
**Estudo de Interações Competitivas e Anisotropia em
Sistemas Magnéticos**

Rodrigo Santos da Lapa

Estudo de Interações Competitivas e Anisotropia em Sistemas Magnéticos

Rodrigo Santos da Lapa

Orientador: Antonio Sérgio Teixeira Pires

Tese apresentada à Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para a obtenção do grau de **Doutor em Ciências – Física**.

Belo Horizonte
Julho de 2013

Aos meus familiares

Agradecimentos

Agradeço ao professor Antônio Sérgio pela dedicação como orientador no desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço ao Departamento de Física da UFMG.

Agradeço à minha esposa Paula pela ajuda e paciência no decorrer dos 4 anos de doutorado.

Agradeço à minha mãe pela dedicação e pelo esforço.

Agradeço aos meus irmãos pelo companheirismo, amizade e carinho.

Agradeço aos meus amigos que me impulsionaram nesta jornada.

Agradeço à CAPES, CNPQ e FAPEAM por financiarem este trabalho.

Agradeço imensamente a Deus.

Resumo

Estudamos o efeito de interações competitivas e anisotropias no modelo de Heisenberg em diferentes situações. Inicialmente, tratamos o modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin $S = 1$ com interações competitivas entre primeiros J_1 e segundos J_2 vizinhos (modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$) e anisotropia de plano fácil numa rede cúbica com interações J_3 entre planos. Utilizamos a aproximação harmônica auto-consistente para calcular a temperatura de transição da fase paramagnética para a fase ordenada a baixa temperatura. Também obtivemos, à temperatura nula, o valor crítico da anisotropia de plano fácil que separa a região para valores de D pequeno, da fase paramagnética quântica para valores de D grande. Encontramos uma fase desordenada a temperatura nula que pode ser uma possível candidata a fase líquido de spin. Em seguida, utilizamos a teoria dos bósons de Schwinger para estudar o efeito das interações competitivas J_1 e J_2 no modelo de Heisenberg ferrimagnético isotrópico de spins 1 e $1/2$ em uma e duas dimensões. Em uma dimensão, consideramos ainda o efeito de dimerização além das interações competitivas. Calculamos a magnetização das subredes, o *gap* do ramo antiferromagnético e a energia livre à temperatura nula. A ordem de longo alcance é encarada como uma consequência da condensação dos bósons Schwinger. Por último, estudamos o modelo de Heisenberg na rede quadrada com spin $S = 1$, considerando interações de segundos vizinhos. Utilizamos uma teoria generalizada dos bósons de Schwinger para analisar as propriedades da fase paramagnética à temperatura nula. Calculamos algumas quantidades como o fator de estrutura quadrupolar, que é característico de uma fase desordenada chamada fase nemática. Além disso calculamos também o *gap* e a energia livre.

Abstract

We studied the effect of competitive interactions and anisotropies in the Heisenberg model in different situations. Initially, we treat the antiferromagnetic Heisenberg model of spin $S = 1$ with competitive interactions between next J_1 and next-nearest J_2 neighbors (Heisenberg model $J_1 - J_2$) and easy plane anisotropy in a cubic lattice with interactions J_3 between adjacent planes. We use the self-consistent harmonic approximation to calculate the phase transition temperature from paramagnetic phase to the ordered phase at low temperature. We also obtained at zero temperature, the critical value of the easy plane anisotropy that separates the region of small D values, from the quantum paramagnetic phase for large D values. We found a disordered phase at zero temperature which may be a possible candidate to spin liquid phase. In the following work, we use the Schwinger bosons mean field theory to study the effect of competitive interactions J_1 and J_2 in the ferrimagnetic Heisenberg isotropic model of spins 1 and 1/2 in one and two dimensions. In one dimension, we have also considered the effect dimerization beyond competitive interactions. We compute sublattices magnetizations, the antiferromagnetic branch gap and free energy at zero temperature. The long-range order is seen as a consequence of Schwinger boson condensation. Finally, we study the Heisenberg model on the square lattice with spin $S = 1$, considering interactions of next-nearest neighbors. We use the generalized Schwinger bosons mean field theory to analyze the properties of the paramagnetic phase at zero temperature. We compute some quantities as the quadrupole structure factor, which is characteristic of a disordered phase called nematic phase. We calculated the gap and free energy of nematic phase.

Sumário

Agradecimentos	v
Resumo	vi
Abstract	vii
1 Introdução	1
1.1 Considerações Gerais	1
1.2 Anisotropias e Termos Adicionais	3
1.3 Magnetismo em baixa dimensionalidade	5
1.4 Sistemas Frustrados	7
Referências Bibliográficas	11
2 Modelo de Heisenberg Anisotrópico quase-bidimensional	13
2.1 Introdução	13
2.2 Aproximação Harmônica Auto-Consistente	14
2.3 Resultados	18
Referências Bibliográficas	33
3 Modelo de Heisenberg Ferrimagnético Isotrópico com Interações Competitivas	35
3.1 Introdução	35
3.2 Representação dos Bósons de Schwinger	37
3.3 Caso Unidimensional	38
3.4 Caso Bidimensional	43

3.5	Fator de Estrutura Dinâmico	46
3.6	Resultados	47
	Referências Bibliográficas	58
4	Modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$ bidimensional antiferromagnético com $S=1$ numa rede quadrada	60
4.1	Introdução	60
4.2	Formalismo dos bósons de Schwinger $SU(3)$	61
4.3	Resultados	68
	Referências Bibliográficas	73
5	Conclusões	75
A	Cálculo das magnetizações das sub-redes e Fator de estrutura	77
A.1	Cálculo do Fator de Estrutura	78
B	Cálculo do Operador de Quadrupolo e Fator de Estrutura	81
	Lista de Figuras	83

Capítulo 1

Introdução

1.1 Considerações Gerais

O estudo teórico sobre o magnetismo dos materiais começou no início do século XX e atingiu o ponto mais alto naquela época com a teoria fenomenológica de Pierre Weiss [1,2]. A idéia proposta por Weiss considerava que, o magnetismo era resultado da interação de cada momento magnético da rede cristalina com um campo efetivo produzido pelos demais momentos dos íons da rede. Qualitativamente, a teoria conseguiu prever a temperatura crítica de compostos ferromagnéticos que apresentam temperatura crítica T_c baixa, como por exemplo, $MnSb$, $CrTe$, CrO_2 , $CrMr_3$, EuO , EuS . Porém, para materiais com alta T_c , como Fe , Ni e Co , a teoria falha porque, de maneira geral, interações dipolares não são o mecanismo preponderante, apesar destas estarem sempre presentes. Sabe-se atualmente que as propriedades magnéticas estão associadas aos momentos magnéticos localizados nos íons e tem origem *i)* devido aos *spins* localizados (isolante) ou *ii)* devido aos *spins* dos elétrons em movimento na rede (metal). Nesta tese, os trabalhos desenvolvidos são restritos ao estudo dos modelos magnéticos localizados, como o modelo de Heisenberg descrito pelo hamiltoniano:

$$H = \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (1.1)$$

O modelo de Heisenberg [3,4] foi proposto para explicar o forte magne-

tismo do ponto de vista microscópico de alguns materiais, supondo que o alinhamento dos spins decorria da interação com seus vizinhos mais próximos. A interação eletrostática dos elétrons de camadas mais externas de íons adjacentes, tratada via teoria de perturbação, produz uma separação dos níveis de energia eletrônicos. Por exemplo, para dois elétrons interagentes [2] o princípio de exclusão de Pauli exige que as autofunções de onda total sejam anti-simétricas. Através de teoria de perturbação, os autovalores podem ser calculados e são dados por:

$$E_{\pm} = E_0 \pm J_{ij}, \quad (1.2)$$

sendo

$$J_{ij} = \int \int d\vec{r}_i d\vec{r}_j \phi_i^*(\vec{r}_j) \phi_j^*(\vec{r}_i) \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \phi_i(\vec{r}_j) \phi_j(\vec{r}_i), \quad (1.3)$$

onde E_0 é a auto-energia na ausência de perturbação coulombiana, $\phi_n(\vec{r}_i)$ é a autofunção da partícula $i = 1, 2$ no estado n do sistema não perturbado. A energia J_{ij} , que é chamada de interação de troca ou *exchange*, é a diferença entre a energia dos elétrons no estado tripleto ($S = 1$) e singleto ($S = 0$) [5–7]. Quando $J_{ij} < 0$, o estado de menor energia é o estado tripleto com a configuração de spins paralelos (ferromagnetismo fig. 1.1). Quando $J_{ij} > 0$, o estado de menor energia é o singleto com configuração dos spins antiparalelos (antiferromagnetismo fig. 1.2). A interação de troca J_{ij} decresce exponencialmente com a distância entre os íons, em contraste com a interação coulombiana que decresce com $\sim \frac{1}{r}$. Esta energia é a principal responsável pelo forte magnetismo da matéria e como comentamos acima, só pode ser explicada através da mecânica quântica (superposição das funções de onda) juntamente com o princípio de exclusão de Pauli. Portanto, apesar da teoria de Weiss levar em consideração aspectos microscópicos, ela não poderia explicar as características do magnetismo levando em consideração argumentos de natureza clássica.

O estudo teórico do magnetismo, em especial do modelo de Heisenberg, é de grande interesse em Física da matéria condensada desde muitas décadas atrás e continua sendo atualmente. Em alguns casos é impossível resolver o problema exatamente, portanto é necessária a utilização de aproximações que possam tornar o problema mais simples. Técnicas analíticas de campo

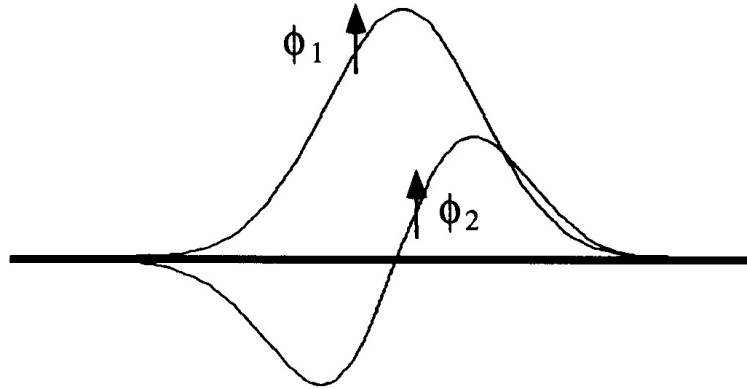


Figura 1.1: Estado de dois elétrons que acoplam ferromagneticamente. Figura obtida da referência [7]

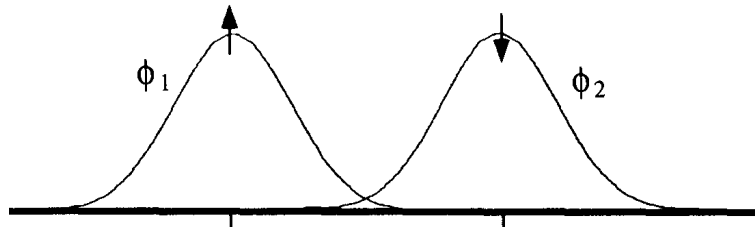


Figura 1.2: Estado de dois elétrons que acoplam antiferromagneticamente. Figura obtida da referência [7]

médio e numéricas foram desenvolvidas para estudar o modelo sob diversas situações. As técnicas analíticas de campo médio visam basicamente descrever o problema através de ondas de spin (conceito introduzido por Bloch [8]), enquanto que as técnicas numéricas visam obter as propriedades do modelo de N spins interagentes, através de uma pequena porção do sistema, seja por simulações ou diagonalizações numéricas, por exemplo.

1.2 Anisotropias e Termos Adicionais

O modelo de Heisenberg tem simetria rotacional, ou seja, a interação de troca é independente da orientação dos spins. A interação de troca, juntamente com o princípio de exclusão de Pauli, são os responsáveis pelo orde-

namento magnético na matéria, sendo de natureza isotrópica e incapaz de definir alguma orientação dos momentos magnéticos com respeito aos eixos cristalográficos, mas ela produz um ordenamento mútuo dos spins em vários sítios da rede. Porém, em alguns casos estas interações podem não ser espacialmente equivalentes, de maneira que podemos escrever o hamiltoniano em uma forma mais geral como:

$$H = \sum_{ij} J_{ij}^x S_i^x S_j^x + J_{ij}^y S_i^y S_j^y + J_{ij}^z S_i^z S_j^z. \quad (1.4)$$

Quando $J_{ij}^x = J_{ij}^y = J_{ij}^z$ temos o modelo isotrópico. Podemos ainda ter $J_{ij}^x = J_{ij}^y \neq J_{ij}^z$ que é mais conhecido como modelo XXZ. Neste caso, quando $J_{ij}^{x,y} \gg J_{ij}^z$, podemos omitir o último termo do hamiltoniano (1.4), que é mais conhecido como modelo XY ou planar [9]. No capítulo 2 desta tese, estudaremos o modelo XXZ em uma rede cúbica com interações entre planos adjacentes. Tomamos tanto o limite totalmente isotrópico, quanto o limite XY, para descrever as grandezas termodinâmicas.

Existe ainda o limite $J_{ij}^{x,y} \ll J_{ij}^z$, onde podemos omitir os dois primeiros termos do hamiltoniano (1.4). Este limite corresponde ao modelo de Ising e representa o modelo mais simples com solução exata em uma e duas dimensões sem campo externo [10].

Outra característica interessante nos sistemas magnéticos é a presença de anisotropias que são capazes de ordenar o sistema em alguma direção privilegiada, ou direção de fácil magnetização. Podemos dizer que no cristal existem campos magnéticos efetivos sobre os íons, que tendem a orientá-los numa direção privilegiada. Portanto, devemos ter algum tipo de interação que torne o hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico. Um tipo de anisotropia muito conhecida e que quebra a simetria rotacional do hamiltoniano de Heisenberg é a anisotropia de íon único. Sua origem microscópica está na influência do potencial elétrico da rede cristalina sobre o acoplamento spin-órbita, cujo termo é dado por:

$$\Delta E = \frac{1}{2m^2 c^2 r} \frac{dV(r)}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S}, \quad (1.5)$$

onde \vec{L} é o momento angular orbital, \vec{S} é o *spin* e $V(r)$ é a energia potencial de interação elétron-núcleo. Através de teoria de perturbação de 2ª ordem,

este acoplamento origina um termo adicional no hamiltoniano (1.4), do tipo:

$$H' = \sum_i^N D(S_i^z)^2, \quad (1.6)$$

onde D é a anisotropia de íon único oriundo da interação spin-órbita. Quando o parâmetro D for negativo, os spins tendem a alinhar-se na direção z , pois esta anisotropia induz tal orientação. Este tipo de anisotropia pode ainda favorecer alinhamentos nas direções x ou y , neste caso consideramos em z por questões de simplificação. Se o coeficiente for positivo, os spins tendem a alinhar-se no plano XY . Esta anisotropia só é relevante para casos onde $S > 1/2$.

Alguns outros termos (originários de interações coulombianas) podem ser deduzidos via teoria de perturbação de ordem superior, como por exemplo o termo de interação biquadrática dada por:

$$H_2 = - \sum_{\langle i,j \rangle} K \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right)^2, \quad (1.7)$$

ou ainda a interação de quatro spins

$$H_4 = - \sum_{\langle i,j,k,l \rangle} J_{ijkl} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right) \left(\vec{S}_k \cdot \vec{S}_l \right), \quad (1.8)$$

que podem ter alguma relevância física, dependendo da natureza do problema.

1.3 Magnetismo em baixa dimensionalidade

Inicialmente, vamos apresentar as principais motivações para estudarmos sistemas em baixa dimensão (uma dimensão 1D e duas dimensões 2D). Em geral, os materiais apresentam um aspecto físico tridimensional, no entanto, alguns deles têm acoplamentos muito mais intensos em uma ou duas dimensões espaciais que podem ser investigados diretamente por espalhamento de nêutrons. Há algumas décadas atrás, modelos com essas características eram de interesse apenas acadêmico [11], onde os teóricos foram atraídos pela possibilidade de obter resultados evitando casos complicados de modelos de dimensões maiores. Um bom exemplo que podemos citar é a solução

de Onsager do modelo de Ising bidimensional [12]. Com o crescente desenvolvimento de técnicas experimentais e síntese de materiais, estes sistemas deixaram de ser de interesse apenas teórico e passaram a ser alvo de intensas investigações experimentais (veja referência [13], onde existem comparações interessantes entre teoria e experimento).

Do ponto de vista teórico, ausência de ordem de longo alcance para sistemas com simetria contínua a temperaturas finitas em $d \leq 2$ é um resultado exato que deve ser reproduzido por técnicas aproximativas [14]. A temperatura nula, espera-se que o sistema tenha algum tipo de ordem, porém em alguns casos é possível ainda que mesmo o estado fundamental seja magneticamente desordenado [15]. Em física estatística, um estado ordenado é descrito por algum parâmetro de ordem que é uma quantidade cuja média é não nula e caracteriza a ordem. Nos sistemas de baixa dimensão, as flutuações quânticas são muito mais expressivas do que nos sistemas tridimensionais por exemplo. Portanto, estas flutuações tem caráter dominante na determinação do estado fundamental. Baixa dimensionalidade [16]($d=1,2$) aliada a anisotropias e interações competitivas, são mecanismos pelos quais estas flutuações podem ser controladas, tornando o estudo bastante motivante. Nos casos bidimensionais, as flutuações e interações podem estar melhor balanceadas, o que pode levar a transições de fase quânticas [17] com a variação destes parâmetros.

Uma característica bastante interessante nos sistemas unidimensionais é a existência ou não de *gap* (diferença de energia entre o estado fundamental, e o primeiro estado excitado) no espectro de excitações. O modelo de Heisenberg antiferromagnético unidimensional isotrópico com interações somente entre primeiros vizinhos no limite clássico, por exemplo, exhibe ordem de longo alcance que independe do valor do spin, e o seu estado fundamental não possui *gap*. Para o caso quântico existe uma diferença dependendo do valor do spin, por exemplo, a cadeia de Heisenberg antiferromagnética de spin $1/2$ que foi estudada por Bethe [18] e Hulthen [19] empregando o método chamado de *ansatz* de Bethe, exhibe correlações de quase-longo alcance antiferromagnéticas, o que significa que a função correlação decai algebricamente para grandes distâncias na rede, sem *gap* no espectro de excitação. Então podemos dizer que comparado ao caso clássico, o sistema permanece sem

gap, porém as flutuações quânticas destroem a ordem de longo alcance. Este resultado foi provado através de um rigoroso teorema estabelecido por Lieb, Schultz e Mattis [20], que cadeias de spin $1/2$ não possuem *gap*. O teorema foi mais tarde generalizado, e abrange todas as cadeias de spin semi-inteiro [21]. Quando se trata de cadeias de spin inteiro, a conjectura de Haldane [9] estabelece que as correlações de dois pontos tem decaimento exponencial (fase Haldane), que implica em um *gap* nas excitações. A existência deste *gap* é um fenômeno puramente quântico, sem analogia clássica. Em contraste com o caso clássico novamente, o comportamento físico das cadeias de spin variam com o valor do spin. O modelo de Heisenberg antiferromagnético isotrópico unidimensional de spin 1 é o exemplo mais simples de um sistema com fase de Haldane. Entre os vários compostos magnéticos usados para comprovar o *gap* de Haldane, podemos citar o $CsNiCl_3$ [23,24] e o Y_2BaNiO_5 [25].

Do ponto de vista teórico, as possibilidades de estudar modelos em baixa dimensão são bem amplas. Atualmente existem diversas metodologias analíticas e numéricas que podem ser empregadas com sucesso, como o caso da diagonalização exata e Monte Carlo quântico, ou ainda ondas de spin padrão e a teoria de campo médio dos bósons de Schwinger. Esta última foi empregada na maioria dos nossos trabalhos que compõem esta tese, como será visto nos capítulos seguintes.

1.4 Sistemas Frustrados

O termo frustração foi introduzido por Toulouse [26] para descrever basicamente a impossibilidade de que todas as interações entre pares de spin sejam satisfeitas simultaneamente. Para entender melhor, tomamos uma célula unitária de uma rede quadrada com spins localizados nos vértices de um quadrado interagindo antiferromagneticamente entre primeiros e segundos vizinhos como na figura 1.3, e um sistema de spin de tipo Ising numa rede triangular interagindo antiferromagneticamente representado pela figura 1.4. No caso da rede triangular a frustração é resultado da topologia da rede, enquanto que no primeiro a frustração é resultado da competição das interações de primeiros e segundos vizinhos. Porém, em ambos os casos, observamos que nem todas as interações podem ser satisfeitas.

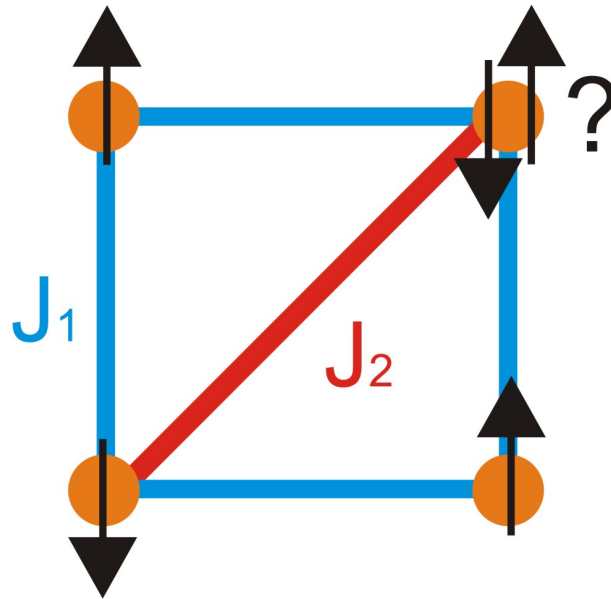


Figura 1.3: Spins interagindo antiferromagneticamente entre primeiros ($J_1 > 0$) e segundos ($J_2 > 0$) vizinhos.

No caso da rede quadrada, quando as interações entre segundos vizinhos J_2 não são desprezíveis em relação a J_1 , notamos que há um conflito nas interações entre primeiros e segundos vizinhos, o que pode levar à frustração. O modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$ na rede quadrada foi extensamente estudado [28].

$$H = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (1.9)$$

Classicamente, o estado fundamental é ordenado quando $J_2/J_1 < 0.5$, que corresponde ao estado de Néel com os spins alinhados antiparalelamente nos vértices do quadrado [29]. Quando $J_2/J_1 > 0.5$, o estado fundamental é um estado colinear de spins que pode apresentar duas configurações com vetores $\vec{q} = (\pi, 0)$ ou $\vec{q} = (0, \pi)$, que correspondem a linhas ou colunas ferromagnéticas interagindo antiferromagneticamente umas com as outras. Quando $J_2/J_1 = 0.5$, o estado fundamental clássico é altamente degenerado.

Para o caso quântico na rede quadrada do modelo de Heisenberg, técnicas como Monte Carlo quântico, diagonalização exata e bósons de Schwinger indicam a ausência de ordem do tipo Néel na região $0.4 \leq J_2/J_1 \leq 0.6$. Modelos deste tipo fornecem um ponto de partida muito interessante para

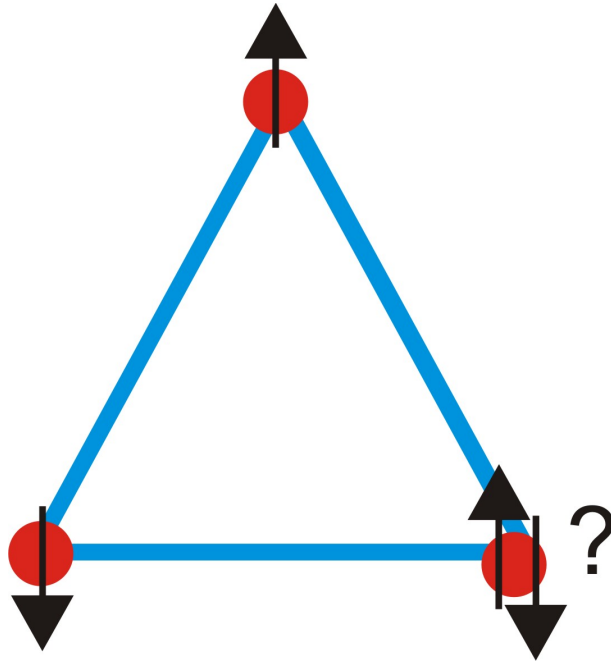


Figura 1.4: Spins do tipo Ising interagindo antiferromagneticamente $J > 0$.

trabalhos teóricos, no entanto, algumas dificuldades para realizar experimentos com estas interações forte o suficientes podem surgir. É neste ponto que os sistemas geometricamente frustrados ganham bastante interesse, pois são sistemas em que a estrutura pode desestabilizar a ordem somente com interações de primeiros vizinhos.

Em sistemas do tipo Heisenberg, a competição de interações juntamente com as flutuações quânticas podem suprimir ordem de longo alcance mesmo em $T = 0$. Estes fatores podem levar de uma variedade de fases quânticas, algumas vezes chamadas de líquidos de spin. Na referência [29] podemos encontrar uma definição básica de um líquido de spin.

Definição: Um líquido de spin quântico é um estado em que as correlações spin-spin $\langle S_i^\alpha S_j^\beta \rangle$, decaem a zero a grandes distâncias $|\vec{r}_i - \vec{r}_j| \rightarrow \infty$. É um estado quântico com excitações fracionárias sem qualquer quebra espontânea de simetria.

Existem diversos materiais atualmente que podem ser candidatos a um líquido de spin (veja a tabela 1 da referência [30]). As propriedades de um líquido de spin são diferentes das bem conhecidas antiferro, ferro e para-

magnetismo, como por exemplo a susceptibilidade que tem um valor nulo no limite $T \rightarrow 0$ [31]. Diferente dos casos conhecidos, este é um efeito puramente quântico. No capítulo 2 nós investigamos o papel das interações competitivas no surgimento de um possível estado líquido de spin que separa duas fases magneticamente ordenadas.

Este trabalho é dividido da seguinte maneira: No capítulo 2 estudaremos o modelo de Heisenberg quase-bidimensional com interações de primeiros e segundos vizinhos. Como o nosso hamiltoniano apresenta uma anisotropia do tipo XY e íon único, utilizaremos a aproximação harmônica auto-consistente, que é uma boa metodologia para esse tipo de modelo, e é capaz de prever a transição de Kosterlitz-Thouless (KT). No capítulo 3 estudaremos o modelo de Heisenberg ferrimagnético anisotrópico em uma e duas dimensões. Investigaremos a influência das interações competitivas no estado fundamental. No capítulo 4 estudaremos a fase desordenada do modelo de Heisenberg anisotrópico com interações competitivas na rede quadrada, onde investigaremos a fase nemática de spin. No capítulo 5 apresentaremos as nossas conclusões.

Como forma de simplificar os cálculos, vamos considerar um sistema de unidades onde $\hbar = 1$ e $k_B = 1$, onde \hbar é a constante de Planck e k_B e constante de Boltzmann.

Referências Bibliográficas

- [1] **J. Weiss** *J. de Physique* **6**, 667 (1907).
 - [2] **D. C. Mattis** *The Theory of Magnetism I* Spring-Verlach (1981).
 - [3] **W. K. Heisenberg** *Z. Phys.* **49**, 619 (1928).
 - [4] **P. A. M. Dirac** *The Principles of Quantum Mechanics* Clarendon Press, Oxford (1958).
 - [5] **Y. Frenkel** *Z. Phys.* **49**, 619 (1928).
 - [6] **Y. Dorfman** *Nature* **119**, 353 (1928).
 - [7] **A. Auerbach** *Interacting Electrons and Quantum Magnetism* Spring-Verlach, New York Inc. (1994).
 - [8] **F. Bloch** *Z. Phys.* **61**, 206 (1930).
 - [9] **T. Matsubada, H. Matsuda** *Prog. Theor. Phys.* **16**, 416 (1956).
 - [10] **R. J. Baxter** *Exactly solved models in statistical mechanics* Academic Press, New York (1982).
 - [11] **U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, R. F. Bishop** *Quantum Magnetism - Lectures Notes in Physics* Springer-Verlag (2004).
 - [12] **L. Onsager** *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
 - [13] **W. P. Wolf** *Braz. J. Phys.* **30**, 794 (2000).
 - [14] **N. D. Mermin and H. Wagner** *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
-

-
- [15] **P. Fazekas and P. W. Anderson** *Philos. Mag.* **30**, 23 (1974).
- [16] **A. A. Katanin, V. Yu Irkhin** *Physics-Uspokhi* **50 (6)**, 613 (2007).
- [17] **Subir Sachdev** *Quantum Phase Transitions* Cambridge University Press (2011).
- [18] **H. Bethe** *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
- [19] **L. Hulthén** *Ark. Mat. Astronom. Fysik* **26**, 11 (1938).
- [20] **E. Lieb, T. Schultz, D. C. Mattis** *Ann. Phys.* **16**, 407 (1961).
- [21] **I. Affleck and E. Lieb** *H. Lett. Math. Phys.* **12**, 57 (1986).
- [22] **F. D. M. Haldane** *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1153 (1983).
- [23] **W. J. L. Buyers, R. M. Morra, R. L. Armstrong, M. J. Hogan, P. Gerlach and K. Hirakawa** *Phys. Rev. Lett.* **56**, 371 (1986).
- [24] **M. Steiner, K. Kakurai, J. K. Kjems, D. Petigrand and R. Pynn** *J. Applied Phys.* **61**, 3953 (1987).
- [25] **T. Sakaguchi, K. Kakurai, T. Yokoo and J. Akimitsu** *J. Phys. Soc. Jpn* **65**, 3025 (1996).
- [26] **G. Toulouse** *Commun. Phys.* **2**, 115 (1977).
- [27] **J. Villain** *J. Phys. C* **10**, 1717 (1977).
- [28] **P. Chandra, B. Doucote** *Phys. Rev. B* **38**, 9335 (1988).
- [29] **C. Lacroix, P. Mendels, F. Mila** *Introduction to Frustrated Magnetism* Springer Series in Solid State Sciences, New York (2011).
- [30] **Leon Balents** *Nature* **464**, 199 (2010).
- [31] **F. Mila** *Eur. J. Phys.* **21**, 499 (2000).
-

Capítulo 2

Modelo de Heisenberg Anisotrópico quase-bidimensional

2.1 Introdução

Neste capítulo apresentaremos os principais resultados obtidos no estudo do modelo de Heisenberg anisotrópico quase-bidimensional de spin $S = 1$, que é descrito pelo seguinte hamiltoniano:

$$\begin{aligned}
 H = & \frac{J_1}{2} \sum_{r,a} (S_r^x S_{r+a}^x + S_r^y S_{r+a}^y + \lambda S_r^z S_{r+a}^z) + D \sum_r (S_r^z)^2 \quad (2.1) \\
 & + \frac{J_2}{2} \sum_{r,d} (S_r^x S_{r+d}^x + S_r^y S_{r+d}^y + \lambda S_r^z S_{r+d}^z) \\
 & + \frac{J_3}{2} \sum_{r,\delta} (S_r^x S_{r+\delta}^x + S_r^y S_{r+\delta}^y + \lambda S_r^z S_{r+\delta}^z),
 \end{aligned}$$

onde J_1 (J_2) é a interação entre primeiros (segundos) vizinhos numa rede quadrada que é acoplada pela interação inter-plano J_3 , λ é a anisotropia de exchange e D é a anisotropia de plano fácil. Neste trabalho nós consideramos apenas dois valores para a anisotropia de exchange $\lambda = 0$ e $\lambda = 1$. O objetivo principal do nosso estudo é encontrar fases que não possuem ordem magnética, e que, portanto, são candidatas a fase líquido de spin. Antes, vamos fazer uma breve discussão a respeito do modelo e alguns limites que tornam o hamiltoniano bem conhecido.

Quando $J_3 = J_2 = 0$, $\lambda = 0$ e $D = 0$ temos o modelo XY bidimensional numa rede quadrada com spin $S = 1$. Este modelo foi extensamente explorado e hoje existe um consenso a respeito de suas propriedades. Como se sabe, o modelo exibe uma transição de fase a uma temperatura finita T_{BKT} chamada de temperatura de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless [1,2]. Esta transição está associada com o surgimento de um ordem topológica, resultante da formação de pares de vórtices e anti-vórtices [3].

Quando consideramos $J_3 \neq 0$ e $J_2 = 0$ o modelo é conhecido como quase-bidimensional, pois agora os spins dos sítios nos planos adjacentes interagem. O composto $BaNi_2V_2O_3$ é considerado o melhor protótipo de um modelo XY quase bidimensional de spin 1. Como consequência dessa interação interplano o composto sofre uma transição de fase do tipo ordem-desordem em $T_N = 47.4K$, com os spins alinhados no plano XY [4]. Mesmo para um pequeno valor de J_3 , o caráter da transição BKT é modificado para uma transição do tipo ordem-desordem.

O estado fundamental clássico quando consideramos interações de segundos vizinhos $J_2/J_1 < 0.5$, $J_3 = 0$, $\lambda = 1$ e $D = 0$ tem ordem Néel. Por outro lado, quando $J_2/J_1 > 0.5$ o estado fundamental tem ordem colinear. O estado fundamental clássico não depende da orientação relativa de ambas as subredes. No entanto, flutuações quânticas removem a degenerescência e um estado colinear onde os spins alinham ferromagneticamente ao longo de um eixo da rede quadrada e antiferromagneticamente ao longo de outro é selecionado [5,6].

Os termos adicionais, como por exemplo, a anisotropia de íon único, são possíveis quando $S > 1/2$ e pode levar a novas características físicas, tais como uma transição de fase quântica para uma fase com valores de D grande. O Estudo destes modelos não são apenas de interesse acadêmico já que materiais com $S = 1$ e anisotropia de íon único foram sintetizados recentemente [7].

2.2 Aproximação Harmônica Auto-Consistente

Nesta seção vamos estudar o modelo de Heisenberg antiferromagnético quase-bidimensional dado pela equação (2.1) via aproximação harmônica

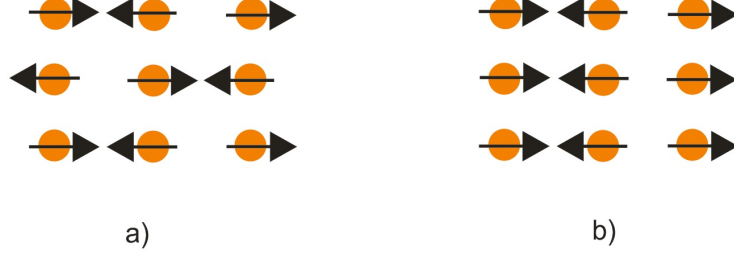


Figura 2.1: a) Estado fundamental Antiferromagnético b) Estado fundamental Colinear (colunas).

auto-consistente. Como é conhecido, uma transição do tipo Kosterlitz-Thouless (KT) ocorre para o modelo do tipo XY quando $J_2 = J_3 = 0$. Portanto é interessante estudar a transição KT para o modelo XY com interações competitivas. As flutuações quânticas mudam o comportamento quantitativo do modelo, mas o perfil qualitativo do sistema clássico permanece.

Para um Hamiltoniano do tipo XY uma teoria muito conveniente é a aproximação harmônica auto-consistente, que substitui o hamiltoniano por outro efetivo com parâmetros dependentes da temperatura renormalizados [8–12]. Apesar de ser uma teoria semiclássica, ela tem a vantagem de ser uma teoria de onda de spin que fornece a transição KT. Escrevemos primeiro as componentes do spin do Hamiltoniano em termos da representação de Villain [13], dada por

$$\begin{aligned} S_r^+ &= e^{i\varphi_r} \sqrt{(S + 1/2)^2 - (S_r^z + 1/2)^2}, \\ S_r^- &= \sqrt{(S + 1/2)^2 - (S_r^z + 1/2)^2} e^{-i\varphi_r}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

onde φ_r é o operador correspondente ao ângulo azimutal do spin em torno do eixo z . Substituindo a representação (2.2) em (2.1), com a condição $\varphi = \phi + \pi$ para os termos de primeiros vizinhos (ordem antiferromagnética), e expandindo em termos de $(S_r^z)^2$ e $(\phi_r - \phi_{r+a})^2$, a parte de primeiros vizinhos e anisotropia D fica

$$H_1 = \frac{J_1}{2} \sum_{r,a} \left[\rho_1 \tilde{S}^2 (\phi_r^2 - \phi_r \phi_{r+a}) + (S_r^z)^2 + \lambda S_r^z S_{r+a}^z \right] + D \sum_r (S_r^z)^2, \quad (2.3)$$

onde $\tilde{S}^2 = S(S+1)$ e ρ_1 para primeiros vizinhos é dado por [1]

$$\rho_1 = \left\langle \left[1 - \left(\frac{S_r^z}{\tilde{S}} \right)^2 \right] \right\rangle \langle \cos(\phi_r - \phi_{r+a}) \rangle. \quad (2.4)$$

A quantidade acima é chamada de rigidez (*stiffness*) e está relacionada com a ordem do sistema. A rigidez tem valor finito não-nulo na região ordenada, e vai caindo a zero a medida que o sistema se aproxima da região desordenada. Tomando a transformada de Fourier da expressão acima nós obtemos

$$H_1 = 2J_1 \sum_q \left[\rho_1 \tilde{S}^2 (1 - \gamma_q) \phi_q \phi_{-q} + (1 + d + \lambda \gamma_q) S_q^z S_{-q}^z \right] \quad (2.5)$$

onde $\gamma_q = \frac{1}{2}(\cos q_x + \cos q_y)$ e $\tilde{D} = D/2J_1$.

O mesmo procedimento é usado para a parte de segundos vizinhos e acoplamento entre planos, lembrando que para os termos de segundos vizinhos, na fase Néel, os spins estão na mesma direção e portanto $\varphi = \phi$. Após um processo algébrico, obtemos um hamiltoniano efetivo para a fase Néel escrito como:

$$H = \sum_q [a(q) \phi_q \phi_{-q} + b(q) S_q^z S_{-q}^z], \quad (2.6)$$

sendo

$$a(q) = 2 \left[\rho_1 (1 - \gamma_q) - \eta \rho_2 (1 - \zeta_q) + \frac{\alpha \rho_3}{2} (1 - \cos q_z) \right] \tilde{S}^2 \quad (2.7)$$

$$b(q) = 2 \left[1 + \tilde{D} - \eta + \frac{\alpha}{2} + \lambda (\gamma_q + \eta \zeta_q + \frac{\alpha}{2} \cos q_z) \right]. \quad (2.8)$$

Os ρ 's renormalizados são dadas por

$$\rho_i = \left\langle \left[1 - \left(\frac{S_r^z}{\tilde{S}} \right)^2 \right] \right\rangle \exp \left[- \sum_q g_i(q) \langle \phi_q \phi_{-q} \rangle \right] \quad (2.9)$$

sendo

$$g_1 = (1 - \gamma_q) \quad , \quad g_2 = (1 - \zeta_q) \quad , \quad g_3 = (1 - \cos q_z) \quad (2.10)$$

$$\zeta_q = \cos q_x \cos q_y \quad , \quad \eta = J_2/J_1 \quad , \quad \alpha = J_3/J_1. \quad (2.11)$$

Introduzindo a transformação canônica

$$\phi_q = \left(\frac{b(q)}{a(q)} \right)^{1/4} (a_q^\dagger + a_{-q}), \quad S_q^z = i \left(\frac{a(q)}{b(q)} \right)^{1/4} (a_q^\dagger - a_{-q}) \quad (2.12)$$

onde a_q^\dagger e a_q são operadores bosônicos de criação e aniquilação, respectivamente. Com isso podemos reescrever o hamiltoniano na forma

$$H = \sum_q \omega_q (a_q^\dagger a_q + 1/2), \quad (2.13)$$

sendo a relação de dispersão ω_q dada por

$$\omega_q = 2\sqrt{a(q)b(q)} \quad (2.14)$$

Usando a equação (2.12), podemos calcular os termos dados abaixo.

$$\langle (S_r^z)^2 \rangle = \frac{1}{2\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\pi \int_0^\pi d^3q \sqrt{\frac{a(q)}{b(q)}} \coth\left(\frac{\beta\omega_q}{2}\right) \quad (2.15)$$

$$\langle \phi_q \phi_{-q} \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{b(q)}{a(q)}} \coth\left(\frac{\beta\omega_q}{2}\right) \quad (2.16)$$

onde $\beta = 1/k_B T$ e simplificamos adotando $k_B = 1$.

Para a fase colinear, seguimos os mesmos procedimentos que fizemos para o caso Néel. Considerando agora que os primeiros vizinhos têm a mesma orientação na direção y enquanto que na direção x acrescentamos π em φ (veja figura 2.1 (b)). Portanto as formas de $a(q)$ e $b(q)$ também são alteradas sendo escritos como:

$$a(\vec{q}) = J_1 \tilde{\rho}_1 (\cos q_y - \cos q_x) + 2\eta \tilde{\rho}_2 (1 - \cos q_x \cos q_y) + \alpha \tilde{\rho}_z (1 - \cos q_z) \quad (2.17)$$

$$b(\vec{q}) = \lambda (\cos q_y + \cos q_x) + \tilde{D} + 2\eta (1 + \lambda \cos q_x \cos q_y) + \alpha (1 + \lambda \cos q_z), \quad (2.18)$$

com os $\tilde{\rho}_i$ s tendo a mesma forma anteriormente pois só dependem do tipo de rede. A temperatura crítica T_c e o valor crítico de D podem ser calculados quando ρ vai a zero. Reforçamos a idéia de que para $\alpha = 0$, T_c corresponde a temperatura de transição de Kosterlitz-Thouless.

A principal motivação para este trabalho é estudar as propriedades críticas do Hamiltoniano (2.1), mas também calcularmos algumas propriedades termodinâmicas como energia interna, calor específico, entropia e energia livre. Na aproximação harmônica auto-consistente podemos realizar os cálculos somente abaixo das temperaturas críticas. Os cálculos foram feitos usando as expressões abaixo.

$$U = \frac{1}{(2\pi)^d} \int n_k \omega_k d^d k \quad \text{Energia Interna} \quad (2.19)$$

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} \quad \text{Calor específico} \quad (2.20)$$

$$S = -\frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d k [n_k \ln n_k - (1 + n_k) \ln (1 + n_k)] \quad \text{Entropia} \quad (2.21)$$

$$F = T \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \ln \left(1 - e^{-\frac{\omega_k}{T}} \right) \quad \text{Energia Livre} \quad (2.22)$$

onde d é a dimensão e $n_k = 1/[\exp(\omega_k/T) - 1]$. Lembrando que nessas equações, ω_k é dependente da temperatura.

2.3 Resultados

Na figura 2.2 nós mostramos o comportamento do parâmetro crítico D_c/J_1 , que separa as fases AF e CAF da paramagnética quântica, como função de η para $T = 0$, $\lambda = 0$ e $\alpha = 0$ (modelo XY 2d). O parâmetro D_c se anula nos pontos $\eta_{1c} = 0.49$ e $\eta_{2c} = 0.52$, a descontinuidade da curva é um artefato da aproximação harmônica auto-consistente. Existem duas fases ordenadas (AF e CAF) separadas por uma fase desordenada. Estes valores são diferentes para aqueles calculados para o modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin $S = 1/2$ [6]. No nosso caso, a fase desordenada é muito estreita. Na

figura 2.3 apresentamos os mesmos resultados, considerando agora $\lambda = 1$ (modelo de Heisenberg 2d) obtendo $\eta_{1c} = 0.49$ e $\eta_{2c} = 0.51$, com a fase paramagnética um pouco menor em relação ao caso anterior. Encontramos $D_c/J_1 = 7.32$ no limite $\eta = 0$ que está em bom acordo com o resultado 6.38 obtido por *Wong et. al* [14] usando o método de expansão do cluster acoplado. Quando aumentamos α , a região da fase desordenada diminui e desaparece quando $\alpha = 1$. Este resultado é esperado uma vez que os efeitos das flutuações quânticas são menores em três dimensões. Na figura 2.4 apresentamos, a fim de certificação da ausência do estado desordenado intermediário, o comportamento de D_c/J_1 versus η para o modelo XY 3d ($\alpha = 1$ e $\lambda = 0$), onde é verificado que D_c/J_1 é maior do que o valor em duas dimensões ($\alpha = 0$).

Na figura 2.5 mostramos o comportamento da temperatura crítica T_c como função do parâmetro de frustração η para o modelo XY antiferromagnético 2d ($\alpha = \lambda = 0$) para dois valores diferentes da anisotropia $D/J_1 = 5$ e 6. O valor de T_c não está associado a uma transição entre ordem e desordem agnética, e sim corresponde ao valor da temperatura de Kosterlitz-Thouless (T_{KT}) na quebra de ordem topológica da estrutura bidimensional dos vórtices na rede quadrada. Para um dado valor de D/J_1 fixo, temos que T_c decresce monotonicamente, na fase AF, com aumento da frustração (medida pelo parâmetro η) de modo que existe uma fase desordenada para certa região do parâmetro η . Acima de um valor crítico $\eta_c(D)$ e em baixas temperaturas $T < T_c$ temos um ordenamento colinear (CAF), no qual a medida que η cresce a temperatura crítica cresce monotonicamente apresentando um aumento do ordenamento CAF ("vórtices"). No limite $\eta \gg 1$ podemos interpretar como sendo uma rede quadrada com interação J_2 rotacionada de um ângulo de $\pi/4$, uma vez que a interação de primeiros vizinhos J_1 é desprezível em relação a J_2 . Assim sendo, o valor encontrado para T_c quando $\eta = 0$, $T_c(0, D)$, corresponderá no limite $\eta \gg 1$ um comportamento linear para a temperatura crítica do tipo $T_c(\eta, D) = T_c(0, D)\eta$. A ação da anisotropia D é diminuir os ordenamentos AF e CAF, desta maneira $T_c(\eta, D)$ diminui, e a região do estado desordenado em $T = 0$ aumenta gradualmente, onde na figura 2.2 temos a análise do estado fundamental no plano $D - \eta$.

Na figura 2.6 mostramos o comportamento da temperatura crítica T_c

como função de D para o modelo XY antiferromagnético 2d ($\alpha = \lambda = 0$) para três valores de η na fase AF. Observamos que o aumento da anisotropia D cresce inicialmente o valor de T_c , atingindo um ponto máximo, e finalmente decrescendo monotonicamente até atingir o valor crítico $D_c(\eta)$, conforme mostra a curva na figura 2.2. Este comportamento anômalo de T_c , existencia de um ponto máximo, foi observado também no modelo de Heisenberg AF ($\eta = 0$). Na figura 2.7 mostramos o comportamento da temperatura crítica T_c como função de D/J_1 na fase Néel para o modelo XY 3d com dois valores de α e $\eta = 0.4$. Lembramos que o máximo da curva para valores pequenos da temperatura, já foi observado em outros cálculos [15,16]. No caso clássico quando D/J_1 aumenta, as flutuações fora do plano XY são suprimidas, e no limite $D/J_1 \rightarrow \infty$ temos o modelo conhecido como rotor com uma temperatura T_{KT} relativamente maior que o valor correto. No caso quântico, um valor de D/J_1 grande leva a flutuações quânticas fora do plano XY e um decréscimo da temperatura T_{KT} .

Na figura 2.8 nós mostramos T_c como função de η , para $\alpha = 0$, $\lambda = 1$ e 2 valores de D . Como esperado, a região da fase paramagnética aumenta com D . Nas figuras 2.9 e 2.10 mostramos a energia interna como uma função da temperatura para $\alpha = 0$, $\lambda = 1$ e $\lambda = 0$ respectivamente e $D/J_1 = 6$. Nas figuras 2.11 e 2.12 nós mostramos o calor específico com função da temperatura para $\alpha = 0$, $\lambda = 1$ e $\lambda = 0$ respectivamente e $D/J_1 = 6$. Nas figuras 2.13 e 2.14 mostramos a entropia como função da temperatura para $\alpha = 0$, $\lambda = 1$ e $\lambda = 0$ respectivamente e $D/J_1 = 6$. Como esperado a entropia cresce com o aumento da temperatura à medida que se aproxima da fase desordenada. E nas figuras 2.15 e 2.16 mostramos a energia livre como função da temperatura para $\alpha = 0$, $\lambda = 1$ e $\lambda = 0$ respectivamente e $D/J_1 = 6$. Como esperado também, a energia livre decresce com o aumento da temperatura.

Para o modelo clássico XY $J_1 - J_2$ bidimensional, foi mostrado [17] que a transição da fase colinear para a paramagnética é da mesma classe de universalidade que o modelo XY. A aproximação harmônica auto-consistente não distingue entre este tipo de transição de uma transição KT pura.

Sem frustração, a ordem magnética para $\alpha = 1$ aparece abaixo de uma escala de temperatura Θ_{CW} definida pela intensidade da interação J_1 . Em

contraste, em sistemas geometricamente frustrados, nada de concreto é observado nessa região: em vez disso, a fase paramagnética se estende a temperaturas $T \ll \Theta_{CW}$. Ordem pode aparecer a baixas temperaturas T_c , mas um valor grande para a razão Θ_{CW}/T_c é uma assinatura da frustração [6].

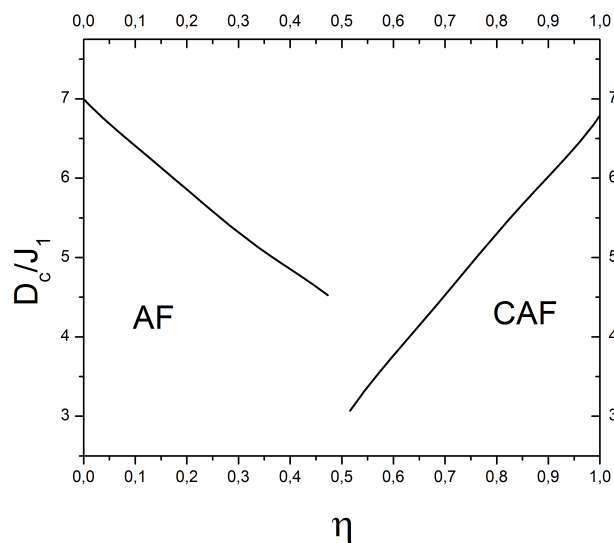


Figura 2.2: Comportamento do parâmetro crítico D_c como função de η para o modelo XY com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = \alpha = 0$) obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.

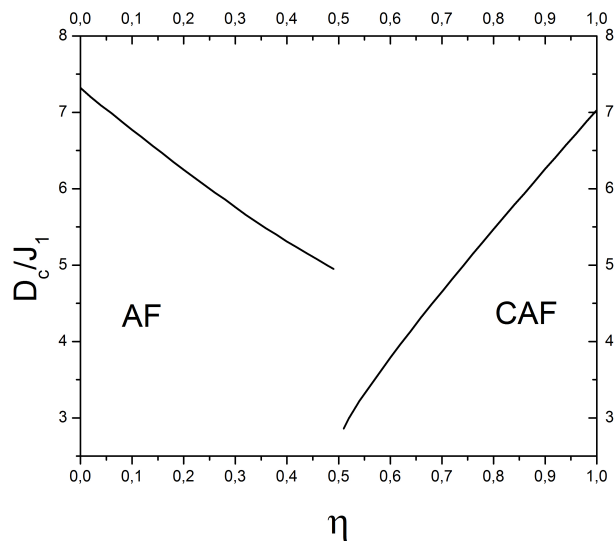


Figura 2.3: Comportamento do parâmetro crítico D_c como função de η para o modelo de Heisenberg antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = 1$, $\alpha = 0$) obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.

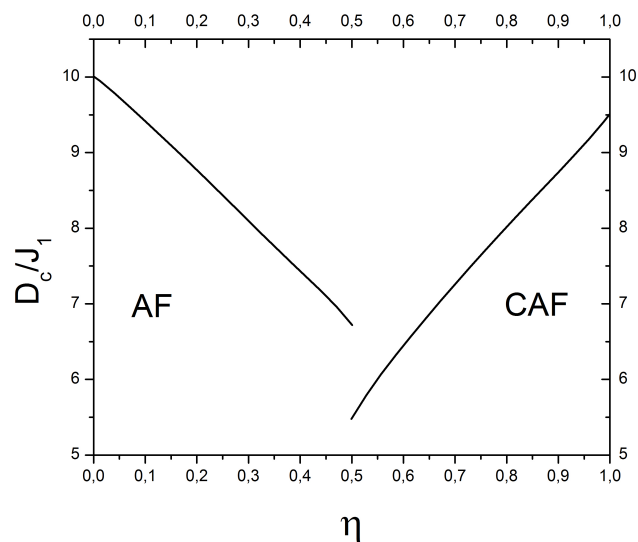


Figura 2.4: Comportamento do parâmetro crítico D_c como função de η para o modelo XY antiferromagnético com spin-1 numa rede cúbica simples ($\lambda = 0$, $\alpha = 1$) obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.

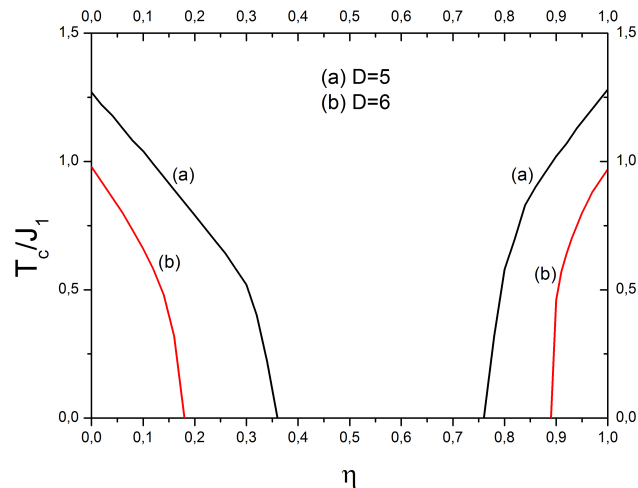


Figura 2.5: Comportamento da temperatura crítica como função de η para o modelo XY antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = \alpha = 0$) obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.

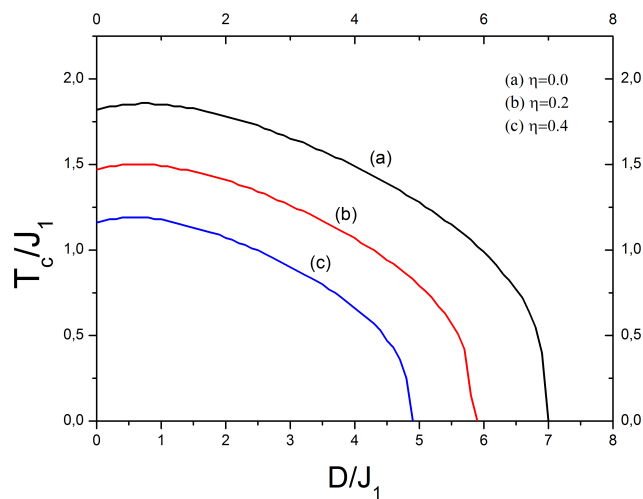


Figura 2.6: Comportamento da temperatura crítica com função de D para o modelo XY antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = \alpha = 0$) obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.

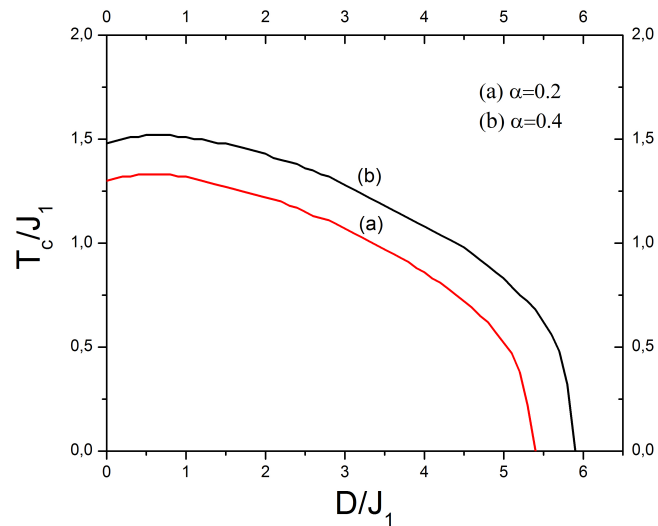


Figura 2.7: Comportamento da temperatura crítica como função de D para o modelo XY antiferromagnético com spin-1 ($\lambda = 0$, $\eta = 0.4$) obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.

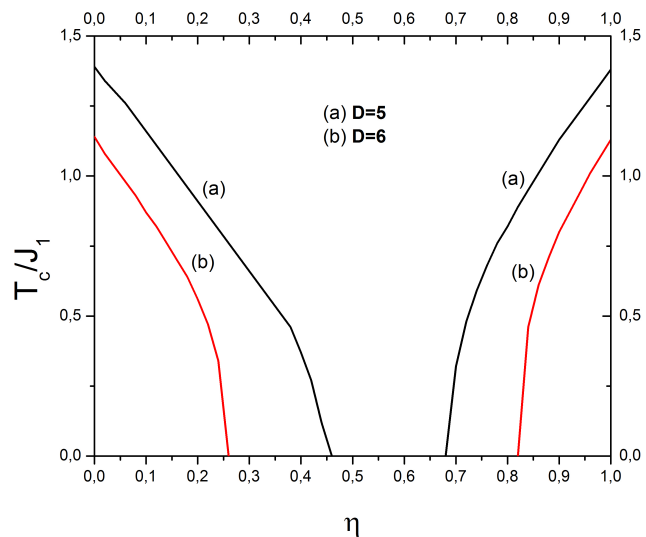


Figura 2.8: Comportamento da temperatura crítica como função de η para o modelo de Heisenberg antiferromagnético com spin-1 na rede quadrada ($\lambda = 1$, $\alpha = 0$) obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.

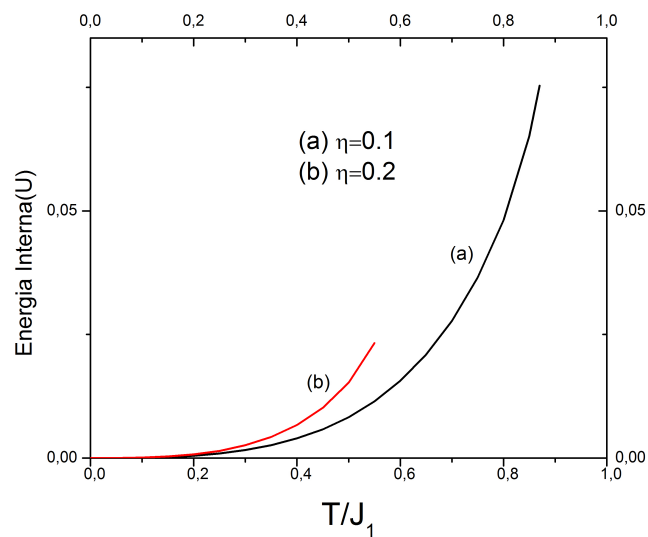


Figura 2.9: Comportamento da energia interna por spin em função da temperatura para o modelo de Heisenberg antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = 1$, $\alpha = 0$) para $D/J_1 = 6$ obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.

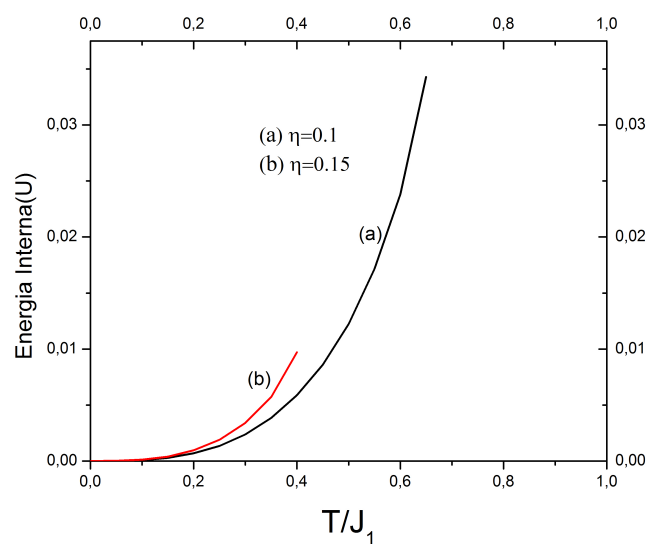


Figura 2.10: Comportamento da energia interna por spin em função da temperatura para o modelo XY antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = \alpha = 0$) para $D/J_1 = 6$ obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.

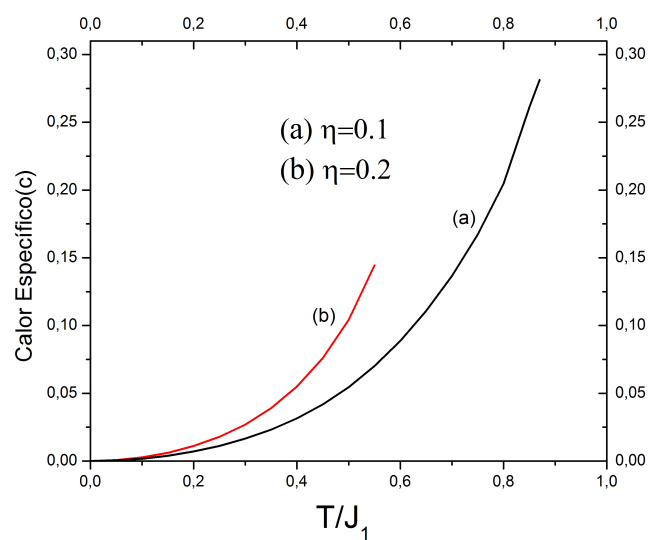


Figura 2.11: Comportamento do calor específico em função da temperatura para o modelo de Heisenberg antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = 1$, $\alpha = 0$) para $D/J_1 = 6$ obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.

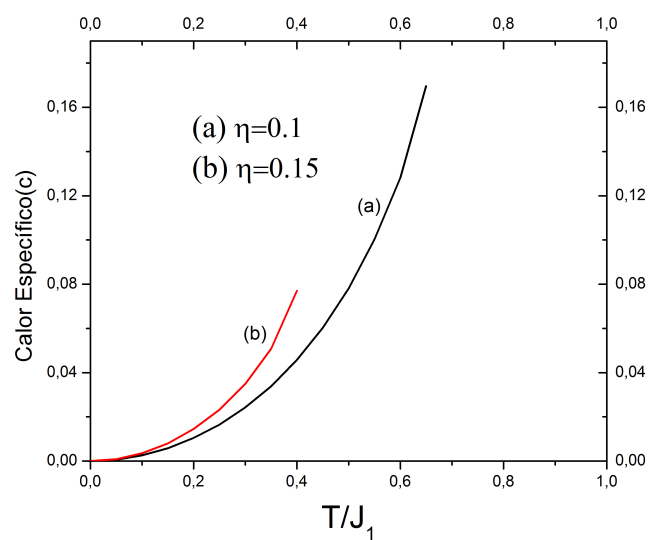


Figura 2.12: Comportamento do calor específico em função da temperatura para o modelo XY antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = \alpha = 0$) para $D/J_1 = 6$ obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.

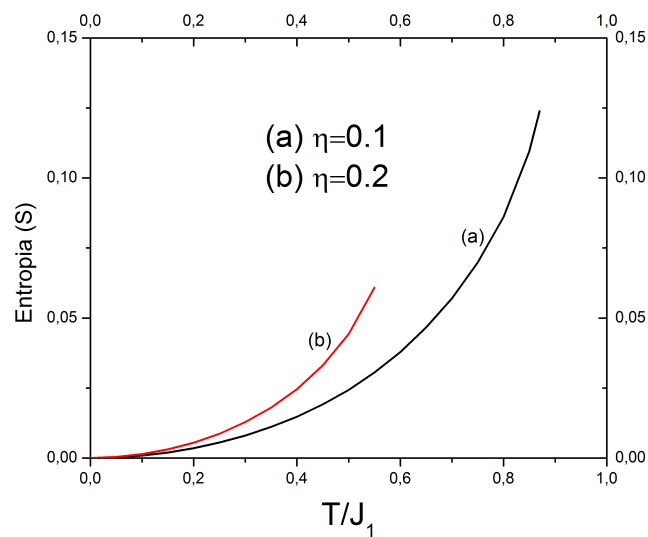


Figura 2.13: Comportamento da entropia por spin em função da temperatura para o modelo de Heisenberg antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = 1$, $\alpha = 0$) para $D/J_1 = 6$ obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.

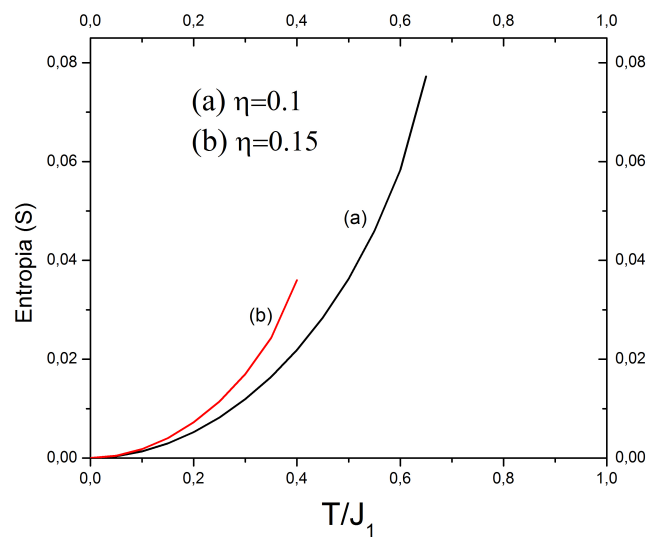


Figura 2.14: Comportamento da entropia por spin em função da temperatura para o modelo XY antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = \alpha = 0$) para $D/J_1 = 6$ obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.

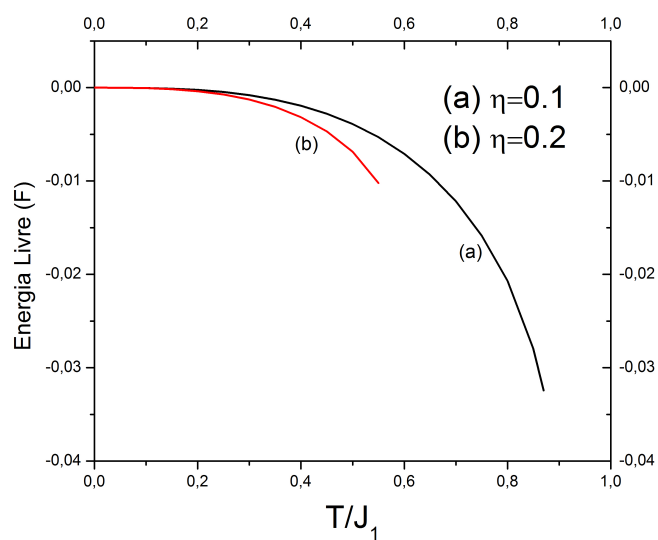


Figura 2.15: Comportamento da energia livre por spin em função da temperatura para o modelo de Heisenberg antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = 1$, $\alpha = 0$) para $D/J_1 = 6$ obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.

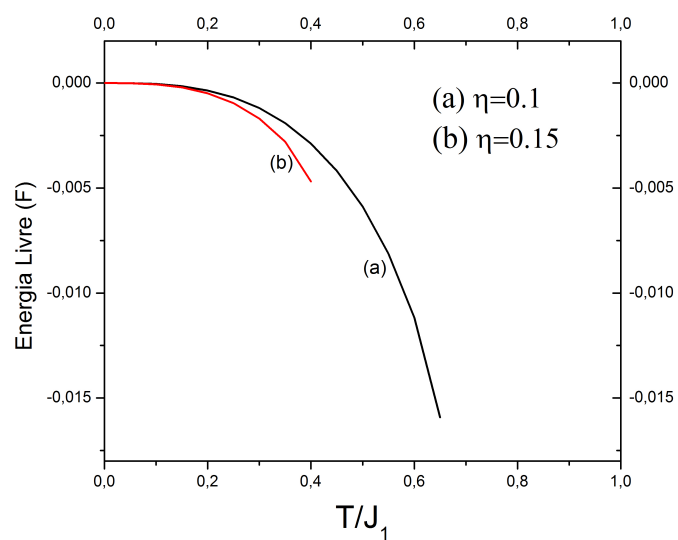


Figura 2.16: Comportamento da energia livre por spin em função da temperatura para o modelo XY antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = \alpha = 0$) para $D/J_1 = 6$ obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.

Referências Bibliográficas

- [1] **V. L. Berezinskii** *Sov. Phys. JETP* **32**, 43 (1971).
 - [2] **J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless** *J. Phys. C* **6**, 1181 (1973).
 - [3] **A. S. T. Pires, B. V. Costa and R. A. Dias** *Phys. Rev. B* **78**, 212408 (2008).
 - [4] **B. J. Suh, F. Borsa, L. L. Miller, M. Corti, D. C. Johnston and D. R. Torgeson** *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2212 (1995).
 - [5] **G. Misguichi and C. Lhuillier** *Frustrated Spin Systems* (ed. H. T. Diep - World Scientific) (2005).
 - [6] **C. Lacroix, P. Mendels, F. Mila** *Introduction to Frustrated Magnetism* Springer Series in Solid State Sciences, New York (2011).
 - [7] **M. Serbyn, T. Senthil, and P. A. Lee** *arXiv: 1108.3070* .
 - [8] **A. S. T. Pires** *Phys. Rev. B* **54**, 6081 (1996).
 - [9] **S. L. Menezes, M. E. Gouvea, A. S. T. Pires** *Phys. Lett. A* **166**, 330 (1992).
 - [10] **A. S. T. Pires** *Solid State Commun.* **104**, 77 (1997).
 - [11] **A. S. T. Pires** *J. Mag. Magn. Mater.* **322**, 2015 (2010).
 - [12] **A. S. T. Pires** *J. Mag. Magn. Mater.* **323**, 1977 (2011).
 - [13] **J. Villain** *J. Phys. (Paris)* **35**, 27 (1974).
-

- [14] **W. H. Wong, C. F. Lo, and Y. L. Wang** *Phys. Rev. B* **50**, 6126 (1994).
 - [15] **K. K. Pan** *Phys. Lett. A* **374**, 3225 (2010).
 - [16] **H. T. Wang and Y. Wang** *Phys. Rev. B* **71**, 104429 (2005).
 - [17] **P. Simon** *J. Phys. A: Math. Gen.* **30**, 2653 (1997).
-

Capítulo 3

Modelo de Heisenberg Ferrimagnético Isotrópico com Interações Competitivas

3.1 Introdução

Neste capítulo estudamos o modelo de Heisenberg ferrimagnético com spins $S_1 = 1$ e $S_2 = 1/2$ em uma e duas dimensões. No modelo unidimensional, além de incluirmos termos de interação de segundos vizinhos J_2 , consideramos também dimerização δ . No modelo bidimensional consideramos apenas interações competitivas de segundos vizinhos numa rede quadrada. O objetivo principal é analisar as propriedades do estado fundamental em função da competição de interações entre primeiros e segundos vizinhos $\eta = J_2/J_1$.

O estado fundamental do modelo de Heisenberg ferrimagnético possui excitações magnéticas de dois tipos: uma com a existência de gap (antiferromagnética) e outra sem existência de gap (ferromagnética) [1]. Diferente do caso antiferromagnético, o estado fundamental em uma dimensão tem ordem de longo alcance, que no nosso caso está relacionado com a condensação dos bósons de Schwinger. Estes sistemas em baixa dimensão têm atraído considerável interesse. Em especial, as cadeias de spin ferrimagnéticas têm atraído interesse tanto teórico [2–15] quanto experimental [16]. Portanto, esperamos que com o desenvolvimento deste trabalho possamos contribuir com o me-

lhor entendimento das propriedades dos compostos ferrimagnetos em baixa dimensão, especialmente sobre o estado fundamental.

Antes de partirmos diretamente para o tratamento analítico do problema, convém discutirmos algumas características clássicas do modelo que podem servir como um ponto de partida para a análise do mesmo. Classicamente o estado fundamental ferrimagnético do modelo unidimensional é estável para $J_2 = 0$ [3]. Quando incluímos as interações competitivas de segundos vizinhos, o estado fundamental ferrimagnético é estável até um valor crítico da relação de competição entre primeiros e segundos vizinhos $\eta_c = S_1 S_2 / 2(S_1^2 + S_2^2)$ [15,17], onde para $\eta > \eta_c$ o estado fundamental é um estado incomensurável. Sabe-se que o efeito das interações competitivas podem levar a frustração, e isto se torna o mecanismo no qual as flutuações podem ser variadas levando, ou não, a fases desordenadas.

Quando analisamos o modelo bidimensional classicamente, existem três estados diferentes [18] (figura 3.1). O estado fundamental ferrimagnético é estável até um valor η_{1c} da competição de interações. Para um $\eta_{1c} < \eta < \eta_{2c}$ o estado fundamental é um estado de spin inclinado, caracterizado pelo desvio dos spins da subrede S_1 do eixo de magnetização. Os spins da subrede S_2 permanecem colineares. Para $\eta > \eta_{2c}$ o estado fundamental é um estado colinear similar ao caso do modelo antiferromagnético $J_1 - J_2$ na rede quadrada. Nosso interesse está no estado fundamental ferrimagnético do modelo.

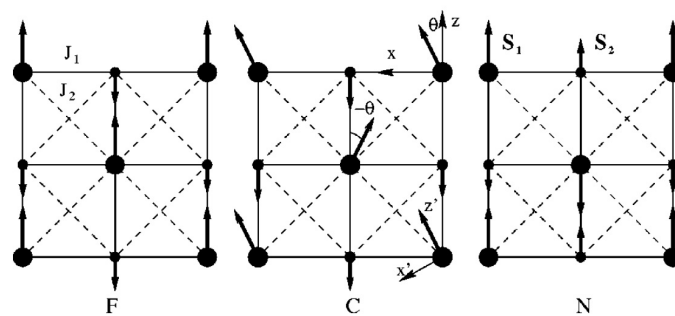


Figura 3.1: A figura obtida da referência [18], ilustra os três estados do modelo de Heisenberg ferrimagnético bidimensional. O estado clássico ferrimagnético (F), o estado inclinado (C), e o estado colinear (N).

3.2 Representação dos Bósons de Schwinger

Nesta seção apresentaremos a metodologia dos bósons de Schwinger que foi utilizada por Auerbach e Arovas [19] numa aproximação de campo médio. Dois bósons, a e b , representam os operadores de spin da seguinte forma:

$$S^+ = S^x + iS^y = a^\dagger b \quad (3.1)$$

$$S^- = S^x - iS^y = b^\dagger a \quad (3.2)$$

$$S^z = \frac{1}{2} (a^\dagger a - b^\dagger b) \quad (3.3)$$

onde os bósons a e b satisfazem as relações de comutação $[a, a^\dagger] = [b, b^\dagger] = 1$ e $[a, b] = 0$. As relações de comutação dos operadores de spin são então satisfeitas. Podemos verificar que as componentes de spin satisfazem a relação

$$S^x S^x + S^y S^y + S^z S^z = S(S + 1), \quad (3.4)$$

ou ainda

$$S^x S^x + S^y S^y + S^z S^z = S(S + 1) = \frac{1}{2} (S^+ S^- + S^- S^+) + S^z S^z \quad (3.5)$$

Então substituindo as equações (3.1) a (3.3) em (3.5) e utilizando as relações de comutação para os bósons a e b obtemos

$$S(S + 1) = \frac{1}{2} [a^\dagger a b b^\dagger + b^\dagger b a a^\dagger] + \frac{1}{4} (a^\dagger a - b^\dagger b)^2 \quad (3.6)$$

ou

$$S(S + 1) = \frac{1}{2} (a^\dagger a + b^\dagger b) \left[\frac{1}{2} (a^\dagger a + b^\dagger b) + 1 \right], \quad (3.7)$$

que comparando os dois membros da equação acima temos

$$2S = a^\dagger a + b^\dagger b. \quad (3.8)$$

Essa equação de vínculo é adicionada ao hamiltoniano com o auxílio de um multiplicador de Lagrange.

Estudaremos o modelo ferrimagnético em uma e duas dimensões. Incluímos interações competitivas de segundos vizinhos, e para o caso unidimensional incluímos também dimerização.

3.3 Caso Unidimensional

O modelo unidimensional que iremos estudar é dado pelo hamiltoniano abaixo.

$$H_{1d} = \sum_n J_{1n} \vec{S}_{1n} \cdot \vec{S}_{2n+1} + J_2 \sum_n \left(\vec{S}_{1n} \cdot \vec{S}_{1n+2} + \vec{S}_{2n+1} \cdot \vec{S}_{2n+3} \right), \quad (3.9)$$

onde $J_{1n} = J_1(1 + (-1)^n \delta)$, $\delta \in [0, 1]$ e J_2 é a interação competitiva de segundos vizinhos que tem mesma intensidade tanto para spins da subrede S_1 quanto para a subrede S_2 . Consideramos uma cadeia com $2N$ sítios ou N células unitárias.

Usamos a teoria dos bósons de Schwinger na aproximação de campo médio para tratar este problema. A representação é a mesma das equações (3.1) a (3.3). Consideramos uma rede bipartida com spins $S_1 = 1$ e $S_2 = 1/2$. Para cada subrede os operadores de spin são representados por dois bósons, desse modo teremos a representação escrita como:

$$S_{1i}^+ = a_i^\dagger b_i \quad , \quad S_{1i}^- = a_i b_i^\dagger \quad , \quad S_{1i}^z = \frac{1}{2}(a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i) \quad (3.10)$$

$$S_{2i}^+ = c_i^\dagger d_i \quad , \quad S_{2i}^- = c_i d_i^\dagger \quad , \quad S_{2i}^z = \frac{1}{2}(c_i^\dagger c_i - d_i^\dagger d_i) \quad (3.11)$$

Vamos agora substituir estas representações no Hamiltoniano (3.9), juntamente com as relações de vínculo $a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i = 2S_1$ e $c_i^\dagger c_i + d_i^\dagger d_i = 2S_2$ através de multiplicadores de Lagrange e reescrevê-los em termos dos operadores de ligação dados por:

$$D_{ij} = \frac{1}{2}(a_i d_i - c_i b_i) \quad (3.12)$$

$$A_{ij} = \frac{1}{2}(a_i^\dagger a_j - b_i^\dagger b_j) \quad (3.13)$$

$$B_{ij} = \frac{1}{2}(c_i^\dagger c_j - d_i^\dagger d_j) \quad (3.14)$$

Com isso obtemos o hamiltoniano na seguinte forma

$$H_{1d} = \sum_n \left(-4J_1 D_{2n,2n+1}^\dagger D_{2n,2n+1} + 2J_2 A_{2n+1,2n+3}^\dagger A_{2n+1,2n+3} \right) \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_n 2J_2 B_{2n,2n+2}^\dagger B_{2n,2n+2} \\
& + \sum_n \lambda_1 (a_n^\dagger a_n + b_n^\dagger b_n - 2S_1) + \sum_n \lambda_2 (c_n^\dagger c_n + d_n^\dagger d_n - 2S_2)
\end{aligned}$$

O hamiltoniano é escrito na forma de operadores biquadráticos do tipo $A^\dagger A$. Então fazemos um desacoplamento de campo médio $A^\dagger A \rightarrow \langle A^\dagger \rangle A + A^\dagger \langle A \rangle - \langle A^\dagger \rangle \langle A \rangle$ com $\langle A^\dagger \rangle = \langle A \rangle = \tilde{A}$. Após esse procedimento algébrico, tomamos a transformada de Fourier dos operadores $a_n = \sum_k e^{ikn} a_k$, obtemos o hamiltoniano na forma

$$\begin{aligned}
H_{1d} &= \sum_k \frac{R_{kA}^{1d}}{2} \left(a_k a_k^\dagger + a_k^\dagger a_k + b_k b_k^\dagger + b_k^\dagger b_k \right) \\
&+ \sum_k \frac{R_{kB}^{1d}}{2} \left(c_k c_k^\dagger + c_k^\dagger c_k + d_k d_k^\dagger + d_k^\dagger d_k \right) \\
&- \tilde{D} \sum_k |\Gamma_k| \left(a_k d_{-k} + a_k^\dagger d_{-k}^\dagger - b_k c_{-k} - b_k^\dagger c_{-k}^\dagger \right) - 2N \left[\lambda_1 \left(S_1 + \frac{1}{2} \right) + \lambda_2 \left(S_2 + \frac{1}{2} \right) \right] \\
&- 2NJ_2(\tilde{A}^2 + \tilde{B}^2) + 4NJ_1\tilde{D}^2 + 2NJ_1S_1S_2
\end{aligned} \tag{3.16}$$

onde $R_{kA}^{1d} = 2J_2\tilde{A}\cos 2k + \lambda_1$, $R_{kB}^{1d} = 2J_2\tilde{B}\cos 2k + \lambda_2$ e $|\Gamma_k| = 2J_1\sqrt{\cos^2 k + \delta^2 \sin^2 k}$.

Para diagonalizar o hamiltoniano utilizamos a transformação de Bogoliubov dada por

$$\begin{aligned}
a_k &= \mu_1 \alpha_k + \nu_1 \tilde{\beta}_{-k}^\dagger, & b_k^\dagger &= -\nu_2 \beta_k + \mu_2 \tilde{\alpha}_{-k}^\dagger \\
c_k &= \mu_2 \beta_k - \nu_2 \tilde{\alpha}_{-k}^\dagger, & d_{-k}^\dagger &= \nu_1 \alpha_k + \mu_1 \tilde{\beta}_{-k}^\dagger,
\end{aligned} \tag{3.17}$$

onde os μ_i 's e ν_i 's satisfazem a relação $\mu_i^2 - \nu_i^2 = 1$. Substituindo então esta transformação obtemos

$$\mu_i^2 = \cosh^2 \theta_k = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{R_{kA}^{1d} + R_{kB}^{1d}}{\sqrt{(R_{kA}^{1d} + R_{kB}^{1d})^2 - (zJ_1\tilde{D}\Lambda_k)^2}} \tag{3.18}$$

$$\nu_i^2 = \sinh^2 \theta_k = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{R_{kA}^{1d} + R_{kB}^{1d}}{\sqrt{(R_{kA}^{1d} + R_{kB}^{1d})^2 - (zJ_1\tilde{D}\Lambda_k)^2}} \tag{3.19}$$

onde z é o número de coordenação. Desta maneira a equação (3.16) fica reescrita como

$$\begin{aligned}
H_{1d} &= \sum_k \left[\omega_k^\alpha (\alpha_k^\dagger \alpha_k + 1/2) + \omega_k^{\tilde{\alpha}} (\tilde{\alpha}_k^\dagger \tilde{\alpha}_k + 1/2) \right] \\
&+ \sum_k \left[\omega_k^\beta (\beta_k^\dagger \beta_k + 1/2) + \omega_k^{\tilde{\beta}} (\tilde{\beta}_k^\dagger \tilde{\beta}_k + 1/2) \right] \\
&+ 4NJ_1 \tilde{D}^2 - 2NJ_2 (\tilde{A}^2 + \tilde{B}^2) - 2N\lambda_1 (S_1 + 1/2) \\
&- 2N\lambda_2 (S_2 + 1/2) + 2NJ_1 S_1 S_2.
\end{aligned} \tag{3.20}$$

A energia livre de um oscilador é dada por $\frac{1}{\beta} \ln(1 - e^{-\beta\omega_k})$, portanto podemos escrever a energia livre por sítio da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
f_{1d} &= \frac{F_{1d}}{2N} = \frac{2}{\beta N} \sum_k \left[\ln \left(2 \sinh \left(\frac{\beta\omega_k^\alpha}{2} \right) \right) + \ln \left(2 \sinh \left(\frac{\beta\omega_k^\beta}{2} \right) \right) \right] \\
&+ 2J_1 \tilde{D}^2 - J_2 (\tilde{A}^2 + \tilde{B}^2) - \lambda_1 (S_1 + 1/2) - \lambda_2 (S_2 + 1/2) + J_1 S_1 S_2.
\end{aligned} \tag{3.21}$$

com as frequências dadas por

$$\omega_k^\alpha = \omega_k^{\tilde{\alpha}} = \frac{R_{kA}^{1d} - R_{kB}^{1d}}{2} + \sqrt{\frac{(R_{kA}^{1d} + R_{kB}^{1d})^2}{2} - 4J_1^2 \tilde{D}^2 \Lambda_k^2} \tag{3.22}$$

$$\omega_k^\beta = \omega_k^{\tilde{\beta}} = -\frac{R_{kA}^{1d} - R_{kB}^{1d}}{2} + \sqrt{\frac{(R_{kA}^{1d} + R_{kB}^{1d})^2}{2} - 4J_1^2 \tilde{D}^2 \Lambda_k^2}, \tag{3.23}$$

onde $\Lambda_k = \frac{|\Gamma_k|}{2J_1}$. As equações auto-consistentes de campo médio são obtidas minimizando o funcional de energia livre, isto é, $\frac{\delta F_{1d}}{\delta \lambda_1} = 0$, $\frac{\delta F_{1d}}{\delta \lambda_2} = 0$, $\frac{\delta F_{1d}}{\delta A} = 0$, $\frac{\delta F_{1d}}{\delta B} = 0$, $\frac{\delta F_{1d}}{\delta \tilde{D}} = 0$. Após este processo algébrico as equações auto-consistentessão são escritas como:

$$S_2 - S_1 = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk}{2\pi} \left[\coth \left(\frac{\beta\omega_k^\alpha}{2} \right) - \coth \left(\frac{\beta\omega_k^\beta}{2} \right) \right] \tag{3.24}$$

$$\begin{aligned}
S_1 + S_2 + 1 &= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk}{2\pi} \frac{(R_{kA}^{1d} + R_{kB}^{1d})/2}{\sqrt{\frac{(R_{kA}^{1d} + R_{kB}^{1d})^2}{2} - 4J_1^2 \tilde{D}^2 \Lambda_k^2}} \\
&\times \left[\coth \left(\frac{\beta\omega_k^\alpha}{2} \right) + \coth \left(\frac{\beta\omega_k^\beta}{2} \right) \right]
\end{aligned} \tag{3.25}$$

$$\tilde{A} - \tilde{B} = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk}{2\pi} \cos(2k) \left[\coth\left(\frac{\beta\omega_k^\alpha}{2}\right) - \coth\left(\frac{\beta\omega_k^\beta}{2}\right) \right] \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} \tilde{A} + \tilde{B} &= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{\cos(2k)dk}{2\pi} \frac{(R_{kA}^{1d} + R_{kB}^{1d})/2}{\sqrt{\frac{(R_{kA}^{1d} + R_{kB}^{1d})^2}{2} - 4J_1\tilde{D}^2\Lambda_k^2}} \quad (3.27) \\ &\times \left[\coth\left(\frac{\beta\omega_k^\alpha}{2}\right) + \coth\left(\frac{\beta\omega_k^\beta}{2}\right) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk}{2\pi} \frac{J_1\Lambda_k^2}{\sqrt{\frac{(R_{kA}^{1d} + R_{kB}^{1d})^2}{2} - 4J_1\tilde{D}^2\Lambda_k^2}} \quad (3.28) \\ &\times \left[\coth\left(\frac{\beta\omega_k^\alpha}{2}\right) + \coth\left(\frac{\beta\omega_k^\beta}{2}\right) \right] \end{aligned}$$

Propriedades em $T=0$

Nestas condições devemos fazer modificações para que a equação (3.24) seja satisfeita, uma vez que estamos considerando $S_1 \neq S_2$. O ramo ω_k^β tem seu valor mínimo em $k=0$ enquanto o ramo ω_k^α tem um gap em $T=0$ [20]. Então o ramo β tem a menor energia e os bósons condensam em $\beta_{k=0}$. A contribuição em $k=0$ que deve ser avaliada separadamente em cada equação integral é dada por:

$$S_1 - S_2 = \frac{1}{4N} \coth\left(\frac{\beta\omega_k^\beta}{2}\right) \Big|_{k=0, \lim T \rightarrow 0} \quad (3.29)$$

Reescalamos as variáveis $\lambda_1, \lambda_2, \tilde{A}, \tilde{B}, \tilde{D}$ por novas que deixam as equações mais simples.

$$\begin{aligned} \Lambda_1 &= \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2}, & \sigma &= \frac{2\tilde{D}}{\Lambda_1} \\ \Lambda_2 &= \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{2}, & h &= \frac{J_2(\tilde{A} + \tilde{B})}{\Lambda_1}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Com essa modificação, a equação (3.26) tem somente a contribuição do termo $k = 0$, que diminui o número de equações. O conjunto de equações a serem resolvidas é dado agora por

$$\Lambda_2 = \Lambda_1 \sqrt{(h+1)^2 - \sigma^2} + \frac{J_2}{2} \quad (3.31)$$

$$\Lambda_1 = \frac{2}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\Lambda_k^2 dk}{\sqrt{(h \cos(2k) + 1)^2 - (\sigma \Lambda_k)^2}} + \frac{1}{2\sqrt{(h+1)^2 - \sigma^2}} \quad (3.32)$$

$$h = \frac{J_2}{\Lambda_1} \left[\frac{2}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk \cos(2k) (h \cos(2k) + 1)}{\sqrt{(h \cos(2k) + 1)^2 - (\sigma \Lambda_k)^2}} + \frac{h+1}{\sqrt{(h+1)^2 - \sigma^2}} \right] \quad (3.33)$$

$$\sigma = (h+1) \left[1 - \left(\frac{1}{5 - I_k^{1d}} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.34)$$

onde I_k^{1d} é a integral dada por

$$I_k^{1d} = \frac{4}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk (h \cos(2k) + 1)}{\sqrt{(h \cos(2k) + 1)^2 - (\sigma \Lambda_k)^2}} \quad (3.35)$$

Resolvemos as equações acima por métodos numéricos para obtermos os valores de \tilde{A} , \tilde{B} , \tilde{D} , λ_1 , λ_2 que minimizam a energia livre. Calculamos também S^z (por sítio) de cada subrede. Os cálculos são deixados para o apêndice A.

$$\langle S_1^z \rangle = \frac{1}{2N} \cosh^2 \theta_k n_{\beta, k=0} |_{T \rightarrow 0} \quad (3.36)$$

$$\langle S_2^z \rangle = -\frac{1}{2N} \sinh^2 \theta_k n_{\beta, k=0} |_{T \rightarrow 0} \quad (3.37)$$

A energia livre por célula unitária em $T = 0$ é dada por

$$\begin{aligned} \frac{F_{1d}}{N} &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk}{2\pi} \left[4\Lambda_1 \sqrt{(h \cos(2k) + 1)^2 - (\sigma \Lambda_k)^2} \right] \\ &+ \Lambda_1^2 \sigma^2 - 2\Lambda_1(S_1 + S_2 + 1) - 2\Lambda_2(S_2 - S_1) - 2J_2(\tilde{A}^2 + \tilde{B}^2) + 2S_1 S_2 \end{aligned} \quad (3.38)$$

e o *gap* é do ramo antiferromagnético dado por

$$\Delta = 2(\Lambda_2 - J_2) \quad (3.39)$$

3.4 Caso Bidimensional

O hamiltoniano para o caso bidimensional é dado por:

$$H_{2d} = J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_{1ij} \cdot \vec{S}_{2ij} + J_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \left(\vec{S}_{1ij} \cdot \vec{S}_{1ij} + \vec{S}_{2ij} \cdot \vec{S}_{2ij} \right). \quad (3.40)$$

Substituindo a representação dada pelas equações (3.10) e (3.11), e reescrevendo o hamiltoniano em termos dos operadores definidos nas equações (3.12) a (3.14), teremos a expressão abaixo.

$$\begin{aligned} H_{2d} = & \sum_{i,j} \left(-4J_1 D_{ij}^\dagger D_{ij} + 2J_2 A_{ij}^\dagger A_{ij} + 2J_2 B_{ij}^\dagger B_{ij} \right) \\ & + \sum_i \lambda_1 \left(a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i - 2S_1 \right) + \sum_i \lambda_2 \left(c_i^\dagger c_i + d_i^\dagger d_i - 2S_2 \right). \end{aligned} \quad (3.41)$$

Fazemos o desacoplamento de campo médio no hamiltoniano acima, seguido da transformada de fourier para obtermos:

$$\begin{aligned} H_{2d} = & \sum_{\vec{k}} \frac{R_{kA}^{2d}}{2} \left(a_k a_k^\dagger + a_k^\dagger a_k + b_k b_k^\dagger + b_k^\dagger b_k \right) \\ & + \sum_{\vec{k}} \frac{R_{kB}^{2d}}{2} \left(c_k c_k^\dagger + c_k^\dagger c_k + d_k d_k^\dagger + d_k^\dagger d_k \right) \\ & - 4J_1 \tilde{D} \sum_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}} \left(a_k d_{-k} + a_k^\dagger d_{-k}^\dagger - b_k c_{-k} - b_k^\dagger c_{-k}^\dagger \right) - 2N \left[\lambda_1 \left(S_1 + \frac{1}{2} \right) + \lambda_2 \left(S_2 + \frac{1}{2} \right) \right] \\ & - 4NJ_2 (\tilde{A}^2 + \tilde{B}^2) + 8NJ_1 \tilde{D}^2 + 4NJ_1 S_1 S_2 \end{aligned} \quad (3.42)$$

com $R_{kA}^{2d} = 8\tilde{A}J_2 \cos k_x \cos k_y + \lambda_1$, $R_{kB}^{2d} = 8\tilde{B}J_2 \cos k_x \cos k_y + \lambda_2$ e $\gamma_k = \frac{1}{2}(\cos k_x + \cos k_y)$. Aplicando a transformação dada pela equação (3.17), o hamiltoniano diagonalizado fica escrito como:

$$\begin{aligned} H_{2d} = & \sum_{\vec{k}} \left[\omega_k^\alpha (\alpha_k^\dagger \alpha_k + 1/2) + \omega_k^{\tilde{\alpha}} (\tilde{\alpha}_k^\dagger \tilde{\alpha}_k + 1/2) \right] \\ & + \sum_{\vec{k}} \left[\omega_k^\beta (\beta_k^\dagger \beta_k + 1/2) + \omega_k^{\tilde{\beta}} (\tilde{\beta}_k^\dagger \tilde{\beta}_k + 1/2) \right] \end{aligned} \quad (3.43)$$

$$\begin{aligned}
& + 8NJ_1\tilde{D}^2 - 8NJ_2(\tilde{A}^2 + \tilde{B}^2) - 2N\lambda_1(S_1 + 1/2) \\
& - 2N\lambda_2(S_2 + 1/2) + 4NJ_1S_1S_2
\end{aligned}$$

onde as frequências são

$$\omega_k^\alpha = \omega_{\tilde{\alpha}} = \frac{R_{kA}^{2d} - R_{kB}^{2d}}{2} + \sqrt{\frac{(R_{kA}^{2d} + R_{kB}^{2d})^2}{2} - 16J_1^2\tilde{D}^2\gamma_k^2} \quad (3.44)$$

$$\omega_k^\beta = \omega_{\tilde{\beta}} = -\frac{R_{kA}^{2d} - R_{kB}^{2d}}{2} + \sqrt{\frac{(R_{kA}^{2d} + R_{kB}^{2d})^2}{2} - 16J_1^2\tilde{D}^2\gamma_k^2}. \quad (3.45)$$

Para o caso bidimensional realizamos o mesmo procedimento anterior. O funcional de energia livre pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
f_{2d} &= \frac{F_{2d}}{2N} = \frac{2}{\beta N} \sum_k \left[\ln \left(2 \sinh \left(\frac{\beta \omega_k^\alpha}{2} \right) \right) + \ln \left(2 \sinh \left(\frac{\beta \omega_k^\beta}{2} \right) \right) \right] \\
&+ 4J_1\tilde{D}^2 - 4J_2(\tilde{A}^2 + \tilde{B}^2) - \lambda_1(S_1 + 1/2) - \lambda_2(S_2 + 1/2) + 2J_1S_1S_2
\end{aligned} \quad (3.46)$$

Minimizando o funcional em relação a λ_1 , λ_2 , \tilde{A} , \tilde{B} e D obtemos as equações de campo médio auto-consistentes.

$$S_2 - S_1 = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} \left[\coth \left(\frac{\beta \omega_k^\alpha}{2} \right) - \coth \left(\frac{\beta \omega_k^\beta}{2} \right) \right] \quad (3.47)$$

$$\begin{aligned}
S_1 + S_2 + 1 &= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} \frac{(R_{kA}^{2d} + R_{kB}^{2d})}{\sqrt{\frac{(R_{kA}^{2d} + R_{kB}^{2d})^2}{2} - 16J_1^2\tilde{D}^2\gamma_k^2}} \\
&\times \left[\coth \left(\frac{\beta \omega_k^\alpha}{2} \right) + \coth \left(\frac{\beta \omega_k^\beta}{2} \right) \right]
\end{aligned} \quad (3.48)$$

$$\begin{aligned}
\tilde{A} - \tilde{B} &= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} \cos(k_y) \cos(k_x) \\
&\times \left[\coth \left(\frac{\beta \omega_k^\alpha}{2} \right) - \coth \left(\frac{\beta \omega_k^\beta}{2} \right) \right]
\end{aligned} \quad (3.49)$$

$$\begin{aligned} \tilde{A} + \tilde{B} &= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} \frac{(R_{kA}^{2d} + R_{kB}^{2d}) \cos(k_x) \cos(k_y)}{\sqrt{\frac{(R_{kA}^{2d} + R_{kB}^{2d})^2}{2} - 16J_1^2 \tilde{D}^2 \gamma_k^2}} \quad (3.50) \\ &\times \left[\coth\left(\frac{\beta\omega_k^\alpha}{2}\right) + \coth\left(\frac{\beta\omega_k^\beta}{2}\right) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk}{2\pi} \frac{4J_1 \gamma_k^2}{\sqrt{\frac{(R_{kA}^{2d} + R_{kB}^{2d})^2}{2} - 16J_1 \tilde{D}^2 \Lambda_k^2}} \quad (3.51) \\ &\times \left[\coth\left(\frac{\beta\omega_k^\alpha}{2}\right) + \coth\left(\frac{\beta\omega_k^\beta}{2}\right) \right] \end{aligned}$$

Propriedades em $T=0$

Novamente avaliamos as equações no limite $T = 0$. Nestas condições nossas equações têm contribuição separadamente em $\vec{k} = 0$ devido à condensação dos bósons no ramo ω_k^β . A contribuição têm a mesma forma da equação (3.29) e nossas equações auto-consistentes com essa modificação ficam:

$$\Lambda_2 = \Lambda_1 \sqrt{(1 + 4h)^2 - \sigma^2} + 2J_2 \quad (3.52)$$

$$\Lambda_1 = \frac{4}{\sqrt{(1 + 4h)^2 - \sigma^2}} + \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk_x dk_y}{\sqrt{(1 + 4h \cos k_x \cos k_y)^2 - (\sigma \gamma_k)^2}} 4\gamma_k^2 \quad (3.53)$$

$$h = \frac{J_2}{\Lambda_1} \left[\frac{2(1 + 4h)}{\sqrt{(1 + 4h)^2 - \sigma^2}} + \frac{2}{\pi^2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk_x dk_y (1 + 4h \cos k_x \cos k_y) \cos k_x \cos k_y}{\sqrt{(1 + 4h \cos k_x \cos k_y)^2 - (\sigma \gamma_k)^2}} \right] \quad (3.54)$$

$$\sigma = (1 + 4h) \left[1 - \left(\frac{4}{5 - 2I_k^{2d}} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.55)$$

onde I_k^{2d} é a integral dada por

$$I_k^{2d} = \frac{2}{\pi^2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk_x dk_y (1 + 4h \cos k_x \cos k_y)}{\sqrt{(1 + 4h \cos k_x \cos k_y)^2 - (\sigma\gamma_k)^2}} \quad (3.56)$$

Para este caso nós temos uma pequena mudança, a variável σ é escrita agora como $\sigma = 4\tilde{D}/\Lambda_1$, mas Λ_1 , Λ_2 e h têm a mesma forma do caso anterior. As magnetizações das subredes para o modelo bidimensional tem a mesma forma das equações (3.36) e (3.37). Calculamos também a energia livre em $T = 0$ que é dada por

$$E = \frac{4}{\pi^2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} dk_x dk_y \sqrt{(1 + 4h \cos k_x \cos k_y)^2 - (\sigma\gamma_k)^2} \quad (3.57)$$

$$- 8J_2(\tilde{A}^2 + \tilde{B}^2) - 5\Lambda_1 + \Lambda_2 + \frac{(\Lambda_1\sigma)^2}{2} + 2$$

e o *gap* agora sendo dado por

$$\Delta_{2d} = 2(\Lambda_2 - 2J_2) \quad (3.58)$$

3.5 Fator de Estrutura Dinâmico

Nesta seção mostramos a expressão para o fator de estrutura dinâmico que calculamos seguindo o mesmo procedimento feito por Auerbach e Arovas no estudo do modelo antiferromagnético na rede quadrada [23]. Esta é a quantidade que os teóricos geralmente calculam da seção de choque do experimento de espalhamento de nêutrons.

$$\left(\frac{d^2\psi}{d\Omega dE_f} \right)_{mag} \propto S(q, \omega) \quad (3.59)$$

O fator de estrutura dinâmico spin-spin é dado por:

$$S(q, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle \vec{S}_q(t) \cdot \vec{S}_{-q}(0) \rangle \quad (3.60)$$

Por definição, esta é uma grandeza real e positiva. O processo algébrico para obter a forma final para o problema abordado aqui é apresentado no apêndice A. Consideramos nos nossos cálculos $\omega > 0$ para $T = 0$. A expressão final obtida foi:

$$\begin{aligned}
S(q, \omega) &= \frac{1}{8} \sum_k \delta(\omega_k^\beta + \omega_{k+q}^\beta - \omega) \\
&\times \left[-\frac{R_{k+q}^A + R_{k+q}^B}{\omega_{k+q}^\alpha + \omega_{k+q}^\beta} + \frac{R_k^A + R_k^B}{\omega_k^\alpha + \omega_k^\beta} + \frac{(R_k^A + R_k^B)(R_{k+q}^A + R_{k+q}^B)}{(\omega_k^\alpha + \omega_k^\beta)(\omega_{k+q}^\alpha + \omega_{k+q}^\beta)} - 1 \right] \\
&+ \frac{1}{8} \sum_k \delta(\omega_k^\alpha + \omega_{k-q}^\beta - \omega) \\
&\times \left[\frac{R_{k-q}^A + R_{k-q}^B}{\omega_{k-q}^\alpha + \omega_{k-q}^\beta} - \frac{R_k^A + R_k^B}{\omega_k^\alpha + \omega_k^\beta} + \frac{(R_k^A + R_k^B)(R_{k-q}^A + R_{k-q}^B)}{(\omega_k^\alpha + \omega_k^\beta)(\omega_{k-q}^\alpha + \omega_{k-q}^\beta)} - 1 \right]
\end{aligned} \tag{3.61}$$

3.6 Resultados

Resolvemos os conjuntos de equações auto-consistentes através de métodos numéricos. Os resultados são apresentados pelas figuras a seguir. Na figuras 3.2 a 3.5 são apresentadas as soluções das varáveis de campo médio para o modelo unidimensional, em função da competição de interações entre primeiros e segundos vizinhos $\eta = J_2/J_1$. Nestes mesmos gráficos, são mostradas as soluções para diferentes valores da dimerização δ . Para pequenos valores de η o sistema tem ordem de longo alcance até um valor crítico dependendo do valor da dimerização. Quando $\delta = 0$ obtivemos $\eta_c = 0.08$, que é um valor diferente daqueles obtidos por outros métodos como onda de spin linear (LSW) $\eta_{LSW} = 1/6$, Grupo e Renormalização de Matriz de Densidade (DMRG) $\eta_{DMRG} = 0.177$ e Diagonalização Exata $\eta_{ED} = 0.229$ [15,21].

Como apontado por Stanek *et al.* [22], discrepâncias da teoria de campo médio dos bósons de Schwinger em relação a outros métodos, já apareceram anteriormente quando a teoria foi introduzida por Arovas e Auerbach [19,23]. Nos seus cálculos, a energia livre é maior por um fator de 2 em relação a onda de spin linear por exemplo. Portanto, nós esperamos que os valores de η_c obtidos neste trabalho estejam razoáveis comparados aos outros métodos citados anteriormente, considerando tais discrepâncias.

Na figura 3.6 apresentamos o *gap* do ramo antiferromagnético em função de η para diferentes valores de δ . No limite $\delta = 0$ e $\eta = 0$ obtivemos o valor de 1.778 que está em bom acordo com resultados obtidos por diagonalização exata (ED) 1.759 [10] e Monte Carlo Quântico (QMC) 1.767 [6]. Na figura

3.7 é mostrada a energia livre em função de η para diferentes valores de δ . Quando $\eta = \delta = 0$ nós obtivemos o valor -1.91 que é o resultado obtido na referência [20]. Existe uma diferença entre este valor e outros obtidos por DMRG [15] e expansão em séries de onda de spin [14] -1.454 ou Monte Carlo quântico -1.437 [6]. Esta diferença é decorrente de uma sobrecontagem dos bósons de Schwinger, conforme é discutido na referência [20]. O resultado corrigido é -1.455 , que está em bom acordo com os outros resultados citados. Na figura 3.8 mostramos os resultados de $\langle S_1^z \rangle$ e $\langle S_2^z \rangle$. No caso $\eta = 0$ e $\delta = 0$, obtivemos $\langle S_1^z \rangle = 0.790$ que está em boa concordância com outros resultados obtidos por métodos diferentes como expansão de ondas de spin 0.79388366 e DMRG 0.79248 [14].

Nas figuras 3.9 a 3.12 apresentamos as soluções das variáveis de campo médio para o modelo bidimensional, em função da competição de interações entre primeiros e segundos vizinhos η . A fase ferrimagnética persiste até um valor crítico $\eta_c = 0.31$ e acreditamos que a partir deste valor, a fase ferrimagnética dá lugar à fase inclinada como mencionada no início deste capítulo, que também tem ordem de longo alcance. Na figura 3.13 apresentamos o *gap* do ramo antiferromagnético em função de η . Para o caso $\eta = 0$, obtivemos o valor 2.439 , que cresce à medida que η aumenta. Na figura 3.14 mostramos a energia livre do estado fundamental como função de η . Para o caso $\eta = 0$ obtivemos $E = -9.063$, e como esperado a energia aumenta à medida que η cresce. Na figura 3.15 apresentamos as magnetizações das sub-redes [15] em função de η .

Na figura 3.16 mostramos o fator de estrutura dinâmico [23,24] para o modelo unidimensional, em $T = 0$, em unidades arbitrárias para $\delta = 0$. $S(q, \omega)$ desaparece abaixo do limiar do processo de dois mágnons. O pico para o caso $\eta = 0$ é cerca de 1.26 vezes maior que o pico para $\eta = 0.08$. Na figura 3.17 nós mostramos o mesmo fator de estrutura, agora para $\delta = 0.5$. Neste caso o pico para $\eta = 0$ é cerca de 1.5 vezes maior que o pico para $\eta = 0.1$. Nas figuras 3.18 e 3.19, são mostrados o fator de estrutura dinâmico para o modelo bidimensional, em $T = 0$, em unidades arbitrárias para $\eta = 0$ e $\eta = 0.1$, respectivamente.

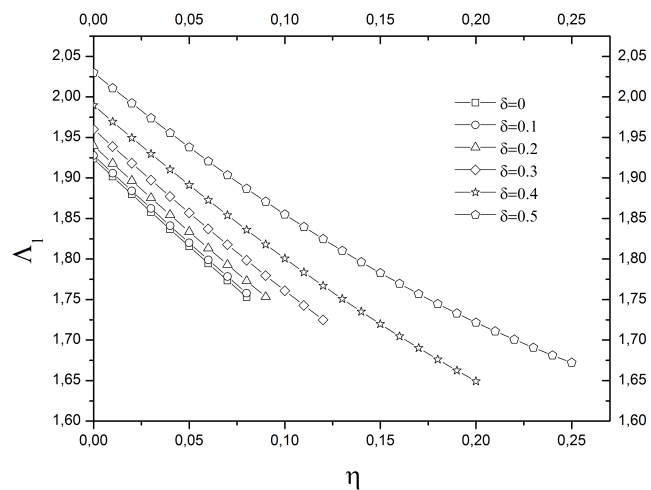


Figura 3.2: Solução de Λ_1 em função de η para diferentes valores de δ .

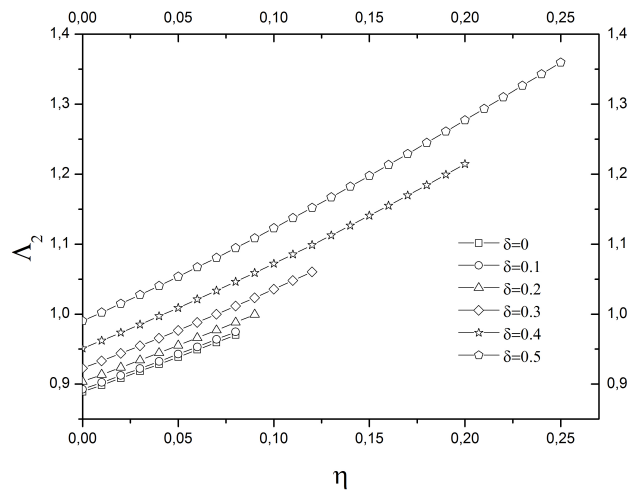


Figura 3.3: Solução de Λ_2 em função de η para diferentes valores de δ .

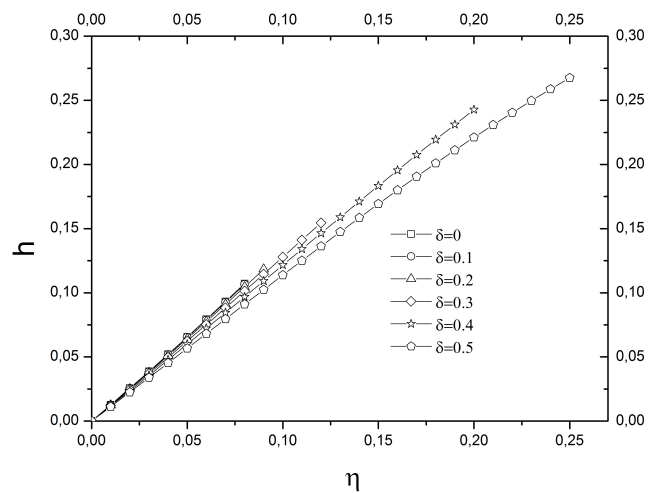


Figura 3.4: Solução de h em função de η para diferentes valores de δ .

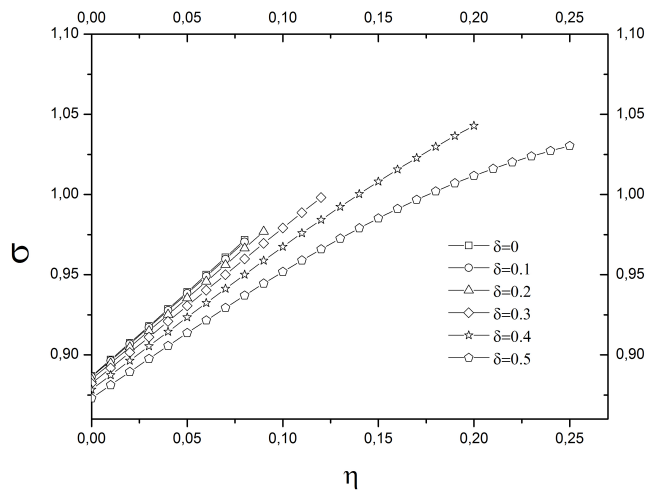


Figura 3.5: Solução de σ em função de η para diferentes valores de δ .

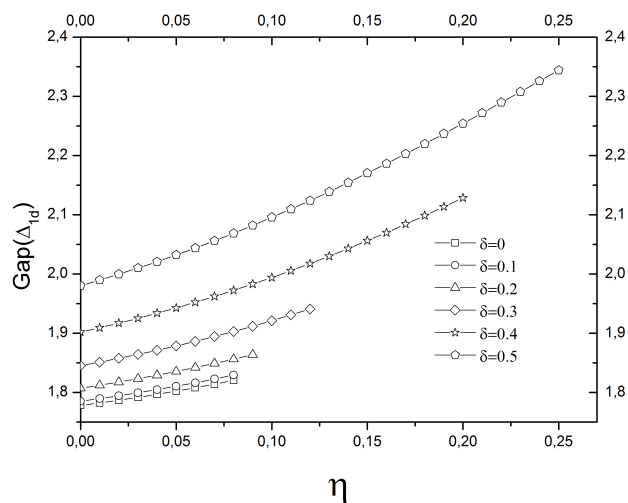


Figura 3.6: Gap do ramo antiferromagnético em função de η para diferentes valores de δ

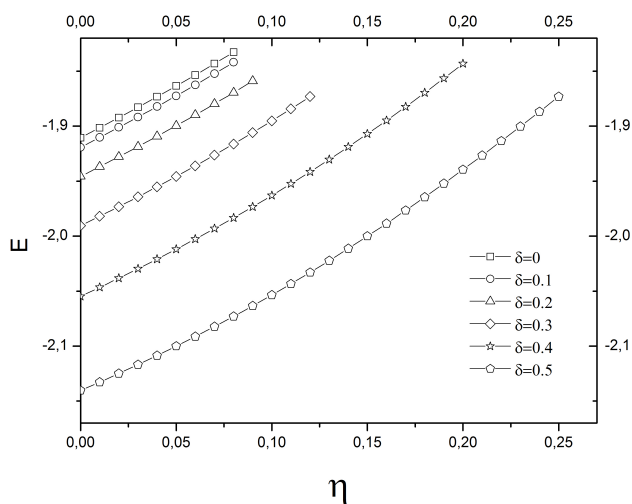


Figura 3.7: Energia livre (por sítio) do estado fundamental em função de η para diferentes valores de δ

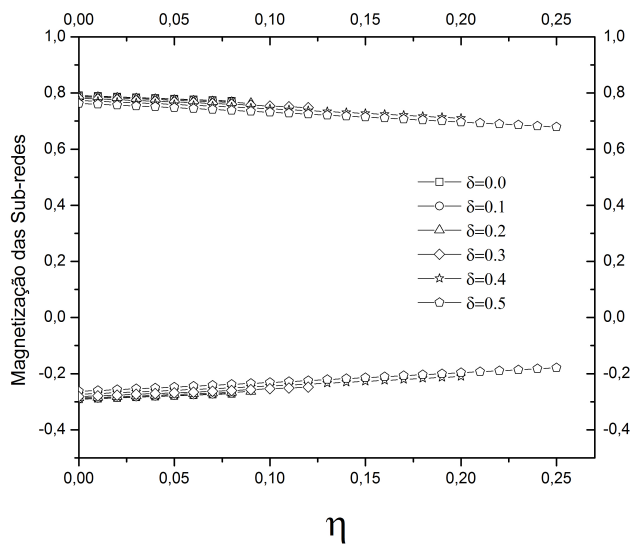


Figura 3.8: Magnetização das subredes em função de η para diferentes valores de δ . As curvas superiores correspondem à subrede S_1 , e as inferiores à subrede S_2 , do modelo de Heisenberg dimerizado unidimensional.

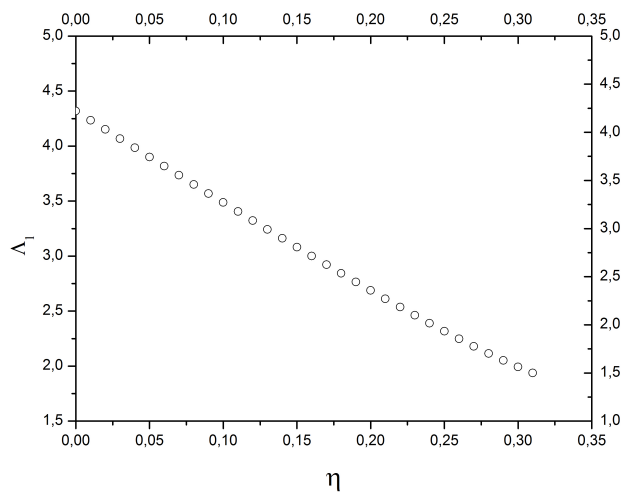


Figura 3.9: Solução de Λ_1 em função de η para o modelo de Heisenberg ferrimagnético frustrado numa rede quadrada.

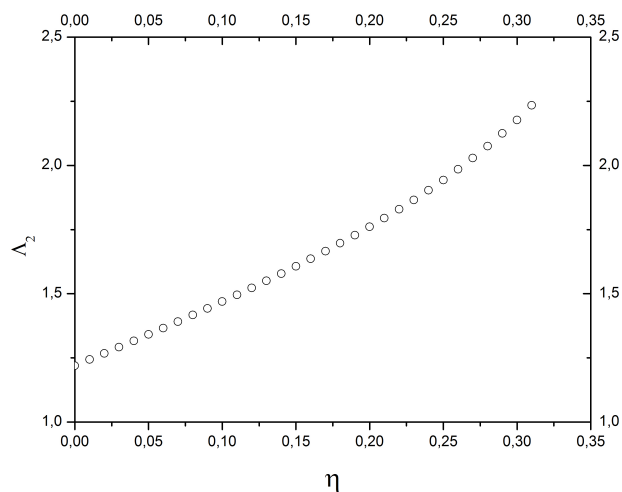


Figura 3.10: Solução de Λ_2 em função de η para o modelo de Heisenberg ferrimagnético frustrado numa rede quadrada.

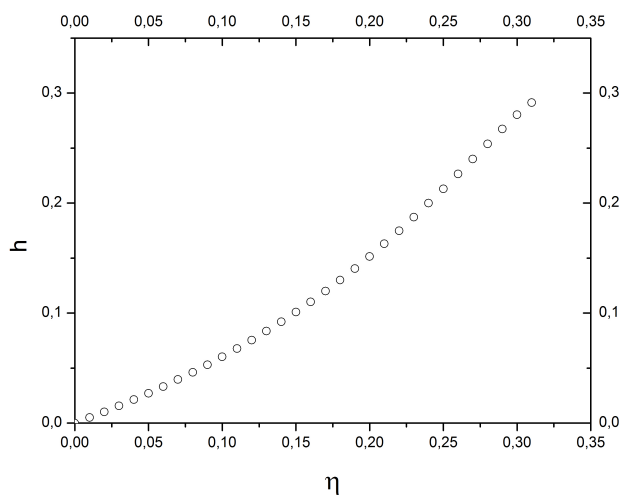


Figura 3.11: Solução de h em função de η para o modelo de Heisenberg ferrimagnético frustrado numa rede quadrada.

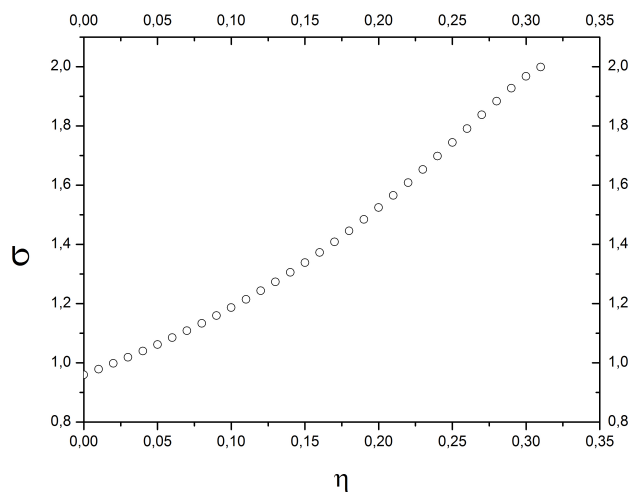


Figura 3.12: Solução de σ em função de η para o modelo de Heisenberg ferrimagnético frustrado numa rede quadrada.

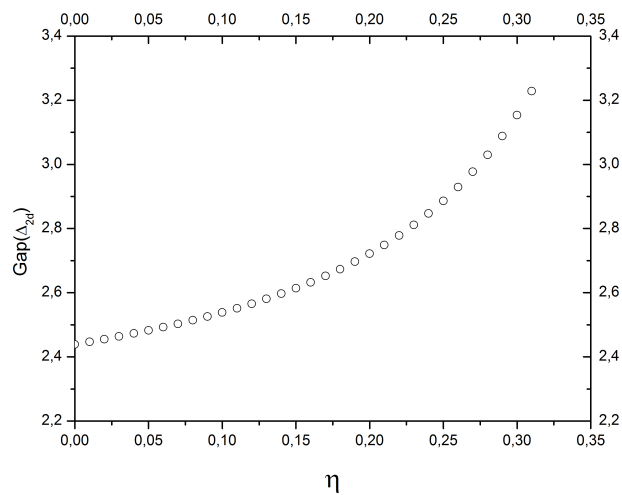


Figura 3.13: Gap do ramo antiferromagnético em função de η para o modelo de Heisenberg ferrimagnético frustrado numa rede quadrada.

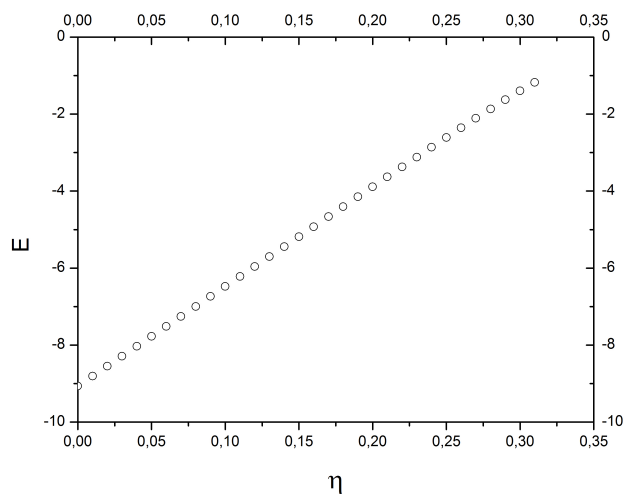


Figura 3.14: Energia livre (por sítio) do estado fundamental em função de η para o modelo de Heisenberg ferrimagnético frustrado numa rede quadrada.

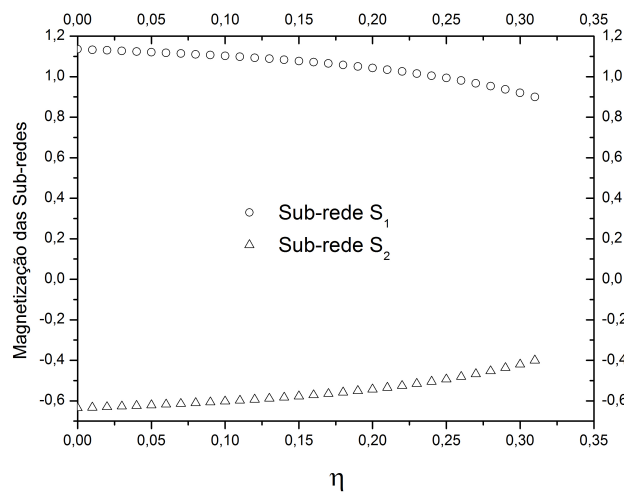


Figura 3.15: Magnetização das sub-redes em função de η para o modelo de Heisenberg ferrimagnético frustrado numa rede quadrada.

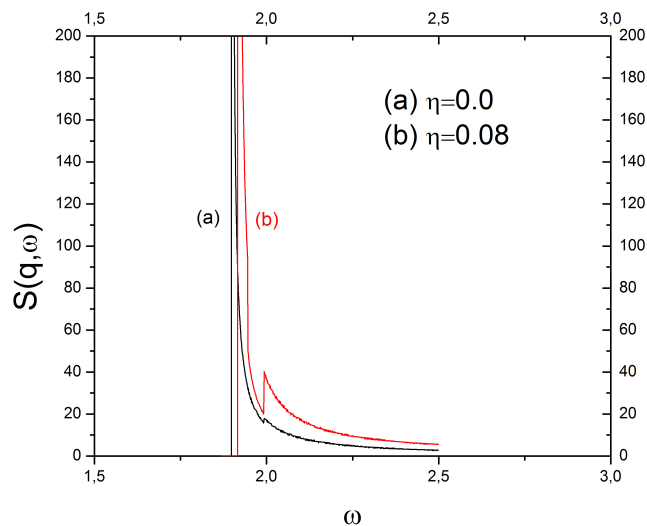


Figura 3.16: Fator de estrutura para o caso unidimensional, a temperatura nula, para $q = \pi/8$, $\delta = 0$ e dois valores de η diferentes.

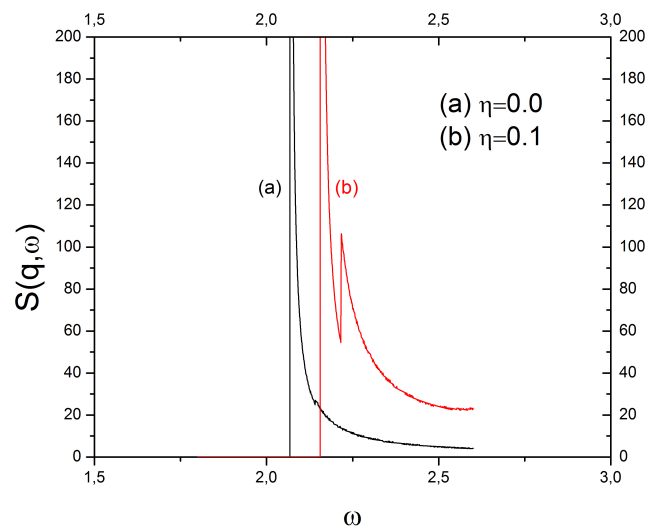


Figura 3.17: Fator de estrutura para o caso unidimensional, a temperatura nula, para $q = \pi/8$, $\delta = 0.5$ e dois valores de η diferentes.

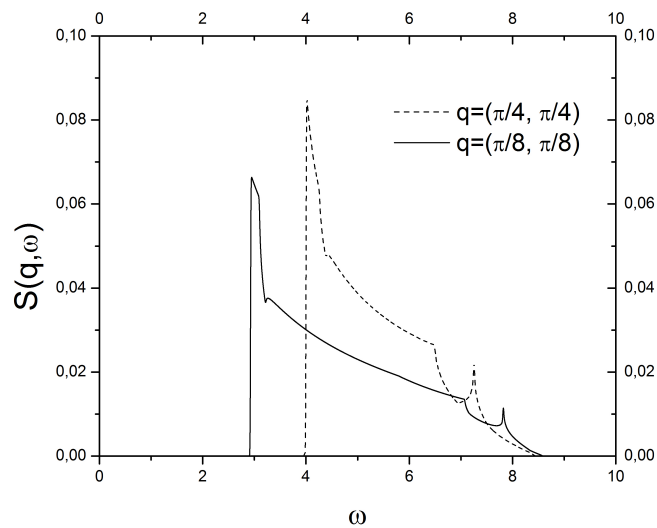


Figura 3.18: Fator de estrutura para o caso bidimensional, a temperatura nula, para $\eta = 0$.

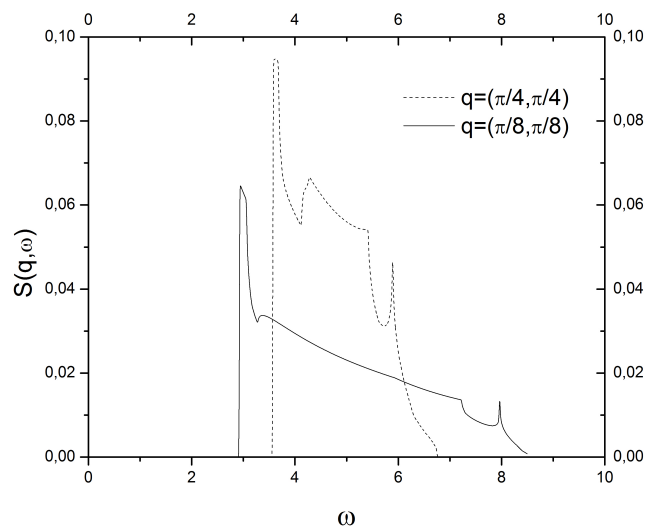


Figura 3.19: Fator de estrutura para o caso bidimensional, a temperatura nula, para $\eta = 0.1$.

Referências Bibliográficas

- [1] **Guangshan Tian** *Phys. Rev. B* **56**, 5355 (1997).
 - [2] **F. C. Alcaraz and A. L. Malvezzi** *J. Phys. A: Math. Gen.* **30**, 767 (1997).
 - [3] **S. K. Pati, S. Ramesha and D. Sen** *Phys. Rev. B* **55**, 8894 (1997) .
 - [4] **S. K. Pati, S. Ramesha and D. Sen** *J. Phys. Condens. Matter* **9**, 8707 (1997).
 - [5] **A. K. Kolezhuk, H-J Mikeska and S. Yamamoto** *Phys. Rev. B* **55**, 3336 (1997).
 - [6] **S. Brehmer H-J Mikeska and S. Yamamoto** *J. Phys. Condens. Matter* **9**, 3921 (1997).
 - [7] **H. Niggeman, G. Uimin and J. Zittartz** *J. Phys. Condens. Matter* **9**, 9031 (1997).
 - [8] **H. Niggeman, G. Uimin and J. Zittartz** *J. Phys. Condens. Matter* **10**, 5217 (1998).
 - [9] **S. Yamamoto** *Int. J. Mod. Phys. C* **8**, 609 (1997).
 - [10] **S. Yamamoto, S. Brehmer and H-J Mikeska** *Phys. Rev. B* **57**, 13610 (1998).
 - [11] **T. Ono, T. Nishimura, M. Katsumura, T. Morita and M. Sugimoto** *J. Phys. Soc. Japan* **66**, 2576 (1997).
 - [12] **T. Kuramoto** *J. Phys. Soc. Japan* **67**, 1762 (1998).
-

-
- [13] S. Yamamoto and T. Fukui *Phys. Rev. B* **57**, 14008 (1998).
- [14] N. B. Ivanov *Phys. Rev. B* **57**, 14024 (1998).
- [15] N. B. Ivanov, J. Richter and U. Schollwöck *Phys. Rev. B* **58**, 14456 (1998).
- [16] M. Hagiwara, K. Minami, Y. Marumi, K. Tatani and K. Kindo *J. Phys. Soc. Japan* **67**, 2209 (1998).
- [17] N. B. Ivanov *Cond. Matt. Phys.* **12**, 435 (2009).
- [18] N. B. Ivanov, J. Richter and D. J. J. Farnell *Phys. Rev. B* **66**, 014421 (2002).
- [19] A. Auerbach and D. P. Arovas *Phys. Rev. B* **38**, 316 (1988).
- [20] C. Wu, B. Chen, X. Dai, Y. Yu and Z.-B. Su *Phys. Rev. B* **60**, 1057 (1999).
- [21] A. Al-Omari *W. Journal of Cond. Matt. Phys.* **1**, 121 (2011).
- [22] D. Stanek, Oleg. P. Sushkov and Götz S. Uhrig *Phys. Rev. B* **84**, 064505 (2011).
- [23] A. Auerbach and D. P. Arovas *Phys. Rev. Lett.* **61**, 617 (1988).
- [24] L. S. Lima and A. S. T. Pires *Eur. Phys. J. B* **70**, 335 (2009).
-

Capítulo 4

Modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$ bidimensional antiferromagnético com $S=1$ numa rede quadrada

4.1 Introdução

O estudo do modelo de Heisenberg antiferromagnético $J_1 - J_2$ numa rede quadrada é de grande interesse tanto teórico quanto experimental [1–3]. O modelo na rede quadrada de spin $1/2$ descreve adequadamente alguns materiais reais, como por exemplo, Li_2VO_4 , Li_2VO_4 , $VOMoSiO_4$ e $BaCdVO(PO_4)_2$. Do ponto de vista teórico, este modelo tem sido estudado por vários métodos como teoria de ondas de spin, diagonalização numérica exata, modelo sigma não linear, Monte Carlo quântico variacional, entre outros [4–8]. Apesar da existência de uma ordem do tipo Néel para pequenos valores de $\eta = J_2/J_1$, e uma fase colinear para grandes valores de η ser bem estabelecida, as propriedades da fase intermediária, que é não magnética e ocorre na região $0.4 \leq \eta \leq 0.6$, ainda são discutidas [6]. Estados fundamentais foram propostos para a fase paramagnética, como *resonating-valence-bond* (RVB), estado composto de plaquetas, estado dimerizado e ainda um estado híbrido com estruturas dimerizadas e de plaquetas [4–8].

Alguns autores [9–11] argumentaram que a natureza das fases desordenadas em duas dimensões pode estar relacionada com o valor do *spin*. Para

$S = 1$, as fases Néel e colinear foram bastante estudadas, enquanto que pouco se sabe sobre as propriedades da fase desordenada [12,13]. Nesse capítulo, estudaremos esta fase desordenada usando uma representação generalizada SU(3) dos bósons de Schwinger. O hamiltoniano para spin $S = 1$ com interações de segundos vizinhos J_2 numa rede quadrada é dado abaixo,

$$H = \frac{J_1}{2} \sum_{r,\delta} S_r^x S_{r+\delta}^x + S_r^y S_{r+\delta}^y + S_r^z S_{r+\delta}^z \quad (4.1)$$

$$+ \frac{J_2}{2} \sum_{r,d} S_r^x S_{r+d}^x + S_r^y S_{r+d}^y + S_r^z S_{r+d}^z$$

onde a soma $\sum_{r,\delta}$ é sobre os primeiros vizinhos, enquanto que $\sum_{r,d}$ é sobre os segundos vizinhos.

Nosso objetivo é investigar as propriedades dessa fase magneticamente desordenada. Em algumas destas fases existe a possibilidade de quebra de simetria, que não é característico de um líquido de spin. Tal propriedade é geralmente relacionada como uma fase nemática, com ordem quadrupolar, por exemplo. Estas fases foram encontradas no modelo de Heisenberg com spin $S = 1$ com interações biquadráticas, em certos modelos de spin $S = 1/2$ com interações ferro e antiferromagnéticas [1]. Compostos reais de Vanádio ($AA'VO(PO_4)_2$, onde $AA' = Pb, Zn, Sr$ ou Ba) com íons de spin $1/2$, que são sistemas frustrados numa rede quadrada são candidatos a fase nemática não magnética.

4.2 Formalismo dos bósons de Schwinger SU(3)

O formalismo dos bósons de Schwinger SU(2) [14] foi extensamente usado no estudo de sistemas magnéticos. No entanto, ela apresenta alguns problemas como citamos nos nossos resultados no capítulo anterior [7]. Para evitar algumas deficiências desta técnica, Papanicolau [15] derivou uma teoria que é uma generalização SU(3) da teoria de campo médio dos bósons de Schwinger SU(2). Esta nova teoria foi usada por vários autores [16] para tratar sistemas frustrados encontrando bons resultados.

Neste formalismo começamos escolhendo a seguinte base:

$$|x\rangle = i(|1\rangle - |-1\rangle)/\sqrt{2}, \quad |y\rangle = i(|1\rangle + |-1\rangle)/\sqrt{2}, \quad |z\rangle = -i|0\rangle \quad (4.2)$$

onde $|n\rangle$ são auto-estados de S^z , e representando os operadores de spin pelo conjunto de três operadores de bósons t_α ($\alpha = x, y, z$) definidos por

$$t_x^\dagger|\nu\rangle = |x\rangle, \quad t_y^\dagger|\nu\rangle = |y\rangle, \quad t_z^\dagger|\nu\rangle = |z\rangle \quad (4.3)$$

onde $|\nu\rangle$ é o estado de vácuo, e temos o vínculo

$$t_x^\dagger t_x + t_y^\dagger t_y + t_z^\dagger t_z = 1 \quad (4.4)$$

para ocupação única em cada sítio. Essa condição é chamada de caroço duro mesmo se as partículas são bósons. Em termos dos operadores t podemos escrever as componentes de spin na forma

$$S^x = -i(t_y^\dagger t_z - t_z^\dagger t_y), \quad S^y = -i(t_x^\dagger t_z - t_z^\dagger t_x), \quad S^z = -i(t_x^\dagger t_y - t_y^\dagger t_x) \quad (4.5)$$

Os estados $t_x^\dagger|\nu\rangle$ e $t_y^\dagger|\nu\rangle$, ambos consistem de $S^z = \pm 1$ autoestados e tem média $\langle S^z \rangle = 0$. Esta propriedade preserva a desordem do estado fundamental.

Wang *et al.* [17] obtiveram a mesma representação partindo da representação do Bond Operator para spin $S = 1/2$, proposto por Sachdev e Bhatt [18].

Para estudar a fase desordenada é conveniente introduzir outros dois operadores de bósons u^\dagger e d^\dagger dados por [17]:

$$u^\dagger = -\frac{1}{\sqrt{2}}(t_x^\dagger + it_y^\dagger) \quad (4.6)$$

$$d^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(t_x^\dagger - it_y^\dagger) \quad (4.7)$$

sendo

$$|1\rangle = u^\dagger|\nu\rangle, \quad |0\rangle = t_z^\dagger|\nu\rangle, \quad |-1\rangle = d^\dagger|\nu\rangle \quad (4.8)$$

com o vínculo $u^\dagger u + d^\dagger d + t_z^\dagger t_z = 1$. Os operadores de spin podem ser escritos agora na forma

$$S^+ = \sqrt{2} (t_z^\dagger d + u^\dagger t_z), \quad S^- = \sqrt{2} (d^\dagger t_z + t_z^\dagger u), \quad S^z = u^\dagger u - d^\dagger d \quad (4.9)$$

Wang *et al.* [17] usaram este formalismo para estudar o estado fundamental desordenado do modelo de Heisenberg unidimensional isotrópico e seus resultados estão em bom acordo com estudos analíticos e numéricos. Seguindo esta referência, supomos que os bósons t_z estão condensados na fase paramagnética, isto é, $\langle t_z \rangle = \langle t_z^\dagger \rangle = t$. A função de onda do estado fundamental é dada por

$$|\Omega\rangle = c \exp \left(\sum_n t_{nz}^\dagger t_{nz} + \sum_k f_k u_k^\dagger d_{-k}^\dagger \right) |\nu\rangle \quad (4.10)$$

onde c é o fator de normalização. Lembramos que a equação (4.10) é similar ao estado RVB.

Então substituindo as representações acima na equação(4.1) obtemos

$$\begin{aligned} H &= \frac{J_1}{2} \sum_{r,\delta} \left[t^2 \left(d_r^\dagger d_{r+\delta} + u_{r+\delta}^\dagger u_r + u_r d_{r+\delta} + d_r^\dagger u_{r+\delta}^\dagger + H.c. \right) \right] \quad (4.11) \\ &+ \frac{J_1}{2} \sum_{r,\delta} (u_r^\dagger u_r - d_r^\dagger d_r) \left(u_{r+\delta}^\dagger u_{r+\delta} - d_{r+\delta}^\dagger d_{r+\delta} \right) \\ &+ \frac{J_2}{2} \sum_{r,d} \left[t^2 \left(d_r^\dagger d_{r+d} + u_{r+d}^\dagger u_r + u_r d_{r+d} + d_r^\dagger u_{r+d}^\dagger + H.c. \right) \right] \\ &+ \frac{J_2}{2} \sum_{r,d} (u_r^\dagger u_r - d_r^\dagger d_r) \left(u_{r+d}^\dagger u_{r+d} - d_{r+d}^\dagger d_{r+d} \right) \\ &- \sum_r \mu_r (u_r^\dagger u_r + d_r^\dagger d_r + t^2 - 1) \end{aligned}$$

A invariância de translação no problema implica que assumimos $\mu_r = \mu$. Isto é, substituímos o vínculo local por um global, mas μ ainda depende da temperatura. Os termos de quatro operadores que aparecem no hamiltoniano acima são desacoplados e, portanto, precisamos de mais uma aproximação. Para fazer isto, usamos o desacoplamento de campo médio padrão, tomando $\langle d_r^\dagger u_{r+\delta}^\dagger \rangle = \langle d_r u_{r+\delta} \rangle = p$, $\langle d_r^\dagger u_{r+d}^\dagger \rangle = \langle d_r u_{r+d} \rangle = \tilde{p}$. Por exemplo, para o termo em J_1 este desacoplamento leva a

$$\begin{aligned}
& (u_r^\dagger u_r - d_r^\dagger d_r) \left(u_{r+\delta}^\dagger u_{r+\delta} - d_{r+\delta}^\dagger d_{r+\delta} \right) = \frac{1}{2}(1-t^2) \\
& \times \left(u_r^\dagger u_r + u_{r+\delta}^\dagger u_{r+\delta} + d_r^\dagger d_r + d_{r+\delta}^\dagger d_{r+\delta} \right) - p(u_r d_{r+\delta} + d_r u_{r+\delta} + H.c.) \\
& \qquad \qquad \qquad - \frac{1}{2}(1-t^2)^2 + 2p^2
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Desta maneira obtemos uma expressão similar para o termo J_2 substituindo p por \tilde{p} . Após fazer a transformada de Fourier seguida da transformação de Bogoliubov dada por [19,20]

$$u_k = \xi_k \alpha_k - \rho_k \beta_k^\dagger, \quad d_k = \xi_k \beta_{-k} - \rho_k \alpha_{-k}^\dagger \tag{4.13}$$

com

$$\xi_k^2 = \frac{\Lambda_k + \omega_k}{2\omega_k}, \quad \rho_k^2 = \frac{\Lambda_k - \omega_k}{2\omega_k} \tag{4.14}$$

encontramos o hamiltoniano na forma diagonalizada

$$H = \sum_k \omega_k \left(\alpha_k^\dagger \alpha_k + \beta_k^\dagger \beta_k \right) + \sum_k (\omega_k - \Lambda_k) + C \tag{4.15}$$

onde

$$\omega_k = \sqrt{\Lambda_k^2 - \Delta_k^2} \tag{4.16}$$

$$\Lambda_k = A + 4t^2(\gamma_k + \eta\tilde{\gamma}_k), \quad A = -\mu + 2(1+\eta)(1-t^2) \tag{4.17}$$

$$\Delta_k = 4t^2(\gamma_k + \eta\tilde{\gamma}_k) - 4(p\gamma_k + \eta\tilde{p}\tilde{\gamma}_k) \tag{4.18}$$

$$\gamma_k = \frac{1}{2}(\cos k_x + \cos k_y), \quad \tilde{\gamma}_k = \cos k_x \cos k_y \tag{4.19}$$

e

$$C = \mu N(1-t^2) - N(1+\eta)(1-t^2)^2 + 4N(p^2 + \tilde{p}^2) \tag{4.20}$$

A energia por sítio do estado fundamental é dada por:

$$E_g = \frac{1}{N} \sum_k (\omega_k - \Lambda_k) + \frac{C}{N} \tag{4.21}$$

A energia livre de Gibbs pode ser escrita como

$$G = NE_g - \frac{2}{\beta} \sum_k \ln(1 + n_k) \quad (4.22)$$

onde

$$n_k = 1/(\exp \beta \omega_k - 1) \quad (4.23)$$

Minimizando a energia livre de Gibbs em relação aos parâmetros de campo médio t^2 , μ , p e \tilde{p} , obtemos o seguinte conjunto de equações auto-consistentes acopladas

$$t^2 = 2 - \frac{1}{N} \sum_k \frac{\Lambda_k}{\omega_k} \coth\left(\frac{\beta \omega_k}{2}\right), \quad (4.24)$$

$$\mu = \frac{4}{N} \sum_k \left(\frac{\Lambda_k - \Delta_k}{\omega_k}\right) (\gamma_k + \eta \tilde{\gamma}_k) \coth\left(\frac{\beta \omega_k}{2}\right), \quad (4.25)$$

$$p = -\frac{1}{2N} \sum_k \frac{\Delta_k \gamma_k}{\omega_k} (\gamma_k + \eta \tilde{\gamma}_k) \coth\left(\frac{\beta \omega_k}{2}\right), \quad (4.26)$$

e

$$\tilde{p} = -\frac{1}{2N} \sum_k \frac{\Delta_k \tilde{\gamma}_k}{\omega_k} (\gamma_k + \eta \tilde{\gamma}_k) \coth\left(\frac{\beta \omega_k}{2}\right). \quad (4.27)$$

Cálculos numéricos mostram que à temperatura nula, p e \tilde{p} são pequenos e podem ser desprezados. Então, o conjunto de equações passa a ser (apêndice B)

$$\mu = \frac{4}{y} [I_2(y) - I_1(y)] \quad , \quad t^2 = 2 - \frac{1}{2} [I_1(y) + I_2(y)] \quad (4.28)$$

com

$$I_1(y) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{d^2 k}{\sqrt{1 + yg(k)}} \quad (4.29)$$

$$I_2(y) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi d^2 k \sqrt{1 + yg(k)} \quad (4.30)$$

$$y = 8t^2/A \quad , \quad g(k) = \gamma_k + \eta \tilde{\gamma}_k \quad (4.31)$$

Uma equação para y pode ser obtida na forma

$$\frac{16}{y} + 2(1 + \eta) - (1 + \eta)I_2(y) - \left[\frac{8}{y} + (1 + \eta) \right] I_1(y) = 0 \quad (4.32)$$

Para cada η , calculamos o valor de y resolvendo esta equação. Desta maneira encontramos que a equação (4.32) tem solução somente para uma faixa de valores $\eta_{1c} < \eta < \eta_{2c}$, onde temos um gap finito em $\vec{k} = (\pi, \pi)$ dado por

$$m = A\sqrt{1 + y(-1 + \eta)} \quad (4.33)$$

Como já bem conhecido, se existe um *gap* no espectro de excitação, o estado fundamental do modelo de Heisenberg deve ser desordenado. Quando $\eta < \eta_{1c}$, o gap se anula e o sistema entra na fase do tipo Néel. Para $\eta > \eta_{2c}$, o sistema entra na fase colinear que possui também *gap* nulo. Tanto a fase Néel quanto a fase Colinear são caracterizadas por quebra espontânea de simetria. A primeira (Néel) tem magnetização *staggered* não nula, enquanto que a segunda (Colinear) tem magnetização não nula ao longo do eixo x [6]. Neste trabalho nós não estamos interessados nestas fases.

Como apontado por Wang *et al.* [17], a aproximação que tomamos dos bósons t_z condensados, parece representar fisicamente o estado $S^z = 0$ de um spin $S = 1$. No entanto, quando $\langle t_z \rangle < 1$, a condensação de t_z não significa que cada spin está no auto-estado de $S^z = 0$, apesar de $\langle \sum_n S_n^z \rangle = 0$.

A questão que nos interessa é se, a fase desordenada estudada aqui é realmente um fase do tipo líquido de spin sem quebra de simetria. Uma possibilidade é a fase sem ordem magnética, que no entanto, quebra a simetria de rotação do spin, em virtude de um parâmetro de ordem mais complicado [21]. Esta fase é geralmente chamada de fase nemática. Aqui estamos interessados no operador de quadrupolo dado por:

$$Q_n = (S_n^z)^2 - \frac{2}{3} \quad (4.34)$$

que descreve a anisotropia de flutuações de spin. Neste caso, a fase nemática é caracterizada por $\langle Q_n \rangle \neq 0$. Para mais detalhes sobre a fase nemática consulte a referência [21].

Usando a relação

$$S_q^z = \sum_k \left(u_{q-k}^\dagger u_k - d_{q-k}^\dagger d_k \right) \quad (4.35)$$

e a equação (4.13), obtemos o fator de estrutura estático que é dado por:

$$\langle S_q^z S_{-q}^z \rangle = 2 \sum_k \left(\xi_k^2 \rho_{q-k}^2 - \xi_k \rho_k \xi_{q-k} \rho_{q-k} \right) \quad (4.36)$$

Usando agora a equação (4.14) ficaremos

$$\langle S_q^z S_{-q}^z \rangle = \frac{1}{2} \sum_k \frac{1}{\omega_k \omega_{q-k}} [(\omega_k + \Lambda_k) (\Lambda_{q-k} - \omega_{q-k}) - \Delta_k \Delta_{q-k}] \quad (4.37)$$

O fator de estrutura estático quadrupolar é dado por

$$S_q^Q = \langle Q_q Q_{-q} \rangle \quad (4.38)$$

onde Q_q é a transformada de Fourier de Q_n definida na equação (4.34). Para o operador de quatro termos em $(S_n^z)^2$ simplificamos a expressão usando a condição de ocupação única da relação de vínculo [17]. Por exemplo, temos $u^\dagger u = 1$ ou 0, então $(u^\dagger u)^2 = u^\dagger u$ e $u^\dagger u d^\dagger d = 0$. Logo, $(u^\dagger u - d^\dagger d)^2 = u^\dagger u + d^\dagger d$, como isso podemos escrever:

$$(S_q^z)^2 = \sum_k \left(u_{q-k}^\dagger u_k + d_{q-k}^\dagger d_k \right) \quad (4.39)$$

Após alguns cálculos obtemos

$$\langle (S_q^z)^2 (S_{-q}^z)^2 \rangle = \frac{1}{2} \sum_k \frac{1}{\omega_k \omega_{q-k}} [(\omega_k + \Lambda_k) (\Lambda_{q-k} - \omega_{q-k}) + \Delta_k \Delta_{q-k}] \quad (4.40)$$

A equação (4.38) pode ser reescrita na forma

$$S_q^Q = \langle (S_q^z)^2 (S_{-q}^z)^2 \rangle + \frac{4}{9} - \frac{4}{3} \langle (S_q^z)^2 \rangle \quad (4.41)$$

Todos os termos usados nas equações acima foram definidos nas equações (4.14), (4.16) (4.17) e (4.18). Lembramos que a aproximação de condensação de t_x ou t_y ao invés de t_z não muda os nossos resultados numéricos.

4.3 Resultados

Na figura 4.1 mostramos o *gap* como função de η . O *gap* se anula em $\eta_{1c} = 0.414$ e cai descontinuamente a zero em $\eta_{2c} = 0.564$. Este comportamento é qualitativamente similar a aquele calculado por Isaev [6] para spin $S = 1/2$, onde a fase desordenada está na faixa de $0.414 < \eta < 0.564$. Observamos que o aumento do valor do spin, leva a uma diminuição no tamanho da região da fase desordenada [5]. Isto deveria ser esperado, desde que esta fase é ausente quando $S \rightarrow \infty$. Para $\eta \leq \eta_{1c}$ o sistema está na fase Néel, enquanto que para $\eta \geq \eta_{2c}$ o sistema está na fase Colinear, ambas com *gap* nulo.

Na figura 4.2 mostramos μ como função de η . O máximo está em torno de $\eta = 0.515$. Na figura 4.3 mostramos $\langle (S_n^z)^2 \rangle = 1 - t^2$ como função de η . Usando a equação (4.34) observamos que $\langle Q \rangle \neq 0$ para todos os valores η na fase desordenada, caracterizando uma fase nemática conforme discutimos anteriormente. O parâmetro de ordem $\langle Q \rangle$ alcança um mínimo em torno de $\eta = 0.515$. Lembramos que o antiferromagneto de spin 1 isotrópico [17] tem um estado fundamental desordenado com $\langle Q \rangle = -0.147$. Este é um resultado interessante, porque a partir de um mapeamento para o modelo sigma não linear [22], sabe-se que a fase desordenada do antiferromagneto bidimensional frustrado tem alguma similaridade com o estado fundamental do antiferromagneto de spin 1. Então, ambos os modelos têm indício de existir uma fase nemática. Usando a definição de um verdadeiro líquido de spin proposto por Misguich [23], um sistema com uma ordem nemática não é um líquido de spin.

Para fornecer uma visão qualitativa geral, plotamos na figura 4.4 a relação de dispersão para $\eta = 0.5$. O máximo, como esperado, está localizado em $\vec{k} = (0, 0)$.

O fator de estrutura estático S_q^z é mostrado na figura 4.5 para $T = 0$, se anulando em $\vec{q} = (0, 0)$. Este resultado é consistente com a ausência de ordem de longo alcance. Na figura 4.6 mostramos o fator de estrutura estático quadrupolar S_q^Q . Podemos observar um pico acentuado para $\vec{q} = (0, 0)$ indicando a presença de ordem de longo alcance nemática.

Conforme apontado por Li *et al.* [16], uma teoria de campo médio não pode ser conclusiva por si só, portanto, outros métodos para o mesmo pro-

blema são necessários para comprovação dos resultados. Então, na figura 4.7 mostramos a energia do estado fundamental E_g como função de η , tal que resultados futuros usando outras aproximações possam ser comparados com nossos resultados para ver qual fornece a menor energia. O máximo de E_g está em torno de $\eta = 0.515$. Este comportamento é também similar ao encontrado para o caso de spin $S = 1/2$ [6].

Apesar de no momento não existir algum material conhecido que tenha fase paramagnética do modelo bidimensional $J_1 - J_2$ para $S = 1$, no futuro medidas do fator de estrutura quadrupolar podem ser usados para identificar a fase nemática proposta neste trabalho.

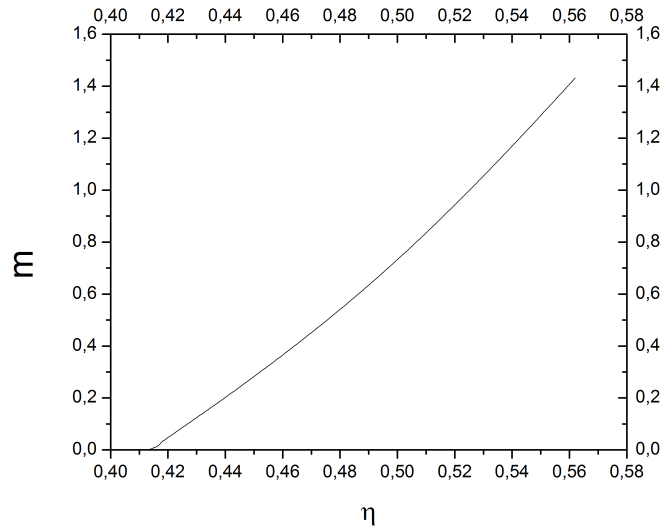


Figura 4.1: O *gap* na fase paramagnética como função de η .

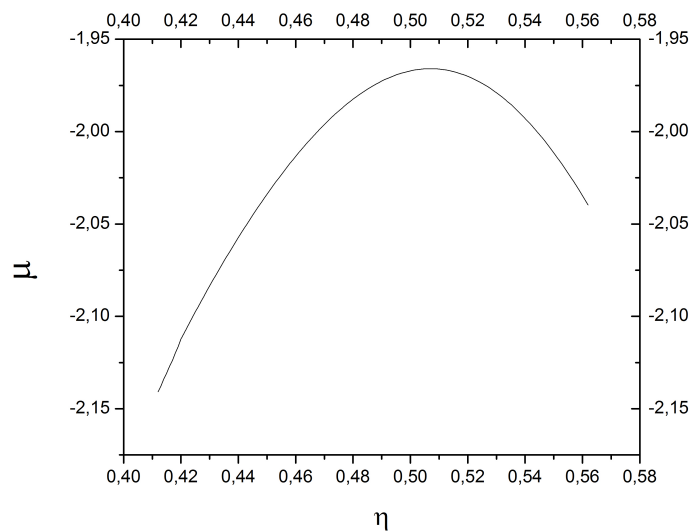


Figura 4.2: O parâmetro μ na fase paramagnética como função de η .

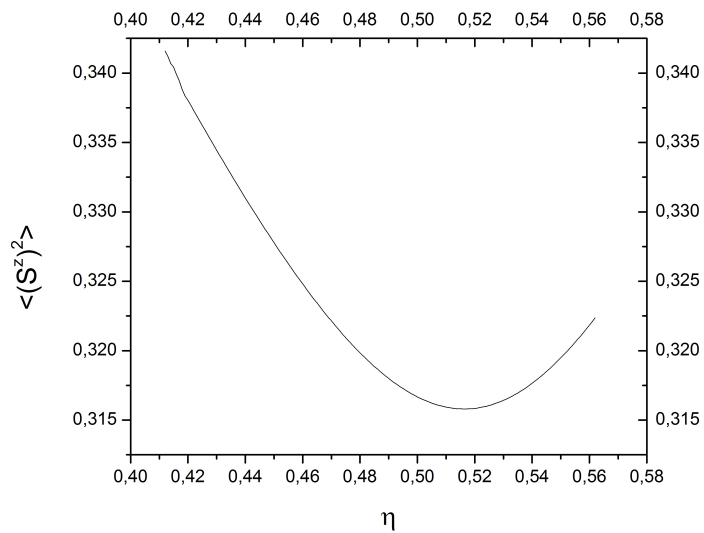


Figura 4.3: $\langle (S^z)^2 \rangle$ na fase paramagnética como função de η .

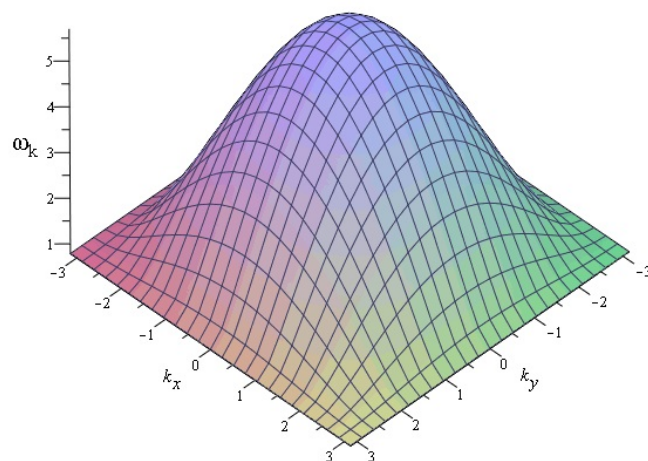


Figura 4.4: A relação de dispersão ω_k na fase paramagnética para um valor de $\eta = 0.5$

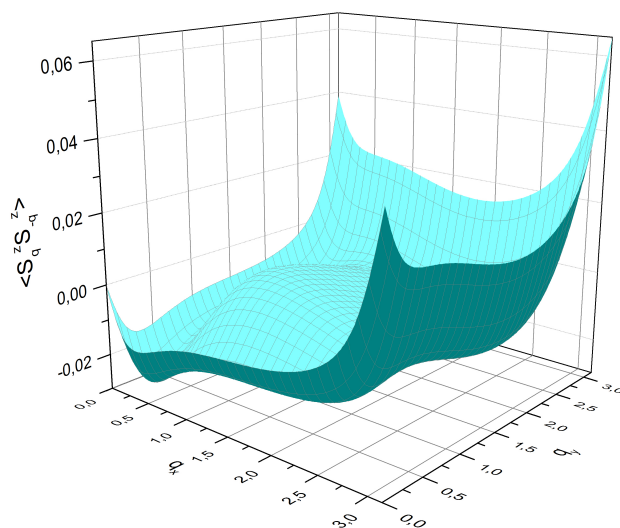


Figura 4.5: O fator de estrutura estático a temperatura zero para um valor de $\eta = 0.5$.

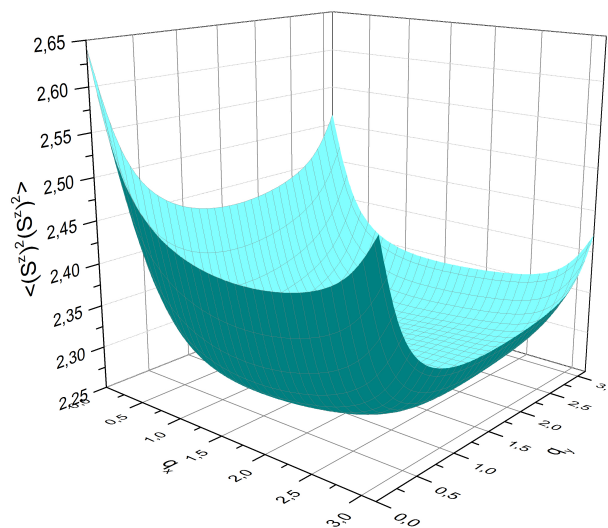


Figura 4.6: O fator de estrutura estático quadrupolar a temperatura zero para um valor de $\eta = 0.5$

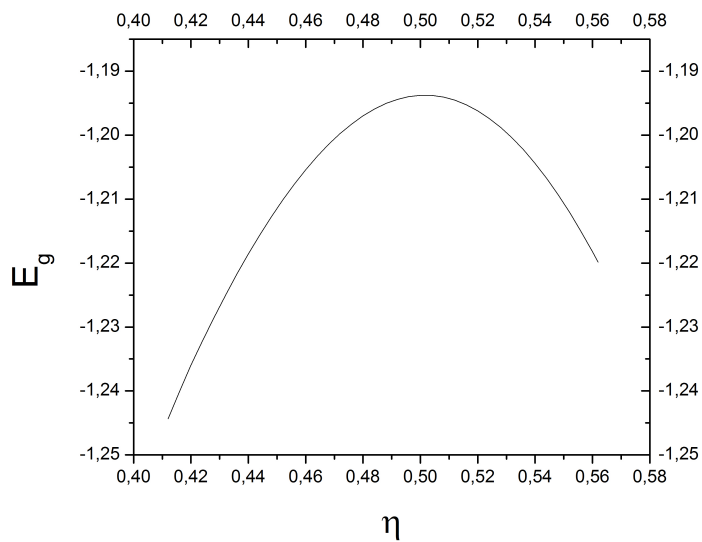


Figura 4.7: A energia do estado fundamental E_g como função de η .

Referências Bibliográficas

- [1] **C. Lacroix, P. Mendels, F. Mila** *Introduction to Frustrated Magnetism* Springer Series in Solid State Sciences, New York (2011).
 - [2] **G. Misguichi and C. Lhuillier** *Frustrated Spin Systems* (ed. H. T. Diep - World Scientific) (2005).
 - [3] **S. Gardner** *J. Phys.: Condens. Matter* Guest editor, special issue **23** (2011).
 - [4] **K. Takano, Y. Kito, Y. Ono, and K. Sano** *Phys. Rev. Lett.* **91**, 197202 (2003).
 - [5] **Moukouri** *Phys. Rev. Lett.* **A352**, 256 (2006).
 - [6] **L. Isaev, G. Ortiz, and J. Dukelsky** *Phys. Rev. B* **79**, 024409 (2009).
 - [7] **H. C. Jiang, F. Kruger, J. E. Moore, D. N. Sheng, J. Zaanen, and Z. Y. Weng** *Phys. Rev. B* **79**, 174409 (2009).
 - [8] **.Gotze, S. E. Kruger, F. Fleck, J. Schulenburg, and J. Richter** *arXiv.1205.0681* [cond.mat.].
 - [9] **F. D. M. Haldane** *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1025 (1981).
 - [10] **I. Affleck** *Phys. Rev. B* **37**, 5186 (1988).
 - [11] **N. Read and S. Sachdev** *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1694 (1989).
 - [12] **S. Moukouri** *J. Stat. Mech. PO*, 2002 (2006).
-

-
- [13] **R. F. Bishop, P. H. Y. Li, R. Darradi and J. Richter** *Europhys. Lett.* **83**, 47004 (2008).
- [14] **A. Auerbach and D. P. Arovas** *Phys. Rev. B* **38**, 316 (1988).
- [15] **N. Papanicolaou** *Nucl. Phys. B* **305**, 367 (1988).
- [16] **P. Li, G. M. Zhang. S. Q. Shen** *Phys. Rev. B* **75**, 104420 (2011).
- [17] **H. T. Wang, J. L. Shen, Z. B. Su** *Phys. Rev. B* **56**, 14435 (1997).
- [18] **S. Sachdev and R. N. Bhatt** *Phys. Rev. B* **41**, 9323 (1990).
- [19] **H. T. Wang and Y. Wang** *Phys. Rev. B* **71**, 104429 (2005).
- [20] **H. T. Wang and Y. Wang** *Physica A* **373**, 387 (2007).
- [21] **K. Perc and A. M. Lauchli** *Introduction to Frustrated Magnetism* edited by C. Lacroix, P. Mendels and F. Mila (Spinger, Berlin 2011) pp. 331-360.
- [22] **S. Sachdev** *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1999).
- [23] **G. Misguich** *Introduction to Frustrated Magnetism* edited by C. Lacroix, P. Mendels and F. Mila (Spinger, Berlin 2011) pp. 407-435.
-

Capítulo 5

Conclusões

Neste trabalho, estudamos o efeito de interações competitivas e anisotropias de alguns modelos de Heisenberg. Utilizamos metodologias diferentes, adequadas a cada tipo de problema. Utilizamos a aproximação harmônica auto-consistente e teoria dos bósons de Schwinger introduzida por Arovav e Auerbach.

O primeiro sistema estudado foi o modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin $S = 1$ quase bidimensional numa rede quadrada. Neste problema utilizamos a aproximação harmônica auto-consistente, que é uma boa metodologia para analisar a transição KT. A principal conclusão obtida foi que, existe uma fase desordenada a temperatura zero, que separa duas outras fases ordenadas. Esta fase desordenada é uma possível candidata a fase líquido de spin, porém outros métodos precisam ser aplicados ao problema para se ter uma conclusão mais definitiva. Em nossos cálculos a região desta fase é estreita, mas ainda assim está presente e acreditamos que isso seja um artifício causado pela técnica.

O segundo sistema estudado foi o modelo de Heisenberg ferrimagnético em uma e duas dimensões com interações competitivas, onde foi usado o método dos bósons de Schwinger. Esta técnica já foi aplicada com sucesso ao modelo sem interações competitivas. Diferente do caso antiferromagnético unidimensional em $T = 0$, o modelo ferrimagnético tem ordem de longo alcance. Esta ordem é resultado da condensação dos bósons de Schwinger. As magnetizações das subredes dependem diretamente deste fator. No mo-

delo unidimensional estudado, a principal conclusão obtida foi que, a fase ferrimagnética persiste até um valor de η_c que depende do valor da dimerização. No modelo bidimensional, existem três estados fundamentais que dependem diretamente das interações entre segundos vizinhos. Analisamos somente a fase ferrimagnética e calculamos o *gap*, a energia livre entre outras quantidades.

Estudamos ainda o modelo de Heisenberg antiferromagnético $J_1 - J_2$ na rede quadrada. Utilizamos a teoria dos bósons de Schwinger $SU(3)$ para analisar a fase desordenada deste modelo. Esta fase paramagnética não tem ordem de spin, mas segundo nossos cálculos, existe uma fase nemática caracterizada por um fator de estrutura quadrupolar. Nossa principal conclusão foi que a existência desta ordem de quadrupolo indica que esta fase não é do tipo líquido de spin. No entanto, outros métodos precisam ser aplicados ao problema para que possamos comparar com os obtidos neste trabalho, e dar um resultado mais conclusivo. Estes três trabalhos foram submetidos a revistas de divulgação da área em questão e foram aceitos para publicação.

Estamos trabalhando ainda em um modelo antiferromagnético bidimensional com interações biquadráticas para estudar a fase nemática. Estamos na fase do tratamento numérico do problema e esperamos que em breve possamos concluir mais este trabalho.

Apêndice A

Cálculo das magnetizações das sub-redes e Fator de estrutura

Começamos pelo cálculo de $\langle S^z \rangle$ para as duas subredes. A representação dos bósons de Schwinger é dada por

$$S_{1n}^z = \frac{1}{2} (a_n^\dagger a_n - b_n^\dagger b_n) \quad (\text{A.1})$$

$$S_{2n}^z = \frac{1}{2} (c_n^\dagger c_n - d_n^\dagger d_n) \quad (\text{A.2})$$

Tomando a transformada de Fourier das equações acima, nós obtemos:

$$S_{1n}^z = \frac{1}{2N} \sum_k (a_k^\dagger a_k - b_k^\dagger b_k) \quad (\text{A.3})$$

$$S_{2n}^z = \frac{1}{2N} (c_k^\dagger c_k - d_k^\dagger d_k) \quad (\text{A.4})$$

Nós substituímos os operadores pelas transformações dada pela equação (3.20). Faremos primeiramente para S_1 , e depois para S_2 apenas consideraremos os mesmos procedimentos.

$$\begin{aligned} S_1^z &= \frac{1}{2N} \sum_k (\mu_2 \beta_k^\dagger - \nu_2 \tilde{\alpha}_{-k}) (\mu_2 \beta_k - \nu_2 \tilde{\alpha}_{-k}^\dagger) \\ &\quad - \frac{1}{2N} \sum_k (\nu_1 \alpha_{-k} + \mu_1 \tilde{\beta}_k^\dagger) (\nu_1 \alpha_{-k}^\dagger + \mu_1 \tilde{\beta}_k) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Tomando a média da expressão acima teremos

$$\langle S_1^z \rangle = \frac{1}{2N} \sum_k [\mu_2^2 n_\beta + (1 + \nu_2^2) n_{\tilde{\alpha}} + (1 + \nu_1^2) n_\alpha + \mu_2^2 n_{\tilde{\beta}}] \quad (\text{A.6})$$

onde $n = 1/(e^{\beta\omega} - 1) = \frac{1}{2} [\coth(\frac{\beta\omega}{2}) - 1]$. Tomamos o limite $T \rightarrow 0$, e contamos a condensação dos bósons em $k = 0$. Termos para $k \neq 0$ neste limite são nulos. Como havíamos comentado anteriormente, a ordem de longo alcance é resultado da condensação dos bósons de Schwinger, sendo que a magnetização das subredes só tem contribuição deste termo. Finalmente obtemos a magnetização da subrede S_1 que é dada por:

$$\langle S_1^z \rangle = \frac{1}{2N} \mu_1^2 n_\beta |_{T \rightarrow 0, k=0}. \quad (\text{A.7})$$

A forma final é dada por

$$\langle S_1^z \rangle = \frac{1}{4} \left[1 + \frac{h+1}{\sqrt{(h+1)^2 - \sigma^2}} \right]$$

Fazendo os mesmos procedimentos para a subrede S_2 , nós obtivemos

$$\langle S_2^z \rangle = \frac{1}{4} \left[1 - \frac{h+1}{\sqrt{(h+1)^2 - \sigma^2}} \right] \quad (\text{A.10})$$

A.1 Cálculo do Fator de Estrutura

Nesta seção nós apresentamos a expressão para o fator de estrutura dinâmico seguindo o procedimento de Auerbach e Arovás

$$S_{1n}^x = \frac{1}{2} (a_n^\dagger b_n + a_n b_n^\dagger) \quad (\text{A.11})$$

$$S_{1n}^y = \frac{1}{2i} (a_n^\dagger b_n - a_n b_n^\dagger) \quad (\text{A.12})$$

Podemos escrever a transformada de Fourier dos termos acima como

$$S_q^x = \sum_n e^{iqn} S_n^x \quad (\text{A.13})$$

ou ainda

$$S_q^x = \sum_n \frac{1}{2} e^{iqn} (a_n^\dagger b_n + a_n b_n^\dagger) \quad (\text{A.14})$$

Transformando os operadores como $a_n = \sum_k e^{ikn} a_k$, nós teremos

$$S_q^x = \frac{1}{2} \sum_{n,k,k'} \left[e^{i(q+k'-k)n} a_k^\dagger b_{k'} + e^{i(q+k-k')n} a_k b_{k'}^\dagger \right] \quad (\text{A.15})$$

Nós procedemos da mesma maneira para S_{1n}^y , obtendo

$$S_q^x = \frac{1}{2} \sum_k \left[a_k^\dagger b_{k-q} + a_k b_{k+q}^\dagger \right] \quad (\text{A.16})$$

$$S_q^y = \frac{1}{2i} \sum_k \left[a_k^\dagger b_{k-q} - a_k b_{k+q}^\dagger \right] \quad (\text{A.17})$$

Agora utilizamos as transformações de bogoliubov dadas no capítulo 3, equação 20, e então podemos escrever

$$\begin{aligned} S_q^x &= \frac{1}{2} \sum_k \left[\mu_{1,k} \mu_{2,k-q} \alpha_k^\dagger \tilde{\alpha}_{k-q} - \mu_{1,k} \nu_{2,k-q} \alpha_k^\dagger \beta_{q-k}^\dagger + \nu_{1,k} \mu_{2,k-q} \tilde{\beta}_k \tilde{\alpha}_k^\dagger \right] \quad (\text{A.18}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_k \left[-\nu_{1,k} \nu_{2,k-q} \tilde{\beta}_k \beta_{q-k}^\dagger + \nu_{1,k} \nu_{2,k+q} \alpha_k \tilde{\alpha}_{k+q}^\dagger - \nu_{1,k} \mu_{2,k+q} \alpha_k \beta_{k+q} \right] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_k \left[\nu_{1,k} \mu_{2,k+q} \tilde{\beta}_k^\dagger \tilde{\alpha}_{k+q}^\dagger - \nu_{1,k} \nu_{2,k+q} \tilde{\beta}_k^\dagger \beta_{k+q}^\dagger \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S_q^y &= \frac{1}{2i} \sum_k \left[-\mu_{1,k} \nu_{2,k-q} \alpha_k^\dagger \beta_{k-q}^\dagger + \mu_{1,k} \mu_{2,k-q} \alpha_k^\dagger \tilde{\alpha}_{q-k}^\dagger - \nu_{1,k} \nu_{2,k-q} \tilde{\beta}_k \beta_{k-q}^\dagger \right] \quad (\text{A.19}) \\ &+ \frac{1}{2i} \sum_k \left[\nu_{1,k} \mu_{2,k-q} \tilde{\beta}_k \tilde{\alpha}_{q-k} + \mu_{1,k} \nu_{2,k+q} \alpha_k \beta_{k+q} - \mu_{1,k} \mu_{2,k+q} \alpha_k \tilde{\alpha}_{k+q} \right] \\ &+ \frac{1}{2i} \sum_k \left[\nu_{1,k} \nu_{2,k+q} \tilde{\beta}_k^\dagger \beta_{k+q}^\dagger - \nu_{1,k} \mu_{2,k+q} \tilde{\beta}_k^\dagger \tilde{\alpha}_{k+q}^\dagger \right] \end{aligned}$$

Nós consideramos que os operadores evoluem no tempo como $\alpha_q(t) = e^{-i\omega_q t}$. Com isso nós escrevemos os termos $S_{-q}^x(t)$ e $S_{-q}^y(t)$. Tomamos a média dada por

$$\langle S_{-q}^{\perp}(t)S_q^{\perp}(0) \rangle = \langle S_{-q}^x(t)S_q^x(0) + S_{-q}^y(t)S_q^y(0) \rangle \quad (\text{A.20})$$

Ao final do procedimento algébrico extenso, nós tomamos a transformada de Fourier do termo acima.

$$S^{\perp}(q, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle S_{-q}^{\perp}(t)S_q^{\perp}(0) \rangle dt \quad (\text{A.21})$$

e obtivemos como resultado a equação (3.61). O termo de S^z não contribui para o cálculo quando $\omega > 0$.

Apêndice B

Cálculo do Operador de Quadrupolo e Fator de Estrutura

Uma quantidade de interesse é o cálculo do fator de estrutura quadrupolar definido na equação (4.38).

$$\langle [(S_q^z)^2 - 2/3][(S_{-q}^z)^2 - 2/3] \rangle = \langle (S_q^z)^2 (S_{-q}^z)^2 \rangle - 4/3 \langle (S_q^z)^2 \rangle + \frac{9}{4} \quad (\text{B.1})$$

Nós começamos utilizando a equação (4.39)

$$(S_q^z)^2 = \sum_k \left(u_{q-k}^\dagger u_k + d_{q-k}^\dagger d_k \right) \quad (\text{B.2})$$

para calcular

$$(S_q^z)^2 (S_{-q}^z)^2 = \sum_{k,k'} \left(u_{q-k}^\dagger u_k + d_{q-k}^\dagger d_k \right) \left(u_{q+k'}^\dagger u_{k'} + d_{q+k'}^\dagger d_{k'} \right) \quad (\text{B.3})$$

Nós substituímos (4.13) na expressão acima, e calculamos a média no limite $T \rightarrow 0$. Obtemos

$$\langle (S_q^z)^2 (S_{-q}^z)^2 \rangle = 2 \sum_k [\xi_k^2 + \rho_{k-q}^2 + \xi_{k-q} \rho_{k-q} \xi_k \rho_k] \quad (\text{B.4})$$

O termo $\langle (S_q^z)^2 \rangle$ tem contribuição dada por

$$\langle (S_q^z)^2 \rangle = \sum_k [\xi_{k-q} \xi_k + 2\rho_{k-q} \rho_k] \quad (\text{B.5})$$

Para o cálculo do fator de estrutura nós começamos com

$$S_q^z = \sum_n e^{-iqn} S_n^z \quad (\text{B.6})$$

Tomando as transformadas de Fourier, como por exemplo, $u_n = \sum_k e^{ikn} u_k$, nós obtemos

$$S_q^z = \sum_k \left(u_{k-q}^\dagger u_k - d_{k-q}^\dagger d_k \right) \quad (\text{B.7})$$

No limite $T \rightarrow 0$ nós obtemos

$$\langle S_q^z S_{-q}^z \rangle = 2 \sum_k [\xi_k^2 \rho_{k-q}^2 - \xi_k \xi_{k-q} \rho_k \rho_{k-q}] \quad (\text{B.8})$$

Lista de Figuras

1.1	Estado de dois elétrons que acoplam ferromagneticamente. Figura obtida da referência [7]	3
1.2	Estado de dois elétrons que acoplam antiferromagneticamente. Figura obtida da referência [7]	3
1.3	Spins interagindo antiferromagneticamente entre primeiros ($J_1 > 0$) e segundos ($J_2 > 0$) vizinhos.	8
1.4	Spins do tipo Ising interagindo antiferromagneticamente $J > 0$	9
2.1	a) Estado fundamental Antiferromagnético b) Estado fundamental Colinear(colunas).	15
2.2	Comportamento do parâmetro crítico D_c como função de η para para o modelo XY com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = \alpha = 0$) obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.	21
2.3	Comportamento do parâmetro crítico D_c como função de η para o modelo de Heisenberg antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = 1, \alpha = 0$) obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.	22
2.4	Comportamento do parâmetro crítico D_c como função de η para o modelo XY antiferromagnético com spin-1 numa rede cúbica simples ($\lambda = 0, \alpha = 1$) obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.	22

2.5	Comportamento da temperatura crítica como função de η para o modelo XY antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = \alpha = 0$) obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.	23
2.6	Comportamento da temperatura crítica com função de D para o modelo XY antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = \alpha = 0$) obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.	23
2.7	Comportamento da temperatura crítica como função de D para o modelo XY antiferromagnético com spin-1 ($\lambda = 0$, $\eta = 0.4$) obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.	24
2.8	Comportamento da temperatura crítica como função de η para o modelo de Heisenberg antiferromagnético com spin-1 na rede quadrada ($\lambda = 1$, $\alpha = 0$) obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.	24
2.9	Comportamento da energia interna por spin em função da temperatura para o modelo de Heisenberg antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = 1$, $\alpha = 0$) para $D/J_1 = 6$ obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.	25
2.10	Comportamento da energia interna por spin em função da temperatura para o modelo XY antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = \alpha = 0$) para $D/J_1 = 6$ obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.	26
2.11	Comportamento do calor específico em função da temperatura para o modelo de Heisenberg antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = 1$, $\alpha = 0$) para $D/J_1 = 6$ obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.	27
2.12	Comportamento do calor específico em função da temperatura para o modelo XY antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = \alpha = 0$) para $D/J_1 = 6$ obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.	28

2.13	Comportamento da entropia por spin em função da temperatura para o modelo de Heisenberg antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = 1, \alpha = 0$) para $D/J_1 = 6$ obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.	29
2.14	Comportamento da entropia por spin em função da temperatura para o modelo XY antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = \alpha = 0$) para $D/J_1 = 6$ obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.	30
2.15	Comportamento da energia livre por spin em função da temperatura para o modelo de Heisenberg antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = 1, \alpha = 0$) para $D/J_1 = 6$ obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.	31
2.16	Comportamento da energia livre por spin em função da temperatura para o modelo XY antiferromagnético com spin-1 numa rede quadrada ($\lambda = \alpha = 0$) para $D/J_1 = 6$ obtido pelo método da aproximação harmônica auto-consistente.	32
3.1	A figura obtida da referência [18], ilustra os três estados do modelo de Heisenberg ferrimagnético bidimensional. O estado clássico ferrimagnético (F), o estado inclinado (C), e o estado colinear (N).	36
3.2	Solução de Λ_1 em função de η para diferentes valores de δ	49
3.3	Solução de Λ_2 em função de η para diferentes valores de δ	49
3.4	Solução de h em função de η para diferentes valores de δ	50
3.5	Solução de σ em função de η para diferentes valores de δ	50
3.6	Gap do ramo antiferromagnético em função de η para diferentes valores de δ	51
3.7	Energia livre (por sítio) do estado fundamental em função de η para diferentes valores de δ	51
3.8	Magnetização das subredes em função de η para diferentes valores de δ . As curvas superiores correspondem à subrede S_1 , e as inferiores à subrede S_2 , do modelo de Heisenberg dimerizado unidimensional.	52

3.9	Solução de Λ_1 em função de η para o modelo de Heisenberg ferrimagnético frustrado numa rede quadrada.	52
3.10	Solução de Λ_2 em função de η para o modelo de Heisenberg ferrimagnético frustrado numa rede quadrada.	53
3.11	Solução de h em função de η para o modelo de Heisenberg ferrimagnético frustrado numa rede quadrada.	53
3.12	Solução de σ em função de η para o modelo de Heisenberg ferrimagnético frustrado numa rede quadrada.	54
3.13	Gap do ramo antiferromagnético em função de η para o modelo de Heisenberg ferrimagnético frustrado numa rede quadrada.	54
3.14	Energia livre (por sítio) do estado fundamental em função de η para o modelo de Heisenberg ferrimagnético frustrado numa rede quadrada.	55
3.15	Magnetização das sub-redes em função de η para o modelo de Heisenberg ferrimagnético frustrado numa rede quadrada.	55
3.16	Fator de estrutura para o caso unidimensional, a temperatura nula, para $q = \pi/8$, $\delta = 0$ e dois valores de η diferentes.	56
3.17	Fator de estrutura para o caso unidimensional, a temperatura nula, para $q = \pi/8$, $\delta = 0.5$ e dois valores de η diferentes.	56
3.18	Fator de estrutura para o caso bidimensional, a temperatura nula, para $\eta = 0$	57
3.19	Fator de estrutura para o caso bidimensional, a temperatura nula, para $\eta = 0.1$	57
4.1	O <i>gap</i> na fase paramagnética como função de η	69
4.2	O parâmetro μ na fase paramagnética como função de η	70
4.3	$\langle (S^z)^2 \rangle$ na fase paramagnética como função de η	70
4.4	A relação de dispersão ω_k na fase paramagnética para um valor de $\eta = 0.5$	71
4.5	O fator de estrutura estático a temperatura zero para um valor de $\eta = 0.5$	71
4.6	O fator de estrutura estático quadrupolar a temperatura zero para um valor de $\eta = 0.5$	72
4.7	A energia do estado fundamental E_g como função de η	72
