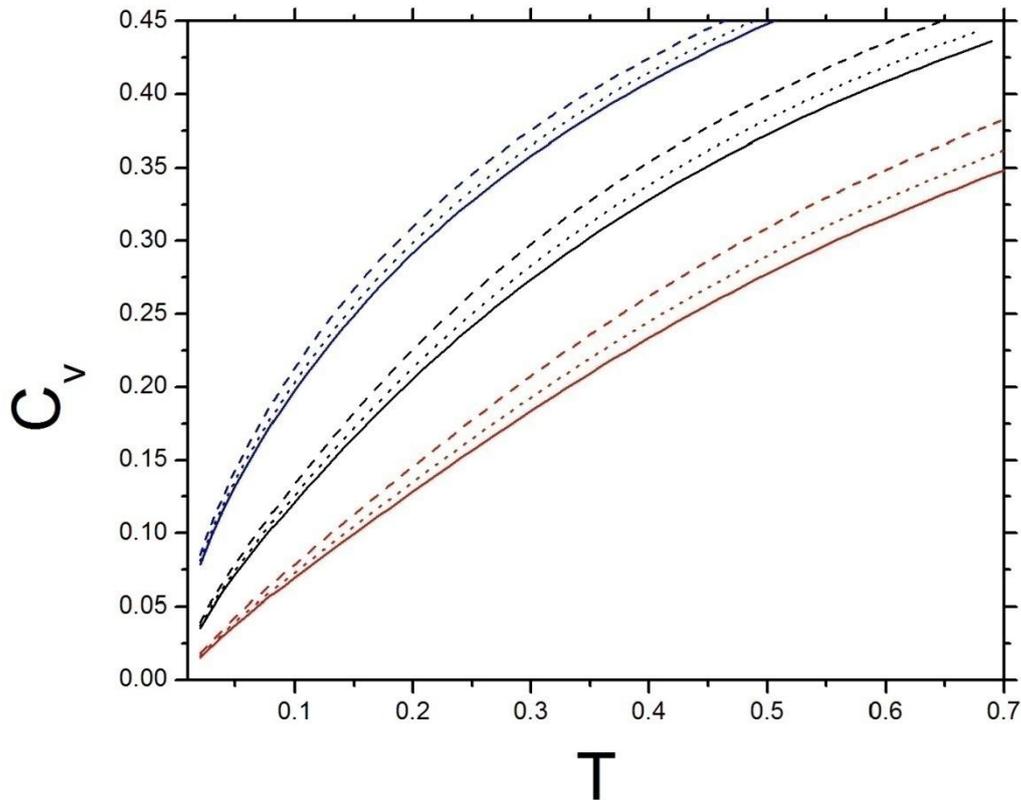
**Figura 5.10:** Magnetização  $m$  como função da temperatura  $T$ . Fixamos  $\lambda = 0.01$ . Os casos  $D = 6, 7$  e  $8$  são representados pelas cores azul, preto e vermelho, respectivamente. Os casos  $D_x = 0.01, 0.5$  e  $0.8$  são representados por linha cheia, pontilhada e tracejada, respectivamente.



**Figura 5.11:** Temperatura crítica  $T_c$  como função do campo magnético externo  $h$ . Fixamos  $D_x = 0.5$  e  $\lambda = 0.01$ . Quadrado  $D = 6$ , círculo  $D = 7$  e triângulo  $D = 10$ .



**Figura 5.12:** Temperatura crítica como função do acoplamento entre planos  $\lambda$ . Fixamos  $h = 1.5$  e  $D = 7$ . Quadrado,  $D_x = 0.8$  e círculo,  $D_x = 0.01$ .



**Figura 5.13:** Calor específico  $C_v$  como função da temperatura  $T$ . Fixamos  $\lambda = 0.01$ . Os casos  $D = 6, 7$  e  $8$  são representados pelas cores azul, preto e vermelho, respectivamente. Os casos  $D_x = 0.01, 0.5$  e  $0.8$  são representados por linha cheia, pontilhada e tracejada, respectivamente.

### 5.2.4 Conclusão

Usando o método do *bond operator*, estudamos o modelo de Heisenberg antiferromagnético quase- $2d$  com anisotropias de íon único  $D_x$  e  $D$ .

O sistema apresenta dois tipos de magnetização, uma magnetização *staggered*  $m_x$ , no plano perpendicular ao campo magnético aplicado e outra magnetização  $m$  na direção do campo. A magnetização  $m_x$  reflete a fase *spin-flop* (SF), definida como uma região onde os spin possuem ordem ferromagnética na direção do campo e antiferromagnética no plano perpendicular ao campo. O acoplamento entre planos e o campo magnético externo são capazes de induz

ordem de longo alcance no sistema. Isso significa que quanto maior for  $\lambda$  e  $h$ , maior será o valor de  $D_c$ . A magnetização  $m_x$  tende a aumentar com o aumento da tridimensionalidade.

Calculamos o efeito da anisotropia  $D_x$  sobre o valor crítico de  $D_c$ . Em baixas temperaturas, e para  $h = 1.5$ , a anisotropia intra-plano  $D_x$  aumentou levemente o valor de  $D_c$ . Devido à diferença de magnitude entre os dois parâmetros  $D$  e  $D_x$ , esse efeito foi quase imperceptível.

As magnetizações  $m$  e  $m_x$ , apresentam comportamentos singulares (interpretamos esses resultados como uma região com ordem magnética do tipo (SF) ) que dependem do campo e da anisotropia  $D$ . Nossos cálculos indicam que existe uma região de campo magnético, onde a magnetização  $m$  apresenta um ponto de máximo e de mínimo.

A anisotropia  $D_x$  diminui a temperatura crítica do sistema, enquanto o acoplamento entre planos aumenta. A temperatura crítica foi definida como sendo a temperatura na qual a magnetização  $m_x$  se anula, e neste caso, como a anisotropia  $D_x$  favorece os spins na direção  $y$ , notamos que  $m_x$  *decrece com*  $D_x$ . Por outro lado, a magnetização  $m$  é favorecida por  $D_x$ .

## Capítulo 6

### Conclusões e perspectivas futuras

Analizamos o modelo de Heisenberg frustrado em duas e três dimensões com anisotropia uniaxial. Usamos três métodos para estudar esses modelos; Teoria de ondas de spin linear, teoria de ondas de spin modificada e a técnica do *bond operator* para *spin-1*.

No capítulo 3, estudamos o modelo ferrimagnético na rede quadrada com uma anisotropia espacial entre os segundos vizinhos. O método de teoria de ondas de *spin* linear funciona muito bem em temperaturas nulas, portanto os resultados obtidos foram satisfatórios. Entretanto, o sistema pode ainda ser generalizado por na presença de uma anisotropia espacial entre primeiros vizinhos e uma anisotropia uniaxial. Com a anisotropia uniaxial favorecendo o eixo fácil  $z$ , os cálculos poderiam ser realizado em temperaturas finitas. Para incluir os efeitos da temperatura em conjunto com a anisotropia, seria mais adequado considerar a interação entre os magnons no sistema. Esse estudo representa uma perspectiva futura nesse contexto.

No capítulo 4, estudamos o modelo de Heisenberg antiferromagnético em uma rede quadrada com anisotropia espacial  $\lambda$  entre primeiros vizinhos e uma anisotropia de eixo fácil  $D$ . Como perspectiva futura para esse trabalho, pode-se desenvolver um estudo mais detalhado do ponto crítico quântico  $(\eta^*, \lambda^*)$  que determina uma transição diretamente entre as fases (AF) e (CL). Além disso, em temperaturas finitas, o método não se mostrou confiável quando os parâmetros  $D$  e  $\lambda$  tendem a zero, pois a temperatura crítica do sistema não se anulou completamente em alguns casos. O modelo pode ainda ser estudado por meio de outro tipo de abordagem, por exemplo, teoria de ondas de spin modificada de Takahashi [112], no qual considera-se um vínculo que obriga as magnetizações de sub-rede serem nulas em temperaturas finitas quando  $D = 0$ .

No capítulo 5, tratamos o modelo de Heisenberg de *spin 1* em uma rede cúbica com interação entre primeiros  $J_1$ , segundos  $J_2$ , terceiros vizinhos  $J_3$ , e uma anisotropia de plano fácil  $D$ . Usamos a técnica do *bond operator* para determinar o diagrama de fase do sistema. A anisotropia  $D$  induz desordem, e para  $D > D_c$  o

sistema encontra-se em uma fase paramagnética quântica em  $T = 0$ . Através do diagrama de fase no plano  $D_c - \eta (= J_2/J_1)$ , mantendo  $\alpha = J_3/J_1$  fixo, determinamos uma região desordenada que depende da interação  $\alpha$  entre os terceiros vizinhos. Verificamos que quanto maior o parâmetro  $\alpha$ , maior será a região desordenada entre as fases ordenadas (AF) e (CL), portanto mesmo em dimensões elevadas, um sistema de *spin* 1 pode apresentar uma região magneticamente desordenada no limite de  $D$  indo para zero. Para isto, basta que a interação entre terceiros vizinhos seja relevante no modelo. Em temperaturas finitas, mostramos a existência de uma fase paramagnética que depende dos parâmetros  $D$ ,  $\alpha$  e  $\eta$ .

Por fim, estudamos o modelo de Heisenberg na rede cúbica considerando um acoplamento  $\lambda$  entre os planos. Nesse caso, consideramos apenas a interação entre primeiros vizinhos e incluímos a anisotropia de plano fácil  $D$  e intraplano  $D_x$ . Consideramos também um campo magnético aplicado na direção do eixo  $z$ . Estudando o modelo quase bidimensional,  $\lambda \ll 1$ , e no regime de  $D_x/J < 1$ , chegamos às seguintes conclusões: Em  $T = 0$ ,  $D_x$  aumenta levemente o valor de  $D_c$ , ou seja, induz uma ordem no plano perpendicular ao eixo  $z$ . Na região  $D$ -grande, o campo magnético induz ordem de longo alcance no sistema através da condensação dos bósons.

Dependendo do valor da anisotropia  $D$ , as magnetizações do sistema ( $m$ ,  $m_x$ ) parecem indicar que existe uma região do tipo *spin-flop*. Essa região é bem pronunciada para  $D = 6$  e  $7$ . O acoplamento entre planos aumenta a temperatura crítica  $T_c$ , pois, induz tridimensionalidade ao sistema. A anisotropia  $D_x$  diminui o valor de  $T_c$ . Como a anisotropia  $D_x$  favorece os spins na direção  $y$ , a magnetização  $m_x$  tende a decrescer com o aumento dessa anisotropia.

Embora a técnica do bond operator seja muito eficaz para calcular os pontos de transição de fase, existem algumas considerações que devem ser feitas. À medida que incluímos anisotropias no sistema pode ser que o gap da energia também se anule em outros valores de  $k_o$  diferente de  $\pi$ . Nesse caso devemos analisar se a aproximação da condensação dos bósons  $t$  ainda é um bom ponto de partida. Outra questão importante, é o fato de que geralmente quando a variável  $t$  assume valores próximos zero, as equações auto consistentes tendem a divergir, isso ocorre poquer na fase  $D$ -grande, a média de dos operadores  $t$  deve ser próxima de  $1$ .

## Apêndice A

### Diagonalização de $H^{(2)}$ na fase (CL)

Substituindo as transformações (3.15) em (3.14) chegamos ao seguinte Hamiltoniano

$$\begin{aligned}
 H^{(2)} = & J_1 \sum_k (\omega_k^{(A)} \bar{A}_k^+ \bar{A}_k + \omega_k^{(B)} \bar{B}_k^+ \bar{B}_k + \omega_k^{(a)} \bar{a}_k^+ \bar{a}_k + \omega_k^{(b)} \bar{b}_k^+ \bar{b}_k) \\
 & + \sum_k [f_1(\bar{A}_k^+ \bar{a}_k + H.c.) + f_2(\bar{A}_k \bar{B}_k + H.c.) + f_3(\bar{A}_k \bar{b}_k + H.c.) \\
 & + f_4(\bar{a}_k^+ \bar{B}_k + H.c.) + f_5(\bar{a}_k \bar{b}_k + H.c.) + f_6(\bar{b}_k^+ B_k + H.c.)] + \Lambda_k
 \end{aligned} \quad (\text{A-1}),$$

onde

$$\begin{aligned}
 \omega_k^{(A)} = & A_{ok}(U_{11}^2 + U_{13}^2) + A_{ok}(U_{11}^2 + U_{13}^2) + 2E_{ok}(U_{11}U_{12} + U_{14}U_{13}) \\
 & + 2G_{ok}(U_{11}U_{14} + U_{12}U_{13}) + 2F_{ok}U_{11}U_{13} + 2I_{ok}U_{12}U_{14}
 \end{aligned} \quad (\text{A-2}),$$

$$\begin{aligned}
 \omega_k^{(B)} = & A_{ok}(U_{13}^2 + U_{33}^2) + A_{ok}(U_{23}^2 + U_{34}^2) + 2E_{ok}(U_{13}U_{23} + U_{34}U_{33}) \\
 & + 2G_{ok}(U_{13}U_{34} + U_{23}U_{33}) + 2F_{ok}U_{13}U_{33} + 2I_{ok}U_{23}U_{34}
 \end{aligned} \quad (\text{A-3}),$$

$$\begin{aligned}
 \omega_k^{(a)} = & A_{ok}(U_{12}^2 + U_{23}^2) + A_{ok}(U_{22}^2 + U_{24}^2) + 2E_{ok}(U_{12}U_{22} + U_{24}U_{23}) \\
 & + 2G_{ok}(U_{12}U_{24} + U_{22}U_{23}) + 2F_{ok}U_{12}U_{23} + 2I_{ok}U_{22}U_{24}
 \end{aligned} \quad (\text{A-4}),$$

$$\begin{aligned}
 \omega_k^{(b)} = & A_{ok}(U_{14}^2 + U_{34}^2) + A_{ok}(U_{24}^2 + U_{44}^2) + 2E_{ok}(U_{14}U_{24} + U_{44}U_{34}) \\
 & + 2G_{ok}(U_{14}U_{44} + U_{24}U_{34}) + 2F_{ok}U_{14}U_{34} + 2I_{ok}U_{24}U_{44}
 \end{aligned} \quad (\text{A-5}),$$

$$\begin{aligned}
 f_1 = & A_{ok}(U_{11}U_{12} + U_{23}U_{13}) + B_{ok}(U_{12}U_{22} + U_{24}U_{14}) \\
 & + E_{ok}(U_{12}^2 + U_{11}U_{22} + U_{24}U_{13} + U_{14}U_{23}) \\
 & + G_{ok}(U_{12}U_{14} + U_{11}U_{24} + U_{22}U_{13} + U_{12}U_{23}) \\
 & + F_{ok}(U_{12}U_{13} + U_{11}U_{23}) + I_{ok}(U_{22}U_{14} + U_{12}U_{24}) ,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 f_2 = & A_{ok}(U_{11}U_{13} + U_{33}U_{13}) + B_{ok}(U_{12}U_{23} + U_{34}U_{14}) \\
 & + E_{ok}(U_{11}U_{23} + U_{13}U_{12} + U_{34}U_{13} + U_{14}U_{33}) \\
 & + G_{ok}(U_{13}U_{14} + U_{11}U_{34} + U_{23}U_{13} + U_{12}U_{33}) \\
 & + F_{ok}(U_{13}^2 + U_{11}U_{33}) + I_{ok}(U_{23}U_{14} + U_{12}U_{34}) ,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 f_3 = & A_{ok}(U_{11}U_{14} + U_{34}U_{13}) + B_{ok}(U_{12}U_{24} + U_{14}U_{44}) \\
 & + E_{ok}(U_{11}U_{24} + U_{14}U_{12} + U_{44}U_{13} + U_{14}U_{34}) \\
 & + G_{ok}(U_{14}^2 + U_{11}U_{44} + U_{24}U_{13} + U_{12}U_{34}) \\
 & + F_{ok}(U_{14}U_{13} + U_{11}U_{34}) + I_{ok}(U_{24}U_{14} + U_{12}U_{44}) ,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f_4 = & A_{ok}(U_{12}U_{13} + U_{33}U_{23}) + B_{ok}(U_{22}U_{23} + U_{34}U_{24}) \\
& + E_{ok}(U_{12}U_{23} + U_{13}U_{22} + U_{34}U_{23} + U_{24}U_{33}) \\
& + G_{ok}(U_{13}U_{24} + U_{12}U_{34} + U_{23}^2 + U_{22}U_{33}) \\
& + F_{ok}(U_{13}U_{23} + U_{12}U_{33}) + I_{ok}(U_{23}U_{24} + U_{22}U_{34}) \quad ,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f_5 = & A_{ok}(U_{12}U_{14} + U_{34}U_{23}) + B_{ok}(U_{22}U_{24} + U_{44}U_{24}) \\
& + E_{ok}(U_{12}U_{24} + U_{14}U_{22} + U_{44}U_{23} + U_{24}U_{34}) \\
& + G_{ok}(U_{14}U_{24} + U_{12}U_{44} + U_{24}U_{23} + U_{22}U_{34}) \\
& + F_{ok}(U_{14}U_{23} + U_{12}U_{34}) + I_{ok}(U_{24}^2 + U_{22}U_{44})
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
f_6 = & A_{ok}(U_{13}U_{14} + U_{34}U_{33}) + B_{ok}(U_{23}U_{24} + U_{44}U_{34}) \\
& + E_{ok}(U_{13}U_{24} + U_{14}U_{23} + U_{44}U_{33} + U_{34}^2) \\
& + G_{ok}(U_{14}U_{34} + U_{13}U_{44} + U_{24}U_{33} + U_{23}U_{34}) \\
& + F_{ok}(U_{14}U_{33} + U_{13}U_{34}) + I_{ok}(U_{24}U_{23} + U_{23}U_{44}) \quad .
\end{aligned}$$

Para diagonalizar (A-1), temos que determinar os valores de  $U_{ij}$  que resolvem o sistema de dez equações, definido por  $f_1 = 0, f_2 = 0, f_3 = 0, f_4 = 0, f_5 = 0, f_6 = 0$ , juntamente com as Eq.(3.16).

## Apêndice B

### Processo de desacoplamento

Depois de substituir a transformação de Bogoliubov em (4.9), ficamos com o seguinte Hamiltoniano

$$\begin{aligned} \bar{H}^{(4)} = & -J_1 \sum_k h^{(1)} \alpha_k^+ \alpha_2 \alpha_3 \alpha_1^+ + h^{(2)} h \alpha_k^+ \alpha_2 \alpha_3^+ \alpha_1 + h^{(3)} \alpha_k \alpha_2^+ \alpha_3 \alpha_1^+ + h^{(4)} \alpha_k^+ \alpha_2^+ \alpha_3 \alpha_1 \\ & + h^{(5)} \alpha_k \alpha_2 \alpha_3^+ \alpha_1^+ + h^{(6)} \alpha_k^+ \alpha_2 \alpha_3 \beta_1 + h^{(7)} \alpha_k^+ \alpha_2 \beta_3^+ \alpha_1^+ + h^{(8)} \alpha_k^+ \alpha_2 \beta_3^+ \beta_1 + h^{(9)} \alpha_k^+ \beta_2 \alpha_3 \alpha_1^+ \\ & + h^{(10)} \alpha_k^+ \beta_2^+ \alpha_3 \beta_1 + h^{(11)} \alpha_k^+ \beta_2^+ \beta_3^+ \beta_1 + h^{(12)} \beta_k \alpha_2 \alpha_3 \alpha_1^+ + h^{(13)} \beta_k \alpha_2 \beta_3^+ \alpha_1^+ + h^{(14)} \beta_k \alpha_2 \beta_3^+ \beta_1 \\ & + h^{(15)} \beta_k \beta_2^+ \beta_3^+ \alpha_1 + h^{(16)} \beta_k \beta_2^+ \beta_3^+ \beta_1 + h^{(17)} \alpha_k^+ \alpha_2 \beta_3^+ \beta_1 + h^{(18)} \alpha_k^+ \beta_2^+ \alpha_3^+ \alpha_1 + h^{(19)} \alpha_k^+ \beta_2^+ \beta_3^+ \beta_1 \\ & + h^{(20)} \beta_k \alpha_2 \alpha_3^+ \beta_1^+ + h^{(21)} \beta_k \alpha_2 \alpha_3^+ \alpha_1 + h^{(22)} \beta_k \alpha_2 \beta_3 \beta_1^+ + h^{(23)} \beta_k \beta_2^+ \beta_3 \beta_1^+ + h^{(24)} \alpha_k \alpha_2^+ \beta_3^+ \alpha_1^+ \\ & + h^{(25)} \alpha_k \alpha_2^+ \beta_3^+ \beta_1 + h^{(26)} \beta_k^+ \beta_2 \alpha_3 \beta_1 + h^{(27)} \beta_k^+ \beta_2 \beta_3^+ \beta_1 + h^{(28)} \alpha_k^+ \alpha_2 \beta_3^+ \alpha_1^+ + h^{(29)} \beta_k \alpha_2^+ \alpha_3 \alpha_1 \\ & + h^{(30)} \beta_k \alpha_2^+ \beta_3^+ \alpha_1 + h^{(31)} \beta_k \beta_2 \beta_3^+ \beta_1^+ + h^{(32)} \alpha_k \alpha_2 \beta_3 \alpha_1^+ + h^{(33)} \beta_k^+ \beta_2^+ \beta_3 \beta_1 + h^{(34)} \beta_k \beta_2^+ \alpha_3 \beta_1 \end{aligned}$$

As quantidades  $h^{(i)}$  são função dos parâmetros  $\eta$ ,  $\lambda$ ,  $D$  e das variáveis  $U_k$  e  $V_k$ .

O produto de quatro operadores, presente em  $\bar{H}^{(4)}$ , serão desacoplados da seguinte forma

$$\begin{aligned} ABCD = & \langle AB \rangle CD + \langle AC \rangle BD + \langle AD \rangle BC \\ & + \langle BC \rangle AD + \langle BD \rangle AC + \langle CD \rangle AB \end{aligned}$$

Por exemplo, considere o termo  $h^{(6)} \alpha_k^+ \alpha_2 \alpha_3 \beta_1$ . Uma parcela de  $h^{(6)}$  nos fornece o seguinte produto  $\gamma_{(k-2)} U_\kappa U_2 U_3 V_1 \alpha_\kappa^+ \alpha_2 \alpha_3 \beta_1$ . Realizando o desacoplamento de campo médio obteremos

$$\sum_{\kappa,2,3,1} \gamma_{(k-2)} U_\kappa U_2 U_3 V_1 \alpha_\kappa^+ \alpha_2 \alpha_3 \beta_1 = \sum_{\kappa,2,3,1} \gamma_{(k-2)} U_\kappa U_2 U_3 V_1 \langle \alpha_\kappa^+ \alpha_2 \rangle \alpha_3 \beta_1 + \gamma_{(k-2)} U_\kappa U_2 U_3 V_1 \langle \alpha_\kappa \alpha_3^+ \rangle \alpha_2 \beta_1$$

Note que somente as médias  $\langle \alpha_i \alpha_j^+ \rangle = \langle \beta_i \beta_j^+ \rangle$  ou  $\langle \alpha_i^+ \alpha_j \rangle = \langle \beta_i^+ \beta_j \rangle$ , com  $i = j$  são diferentes de zero. Os fatores de estrutura são escritos na forma

$$\gamma_{(k-2)} = \cos(k_x - k_{2x}) + \lambda \cos(k_y - k_{2y})$$

Finalmente somando em  $k$  e  $k_2$ , chegamos a

$$= (1 + \lambda) \sum_1 \left( \sum_2 U_2^2 n_2 \right) V_1 U_1 \alpha_1 \beta_1 + \sum_1 \left( \sum_3 \gamma_{(3-1)} U_3^2 (n_3 + 1) \right) U_1 V_1 \alpha_1 \beta_1, \text{ com } U_k \text{ e } V_k \text{ dados na seção}$$

$$(4.1) \text{ e } \langle \alpha_k^+ \alpha_k \rangle = \frac{1}{\exp(\hbar \Omega_k) - 1}.$$

## Referências

- [1] E. Ising, Z. Physik **31**, 253 (1925).
- [2] H. Bethe, Z. Physik **71**, 205 (1931).
- [3] N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [4] P. C. Hohenberg, Phys. Rev. **158**, 383 (1967).
- [5] A. W. Sandvik and J. Kurkijarvi, Phys. Rev. B **43**, 5950 (1991).
- [6] J. G. Bednorz and K. A. Muller, Z. Physik B **64**, 189 (1986).
- [7] S. Chakravarty, B. I. Halperin, and D. R. Nelson, Phys. Rev. B **39**, 2344 (1988).
- [8] Wen-Jun Hu, Federico Becca, Alberto Parola, and Sandro Sorella, Phys. Rev. B **88**, 060402(R) (2013).
- [9] C. Nisoli, R. Moessner, P. Schiffer, arXiv:1306.0825 [cond-mat.mes-hall], (2013).
- [10] Scott Kirkpatrick, Phys. Rev. B **16**, 4630–4641 (1977).
- [11] P. W. Anderson., T. Science, **235**, 11961198 (1987).
- [12] Holstein, Primakoff, Phys. Rev. **58**, 1098 (1940).
- [13] H. T. Wang and Y. Wang, Phys. Rev. B **71**, 104429 (2005).
- [14] W. Heisenberg, Z. Phys. **49**, 619 (1928).
- [15] Orlando Donisete Mabelini, Tese de Mestrado, DF-UFAM-2012.
- [16] D. C. Mattis, The Theory of Magnetism I (Springer-Verlag, New York, 1985).
- [17] J. G. Ramos, II Simpósio Brasileiro de Física Teórica, Rio de Janeiro, 1969.
- [18] P. A. M. Dirac, The Principles of quantum mechanics, (Clarendon Press, Oxford, 1958).
- [19] K. Yosida, Theory of Magnetism (Springer-Verlag, New York, 1996), pag.125.
- [20] F. D. Haldane, Phys. Lett. A **93**, 464 (1983); Phys. Rev. Lett. **50**, 1153 (1983).
- [21] E. Ising, Z. Phys. **31**, 253 (1925).
- [22] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [23] H. Kramers e G. H. Wannier, Phys. Rev. **60**, 252 e 263 (1941).
- [24] F. Zernike, Physica **7**, 565 (1942).
- [25] J. Ashkin e W. E. Lamb Jr, Phys. Rev. **64**, 159 (1943).
- [26] R. Kubo, Busseiron-Kenkryv **1**, 1 (1943).
- [27] C. Domb, Phase Transitions and Critical Phenomena, Edited by C. Domb e M. S. Green, vol. **3** (Academic Press, London, 1974).

- [28] D. P. Landau, K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000); K. Binder e E. Luijten, *Phys. Rep.* **344**,179 (2011).
- [29] T. Matsubada e H. Matsuda, *Prog. Theor. Phys.* **16**, 416 (1956); E. H. Lieb, *Phys. Rev. Lett.* **18**, 1046 (1967); *ibi* **19**, 108 (1967).
- [30] J. M. Kosterlitz e D. J. Thouless, *J. Phys.C* **6**, 1181 (1973). Ver também o trabalho de revisão D. R. Nelson, *Phase transitions and critical phenomena*, ed. C. Domb e J. L. Lebowitz, vol. **7**, (Academic Press, New York, 1983).
- [31] L. Néel *Ann. Physique* **18**, 5 (1932).
- [32] A.S.T. Pires, *J. Mag, Mag. Mat* **324**, 2082 (2012).
- [33] B. Schmidt, N. Shannon, and P. Thalmeier, *J. Mag, Mag. Mat.* **310**, 1231 (2007).
- [34] R..S. Lapa, and A.S.T. Pires, *J. Mag, Mag. Mat.* **327**, 1 (2013).
- [35] J. S. Gardner, Guest Editor, *J. Phys.: Condens. Matter*, special issue **23** (2011).
- [36] Misguich G, and Lhuillier C, *Frustrated Spin Systems*,( ed. H. T. Diep , World-Scientific, 2005) and references therein.
- [37] C. Lacroix, P. Mendels, and F. Mila, *Introduction to Frustrated Magnetism*, Vol. 164 of Springer Series in Solid-State Sciences (Springer, New York, 2011).
- [38] E. Dagotto and A. Moreo, *Phys. Rev. Lett.* **63** 2148 (1989).
- [39] P. Chandra and B. Doucot, *Phys. Rev. B* **38**, 9335. (1988).
- [40] E. Dagotto and A. Moreo, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 2148 (1989).
- [41] H. J. Schulz and T. A. L. Ziman, *Europhys. Lett.* **18**, 355 (1992).
- [42] M. E. Zhitomirsky and K. Ueda, *Phys. Rev. B* **54**, 9007 (1996).
- [43] A. E. Trumper, L. O. Manuel, C. J. Gazza, and H. A. Ceccatto, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2216 (1997).
- [44] R. F. Bishop, D. J. J. Farnell, and J. B. Parkinson, *Phys. Rev. B* **58**, 6394 (1998).
- [45] L. Siurakshina, D. Ihle, and R. Hayn, *Phys. Rev. B* **64**, 104406(2001).
- [46] R. R. P. Singh, W. Zheng, J. Oitmaa, O. P. Sushkov, and C. J. Hamer, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 017201 (2003).
- [47] M. Mambrini, A. Lauchli, D. Poilblanc, and F. Mila, *Phys. Rev. B* **74**, 144422 (2006).
- [48] J. Richter and J. Schulenburg, *Eur. Phys. J. B* **73**, 117 (2010).
- [49] J. Reuther and P. Wölfle, *Phys. Rev. B* **81**, 144410 (2010). D. S. Rokhsar, *Phys. Rev. B* **41**, 4619 (1990).

- [50] M. P. Gelfand, R. R. P. Singh, and D. A. Huse, Phys. Rev. B **40**,10801 (1989).
- [51] V. N. Kotov, J. Oitmaa, O. P. Sushkov, and Z.Weihong, Phys. Rev.B **60**, 14613 (1999).
- [52] R. R. P. Singh, Z.Weihong, C. J. Hamer, and J. Oitmaa, Phys. Rev.B **60**, 7278 (1999).
- [53] O. P. Sushkov, J. Oitmaa, and Z.Weihong, Phys. Rev. B **63**, 104420
- [54] N. Read and S. Sachdev, Phys. Rev. Lett. **66**, 1773 (1991).
- [55] V. Murg, F. Verstraete, and J. I. Cirac, Phys. Rev. B **79**, 195119(2009).
- [56] L. Capriotti and S. Sorella, Phys. Rev. Lett. **84**, 3173 (2000).
- [57] L. Capriotti, F. Becca, A. Parola, and S. Sorella, Phys. Rev. Lett.**87**, 097201 (2001).
- [58] J. F. Yu and Y. J. Kao, Phys. Rev. B **85**, 094407 (2012)
- [59] W. H. Wong, C. F. Lo, and Y. L. Wang, Phys. Rev. B **50**, 6126s 1994d.
- [60] K. Ohishi, W. Higemoto, A. Koda, S. R. Saha, R. Kadono, K. Inoue, H. Imai, and H. Higashikawa: J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 063705 (2006).
- [61] A. Hoshikawa, T. Kamiyama, A. Purward, K. Ohishi, W. Higemoto, T. Ishigaki, H. Imai and K. Inoue: J. Phys. Soc. Jpn. **73**, 2597 (2004).
- [62] Y. Pei, M Verdaguer, O. Kahn, J. Sletten, and J.P. Renard, Inorg. Chem. **26** (1987) 138; O Khan, Y. Pei, and Y. Journaux, in Inorganic Materials (Wiley, New York, 1992); O Khan, Molecular Magnetism (VCH, New York, 1993).
- [63] M. Hagiwara K. Minami, Y Narumi, K. Tatani, and Kindo, J. Phys. Soc. Jpn. **67** , 2209 (1998). Y. Takushima, A. Koga, and N. Kawakami, Phys. Rev. B **61**, 15189 (2000).
- [64] P.J. Koningsbruggen, O. Kahn et al. Inorg. Chem. **29**, 3325 (1990).
- [65] S. Pati, S. Ramasesha and D. Sen, Phys. Rev. B **55**, 8894 (1997).
- [66] S. Yamamoto, S. Brehmer and H.J. Mikeska, Phys. Rev. B **57**, 13610(1998).
- [67] C. Wu, B. Chen, X. Dai, Y. Yu and Z.B. Su, Phys. Rev. B **60**, 1057(1998).
- [68] E. Garcia-Matres, et al.J. Magn. Magn. Mater. **149**, 363(1995); A. Zheludev et al. Phys. Rev. Lett. **80**, 3630(1998).
- [69] Y. Takuskima, A. Koga and N. Kawakami, Phys. Rev. B **61**, 15189(2000).
- [70] J. V. Alvarez, R. Valenti and A. Zheludev, Phys. Rev. B **65**, 184417(2002).
- [71] J.H. Park, J.T. Culp, D.W. Hall, D.R. Talham and M.W. Meisel, preprint, cond-mat/0206319.

- [72] N.B. Ivanov, Phys. Rev. B **62**, 3271(2000), and reference therein.
- [73] N.B. Ivanov, J. Richter and U. Schollwock, Phys. Rev. B **58**, 14456(1998).
- [74] N.B. Ivanov, J. Richter and D.J.J. Farnell, Phys. Rev. B **66**, 014421(2002).
- [75] J. I. Igarashi and T. Nagao, Phys. Rev. B **72**, 014403 (2005).
- [76] K. Majumdar, Phys. Rev. B **82**, 144407 (2010). **73**, 184420 (2006).
- [77] J. I. Igarashi and T. Nagao, Phys. Rev. B **72**, 014403 (2005).
- [78] K. Majumdar, Phys. Rev. B **82**, 144407 (2010). **73**, 184420 (2006).
- [79] A. A. Nersesyan and A. M. Tsvelik, Phys. Rev. B **67**, 024422 (2003).
- [80] G. Mendonça. Rodrigo S. Lapa, J. Ricardo de Sousa, K. Majumdar, e T. Datta, J. Stat. Mech, P06022 (2010).
- [81] K. Majumdar, J. Phys. Cond. Matter **23**, 046001 (2011).
- [82] R. F. Bishop. P. H. Y. Li, R. Darradi e J. Richter, J EPL, **83** 47004 (2008)
- [83] A. A. Tsirlin and H. Rosner, Phys. Rev. B **79**, 214417 (2009).
- [84] Y. Murakami and H. Suematsu, Phys. Rev. B **54**, 4146 (1996).
- [85] F. J. Dyson, Phys. Rev. **102**, 1217 (1956).
- [86] S. V. Maleev, Sov. Phys. JETP **6**, 776 (1957).
- [87] J. Oitmaa and C. J. Hamer, Phys. Rev. B **54**, 4146 (1996).
- [88] O. P. Sushkov, V.N. Kotov, Zheng Weihong, J. Oitmaa, Physica B **259-261** 1023-1024, (1999).
- [89] E. Rastelli, A. Tassi, and L. Reatto, Physica. B **97**, 1 (1979).
- [90] E. R. L. Reatto and A. Tassi, J. Phys. C: Solid State Phys. **1** 353 (1985).
- [91] A. F. Barabanov and O. A. Starykh, JETP Letts. **51**, 311 (1990) .
- [92] S. Sachdev, Phys. Rev. B **45**, 12 377 (1992).
- [93] A. V. Dotsenko and O. Sushkov, Phys. Rev. B **50**, 13 (1994) 821.
- [94] A. Chubukov, Phys. Rev. Lett. **69**, (1992) 832.
- [95] M. P. Gelfand, R. R. P. Singh, and D. A. Huse, Phys. Rev. B **40**, (1989) 10801.
- [96] O. P. Sushkov, J. Oitmaa, and Z. Weihong, Phys. Rev. B **63**, 104420 (2001).
- [97] Z. Weihong, R. H. McKenzie, and R. R. P. Singh, Phys. Rev. B **59**, 14 367 (1999).
- [98] R. R. P. Singh, Z. Weihong, C. J. Hammer, and J. Oitmaa, Phys. Rev. B **60** 7278 (1999).
- [99] V. Y. Irkhin, A. A. Katanin, and M. I. Katsnelson, J. Phys.: Condens. Matter **4**, 5227 (1992).

- [100] Kingshuk Majumdar and T. Datta, J. Stat. Phys. 139 (2010).
- [101] D. Ke. Yu, Q. Gu, H. T. Wang, J. L. Shen, Phys. Rev. B **59**, 111(1999).
- [102] H. T. Wang, H. Q. Lin, J. L, Shen, Phys. Rev. B **61**, 4019 (2000).
- [103] B. Kumar, Phy. Re. B **82**, 054404 (2010).
- [104] B. Normand and Ch. Rueg, arXiv: 1006.4196
- [105] S. Sachdev and R. Bhatt, phys. Rev. B **41**, 9323 (1990).
- [106] Magnetic Properties of Layered Transition Metal Compounds, edited by L. J. DeJongh (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht/Boston/London, 1990).
- [107] V. L. Berezinskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz.**59**, 907 (1970) [Sov.Phys. JETP 32, 493 (1971)]; J. M. Kosterlitz and D. J.Thouless, J. Phys. C**6**, 1181 (1973).
- [108] P. Minnhagen, Rev. Mod. Phys. **59**, 1001 (1987).
- [109] A. Cuccoliet al., Phys. Rev. B **67**, 104414 (2003).
- [110] N. Rogadoet al., Phys. Rev. B **65**, 144443 (2002).
- [111] W. Knafo et. al. Phys. Rev. Lett. **99** 137206 (2007).
- [112] M. Takahashi, Phys. Rev. Lett. **58** 168 (1987).
- [113] C. J. Hamer, O. Roges, and J.Oitmaa. Phys. Rev B. 81. 214424 (2010).