

**TRANSIÇÕES DE FASES QUÂNTICAS EM
SISTEMAS DE SPINS EM REDES DE BAIXA
DIMENSIONALIDADE**

SABRINA RUFO DE ALMEIDA

**TRANSIÇÕES DE FASES QUÂNTICAS EM
SISTEMAS DE SPINS EM REDES DE BAIXA
DIMENSIONALIDADE**

Tese apresentada ao Programa de Pós-
-Graduação em Física do Instituto de Ci-
ências Exatas da Universidade Federal de
Minas Gerais como requisito parcial para a
obtenção do grau de Doutor em Física.

ORIENTADOR: PROF. DR. JOÃO ANTONIO PLASCAK
COORIENTADOR: PROF. DR. JOSÉ RICARDO DE SOUSA

Belo Horizonte - MG

Novembro de 2015

© 2015, Sabrina Rufo de Almeida.
Todos os direitos reservados.

Rufo de Almeida, Sabrina

D1234p Transições de fases quânticas em sistemas de spins em redes de baixa dimensionalidade / Sabrina Rufo de Almeida. — Belo Horizonte - MG, 2015
xxii, 118 f. : il. ; 29cm

Tese (doutorado) — Universidade Federal de Minas Gerais

Orientador: Prof. Dr. João Antonio Plascak

1. Transições de Fase Quânticas. 2. Modelo de Heisenberg. 3. Sistemas Frustrados. I. Título.

CDU 519.6*82.10

[Folha de Aprovação]

Quando a secretaria do Curso fornecer esta folha, ela deve ser digitalizada e armazenada no disco em formato gráfico.

Se você estiver usando o `pdflatex`, armazene o arquivo preferencialmente em formato PNG (o formato JPEG é pior neste caso).

Se você estiver usando o `latex` (não o `pdflatex`), terá que converter o arquivo gráfico para o formato EPS.

Em seguida, acrescente a opção `approval={nome do arquivo}` ao comando `\ppgccufmg`.

Se a imagem da folha de aprovação precisar ser ajustada, use:
`approval=[ajuste][escala]{nome do arquivo}`
onde *ajuste* é uma distância para deslocar a imagem para baixo e *escala* é um fator de escala para a imagem. Por exemplo:
`approval=[-2cm][0.9]{nome do arquivo}`
desloca a imagem 2cm para cima e a escala em 90%.

Agradecimentos

Agradeço a minha mãe Maria de Lourdes Alves Rufo, meu pai Paulo Nogueira de Almeida, minha irmã Samantha Rufo de Almeida e minha avó Maria Rufo pelo amor, dedicação e apoio durante toda a caminhada.

Ao meu namorado Griffith Mendonça Andrade Sousa e sua família pela orientação diária, carinho e amizade.

A meu orientador e coorientador, professores João Antônio Plascak e José Ricardo de Sousa pela orientação acadêmica e na vida, discussões físicas, paciência e amizade.

A meus compadres, Maurício e Livia e meu afilhado Lucas pelo carinho sempre apesar da distância.

A meus amigos de Manaus, Suellen Regina, Waleska, José Roberto, Angela, Denise, Rosana, Renata, Flávio, Jão Victor pelos velhos e novos tempos.

A meus amigos em Belo Horizonte Lisangela, Alexandre, Athur, Iana, Diego, Thiago, Juliana, Joelma, Daniel, Luis, Nezilda e Rafael, pelos momentos que compartilhamos.

Aos professores e funcionários da secretária da pos-graduação e biblioteca da UFMG pela ajuda sempre que precisei.

A CNPq e FAPEMIG pelo apoio financeiro.

Agradeço finalmente aqueles que porventura não tenha citado, que contribuíram de forma direta ou indireta para a conclusão deste trabalho.

Resumo

Nesta tese estudamos sistemas de spins em redes de baixa dimensionalidade e em temperatura nula, analisando suas transições de fases quânticas. Em especial, usamos um método variacional e a teoria de ondas de spin linear para a obtenção do estado fundamental aproximado. Primeiramente, estudamos as propriedades do estado fundamental e das possíveis transições ordem-desordem do modelo de Heisenberg antiferromagnético quase-unidimensional de spin $1/2$, definido numa rede quadrada com interações de troca entre os primeiros vizinhos, J e J' . Esta última interação é responsável pelo comportamento unidimensional ou bidimensional do modelo, quando é nula e quando possui um valor diferente de zero, respectivamente. Obtivemos as magnetizações de subrede ou alternadas para as fases antiferromagnética e colinear antiferromagnética em função destas interações. Na ausência de interações de troca entre segundos vizinhos obtivemos a fase colinear antiferromagnética fazendo $J' < 0$. Este modelo, no limite $J'/J \rightarrow 0$, possui um valor crítico para a razão J'/J . Neste ponto temos uma transição de fase do tipo ordem-desordem e que é o foco deste primeiro estudo. Encontramos um valor crítico $J'/J = 0$, que corresponde ao valor fisicamente esperado, e comparamos nossos resultados com a teoria de ondas de spin linear que obtem um valor não nulo. Em um segundo trabalho, investigamos o modelo de Heisenberg com frustração, induzida pela inclusão das interações de troca entre segundos vizinhos J_2 . Renomeamos as interações de troca entre primeiros vizinhos como J_1 e J'_1 , assim este modelo é mais conhecido como $J_1 - J'_1 - J_2$. Além disso, incluímos no modelo anisotropias de troca que acompanham as componentes x e y dos operadores de spin. Assim, o Hamiltoniano mais geral apresenta os limites do modelo de Heisenberg isotrópico e do modelo de Ising para certos valores destas anisotropias. Com o intuito de investigar o real papel desempenhado pela anisotropia de troca, escolhemos diferenciá-las para primeiros e segundos vizinhos, de modo que as rotulamos de Δ_1 e Δ_2 , respectivamente. Analisamos as magnetizações alternadas e as energias para as fases antiferromagnética, colinear antiferromagnética e paramagnética quântica. A partir desta análise, observamos transições de fases quânticas para determinados valores da anisotropia de troca

e do parâmetro de frustração, dado pela razão J_2/J_1 . Obtivemos o diagrama de fases global para os casos onde as anisotropias de troca de primeiros e segundos vizinhos são iguais e quando diferem entre si. No primeiro caso, podemos observar as fases ordenadas de Néel e colinear antiferromagnética e entre elas uma fase magneticamente desordenada. Verificamos a existência de um ponto crítico terminal que separa as três fases. No segundo caso, notamos que as anisotropias de troca influenciam a região da fase desordenada, afetando inclusive a existência do ponto crítico terminal. E para determinados intervalos de anisotropia, observamos alguns comportamentos não esperados *a priori*. Realizamos um estudo do comportamento quase-unidimensional do modelo fazendo $J'_1 \rightarrow 0$, onde a forma do diagrama de fase se manteve inalterada. Exploramos o grau de formação de dímeros em cada fase por meio do parâmetro de dimerização para alguns valores de anisotropia e obtivemos um grau de dimerização maior para a fase desordenada em comparação com as fases ordenadas, como esperado. Finalizamos este trabalho com uma generalização do primeiro estudo sem frustração em função apenas das anisotropias de troca. Como um desafio para o método variacional, estudamos o modelo mais geral $J_1 - J'_1 - J_2$ para spin-1 sem considerar as anisotropias de troca e evitando o caso unidimensional. Diferente do caso com spin semi-inteiro, não encontramos a fase desordenada para o modelo com spin inteiro $S=1$. Observamos apenas uma transição de fase de primeira ordem entre as fases ordenadas. Por fim, retornamos ao modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ frustrado com anisotropias de troca Δ_1 e Δ_2 para estudá-lo pela ótica da teoria de ondas de spin linear. O objetivo neste caso foi comparar estes resultados com os obtidos via método variacional. Realizamos uma análise detalhada a partir da comparação entre os dois métodos, que concordaram qualitativamente em todos os limites explorados e mesmo aqueles comportamentos que não eram esperados foram confirmados pela teoria de ondas de spin. Essa coerência dos resultados nos permitiu obter um diferente ponto de vista para o papel desempenhado pelas anisotropias de troca quando diferenciadas para primeiros e segundos vizinhos. Se consideradas iguais estas anisotropias funcionam apenas como um parâmetro que leva o modelo do limite Heisenberg isotópico para o modelo de Ising. No entanto, quando são diferentes passam a desempenhar uma função que favorece a desordem no sistema.

Palavras-chave: modelo de Heisenberg, sistemas de baixas dimensionalidades, sistemas de spins, frustração, dimerização.

Abstract

In this thesis we study spin systems in low dimension at zero temperature, analyzing their quantum phase transitions. In particular, we used a variational method and a linear spin wave theory for obtaining the approximate ground state. Firstly, we studied the order-disorder transitions of the quasi-one-dimensional isotropic antiferromagnetic Heisenberg model of spin-1/2, defined on a square lattice with exchange interactions between nearest neighbors, J and J' . The latter interaction is responsible for one-dimensional or two-dimensional behavior of the model namely, when it is zero and when it has a nonzero value, respectively. We obtained the staggered magnetizations of the antiferromagnetic and collinear antiferromagnetic phases. In the absence of exchange interactions between second neighbors, the collinear antiferromagnetic phase is obtained for $J' < 0$. This model in the one-dimensional limit has a critical value for the ratio J'/J , where we have a phase transition of the order-disorder type. We found a critical value $J'/J = 0$, which corresponds to the value physically expected, and compare our results with the linear spin wave theory, that predicts a nonzero critical value. The variational method is also used in the study of the Heisenberg anisotropic model with frustration induced by the inclusion of exchange interactions between second neighbors J_2 . We renamed the exchange interactions of the first neighbors J_1 e J'_1 , so this model is known as $J_1 - J'_1 - J_2$. Furthermore, we include in this model the exchange anisotropy which follows the x and y components of the spin operators. Thus, the more general Hamiltonian presents the isotropic Heisenberg and Ising model limits for certain values of the anisotropy. With the goal to analyze the real role played by this anisotropy, we distinguish between first and seconds neighbors by the labels Δ_1 and Δ_2 , respectively. We analyzed the staggered magnetization and the energies for the antiferromagnetic, collinear antiferromagnetic and quantum paramagnetic phase. From these analyzes, we observed quantum phase transitions for certain values of the exchange anisotropy and frustration parameter, the latter one given by the ratio J_2/J_1 . The global phase diagram was also obtained for the cases where the first and second neighbor exchange anisotropies are equal and where they differ from each other. In the

first case, we can observe the ordered phases, Néel and collinear antiferromagnetic, and between them a magnetically disordered phase. We checked the existence of a critical endpoint separating the three phases. In the second case, we note that the exchange anisotropy influences the region of the disordered phase, affecting even the existence of the critical endpoint. Besides presenting, at certain intervals of the anisotropy, a behavior that was not expected *a priori*. We also analyze the quasi-one-dimensional behavior $J'_1 \rightarrow 0$, where the shape of the phase diagram is unchanged. We explore the degree of dimer formation via the dimerization parameter for some values of exchange anisotropy and obtain a higher degree of dimerization for the disordered phase in comparison with the ordered phases, as expected. We end this work with a generalization of the first study without frustration in function only of the exchange anisotropy. As a challenge to the variational method, we study the more general $J_1 - J'_1 - J_2$ model for integer spin-1 without the exchange anisotropy and avoiding the unidimensional case. Different from what happens in the semi-integer spins case, we did not find the disordered phase for integer spin $S=1$. We note only a first-order phase transition between the ordered phases. Finally, we return to the frustrated model with exchange anisotropies Δ_1 and Δ_2 to study the model from a perspective of linear spin wave theory, in order to compare the results with those obtained via the variational method. A detailed analysis was performed based on the comparison between the two methods, which agreed qualitatively in all explored boundaries and even those behaviors that were not expected from the variational method were confirmed by the spin wave theory. This consistency of the results allowed us to get a different view of the role played by the exchange anisotropy when differentiated for first and second neighbors. If the anisotropies are considered equal they work only as a parameter that carries the model from the isotropic Heisenberg limit to the Ising model. However, when different, they promote disorder in the system.

Keywords: Heisenberg model, low-dimensional systems, spins systems, frustration, dimerization.

Lista de Figuras

1.1	Representação esquemática das transições de fases quânticas através do cruzamento dos níveis de energia E do estado fundamental e do estado excitado, no ponto crítico quântico $g = g_c$. Em (a) temos o cruzamento simples dos níveis de energia, sinalizando uma transição de primeira ordem e em (b) o cruzamento só acontecerá no limite termodinâmico, caracterizando assim uma transição de segunda ordem.	7
1.2	Representação esquemática de um diagrama de fases no plano g - T , na vizinhança do ponto crítico. Em (a) temos um sistema que possui ordem apenas em $T = 0$. A linha em vermelho representa a fase ordenada à temperatura nula. Em (b) temos uma transição de fase clássica acontecendo ao longo da linha crítica em preto, a área sombreada em torno da linha crítica é a região onde as flutuações térmicas dominam. Os círculos em vermelho são os pontos críticos quânticos de cada transição em $g = g_c$ e as áreas delimitadas pelas linhas em azul são as regiões onde ambas as flutuações térmicas e quânticas são relevantes. A linha tracejada em azul delimita a região onde esse comportamento é universal. Conforme referência [1].	8
1.3	Representação esquemática da estrutura cristalina do composto La_2CuO_4 . Evidenciamos a direita os planos (a-b) de cobre-oxigênio CuO_4 [2].	9
1.4	Exemplo de frustração devido a topologia da rede triangular. As setas representam os spins, que no modelo de Ising podem apontar para cima ou para baixo, somente. O símbolo interrogação indica a frustração do spin naquele sítio.	12
1.5	Degenerescência do estado fundamental para spins do tipo Ising em uma rede triangular. Cada triângulo representa uma das seis possíveis configurações onde apenas duas interações antiferromagnéticas são satisfeitas. . .	13
1.6	Exemplo de frustração devido a interações mistas. F indica interações ferrromagnéticas enquanto AF antiferromagnéticas. Note que o spin do canto inferior direito não consegue satisfazer as duas ligações com seus vizinhos. .	13

1.7	Exemplo de frustração devido a inclusão de segundos vizinhos na rede quadrada. Nesse caso os dois spins da direita estão frustrados.	14
1.8	Representação de ligações de valência ou dímeros. Os pontos representam os sítios da rede. As linhas vermelhas, ligando dois sítios, representam os dímeros, que podem ser entre primeiros vizinhos, segundos vizinhos, etc.. .	15
1.9	Possíveis estados de ligação de valência. A figura (a) representa a rede com dímeros na horizontal enquanto que (b) com dímeros na vertical.	15
2.1	Ordenamento antiferromagnético (figura a) e colinear antiferromagnético (figura b). As setas indicam as componentes de spin na direção z	19
2.2	Em (a), temos a representação esquemática de uma rede quadrada com diferentes tipos de plaquetas A, B, C e D. Apenas as plaquetas em cinza possuem o estado fundamental dados por $ \phi_{0l}\rangle$. Em (a), temos os sítios numerados de 1 a 9, com 1 – 4 pertencendo a plaqueta A, enquanto 5 – 9 pertencem as demais plaquetas. Apenas nos sítios da plaqueta A os spins possuem as três componentes. Em (b), mostramos como a estrutura em (a) se repete para formar uma rede quadrada infinita.	21
2.3	Magnetização alternada para as fases AF e CAF em função de λ . Os resultados (a) correspondem ao método variacional para o caso AF e CAF, linha sólida e pontilhada, respectivamente. O conjunto (b) de curvas está relacionado aos mesmos resultados obtidos via ondas de spin. O gráfico inserido no canto inferior direito apresenta uma comparação entre os resultados de campo médio (MFA) e o método variacional para a fase AF.	24
3.1	Rede quadrada com frustração devido a competição entre as interações de primeiros e segundos vizinhos. As interações de troca J_1 e J'_1 atuam nas direções horizontal e vertical, respectivamente, enquanto J_2 representa a interação ao longo das diagonais. As interrogações em vermelho localizam os sítios onde os spins estão frustrados.	28
3.2	Estado fundamental do modelo de Heisenberg spin-1/2 em uma rede quadrada, nas fases ordenadas a) antiferromagnética (AF) e b) colinear antiferromagnética (CAF).	29

3.3	Magnetização esquemática de subrede em função da frustração α para $\lambda = 1$. AF e CAF designam as fases antiferromagnética e a colinear antiferromagnética, respectivamente. Em (a) temos o caso clássico onde ocorre uma quebra de simetria em $\alpha = 0.5$ e em (b) um possível caso quântico, onde α_{1c} e α_{2c} representam os valores críticos entre os quais tem-se a fase desordenada, de modo que para $\alpha < \alpha_{1c}$ temos a fase AF e para $\alpha > \alpha_{2c}$ a fase CAF.	30
3.4	Magnetização alternada na fase AF em função de Δ , para vários valores de α . As linhas vermelhas são para os valores de α onde temos a transição de fase quântica.	33
3.5	O mesmo da figura 3.4 para a magnetização CAF.	34
3.6	Magnetização alternada para as fases AF e CAF em função de α , para alguns valores de Δ . Uma fase desordenada é obtida entre as fases ordenadas e desaparece para $\Delta = 0.432$. Para $\Delta = 1$, linha vermelha, obtemos o comportamento clássico. As linhas pontilhadas indicam transições descontínuas.	35
3.7	Diagrama de fase no plano $\alpha - \Delta$ perto da região de $\alpha = 0.5$ para o modelo $J_1 - J_2$, i.e. quando $\lambda = 1$, anisotrópico em uma rede quadrada. A linha sólida e as tracejadas representam transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. O ponto em negrito corresponde ao ponto crítico terminal localizado em $(0.548, 0.432)$. AF representa a fase antiferromagnética, CAF a fase colinear AF e PQ a fase paramagnética quântica ou desordenada.	36
3.8	O mesmo da figura 3.4 para $\lambda = 0.8$	37
3.9	O mesmo da figura 3.5 para $\lambda = 0.8$	38
3.10	O mesmo da figura 3.6 para $\lambda = 0.8$	39
3.11	Comparação dos diagramas de fases no plano $\alpha - \Delta$ para diferentes valores de λ . A localização das fases AF, CAF e PQ é a mesma da figura 3.7 para cada λ de acordo com a cor, exceto para $\lambda = 0$ que possui apenas a fase colinear antiferromagnética. Os quadrados representam o ponto crítico terminal para cada valor de λ . Claramente, com $\lambda \rightarrow 0$ o ponto crítico terminal também vai à zero.	40
3.12	Diagrama de fase no plano $\lambda - \alpha$ para diferentes valores de Δ . As linhas tracejadas representam transições de primeira ordem e a linha sólida uma transição de segunda ordem. Os quadrados representam os pontos críticos terminais para cada valor de Δ . Em preto temos $\Delta = 0$, com o ponto crítico terminal na origem. Em azul $\Delta = 0.158$ com o ponto crítico terminal deslocado da origem na coordenada $\lambda = 0.6$ e finalmente em vermelho $\Delta = 1.0$ como o ponto crítico terminal na coordenada $\lambda = 1$	41

3.13	Magnetizações alternadas antiferro m_{AF} e colinear antiferro m_{CAF} em função da frustração para $\Delta_1 = 0$ e vários valores de $\Delta = \Delta_2$. As linhas pontilhadas partem dos pontos onde existe descontinuidade no parâmetro de ordem (magnetizações) e representam transições de primeira ordem.	42
3.14	Diagrama de fase no plano $\alpha - \Delta$ para $\Delta_1 = 0$ e $\Delta = \Delta_2$	43
3.15	Magnetizações alternadas m_{AF} e m_{CAF} para $\Delta_1 = 1$ e $\Delta = \Delta_2$. A fase desordenada não é observada. O comportamento clássico é obtido para $\Delta = 1$, linha vermelha. Transições de primeira ordem acontecem entre $\alpha = 0.48$ e 0.5	44
3.16	Diagrama de fase no plano $\alpha - \Delta$ para $\Delta_1 = 1$ e $\Delta = \Delta_2$. Apenas uma linha de transição de fase de primeira ordem é observada entre as fases AF e CAF. A transição só ocorre para $0.48 < \alpha < 0.5$	45
3.17	Diagrama de fase no plano $\alpha - \Delta_2$, para alguns valores de $\Delta_1 \leq 0.346$. O quadrado representa o ponto crítico terminal e marca o fim da fase desordenada no eixo $\Delta_2 = 0$	46
3.18	O mesmo da figura 3.17 para $0.346 \leq \Delta_1 \leq 0.531$. Com o aumento de Δ_1 dentro desta faixa de valores, observamos a diminuição da região da fase desordenada, com o último ponto crítico terminal dado pelo quadrado em vermelho.	47
3.19	O mesmo da figura 3.17 para $0.531 \leq \Delta_1 \leq 1$. Neste intervalo não observamos mais a fase desordenada.	48
3.20	Magnetizações alternadas m_{AF} e m_{CAF} em função da frustração para $\Delta_2 = 0$ $\Delta = \Delta_1$. Existe uma fase desordenada entre as fases ordenadas AF e CAF que desaparece $\Delta = 0.346$. As magnetizações m_{CAF} partem de um valor diferente de 0.5 para $\Delta = 1$, pois fixamos $\Delta_2 = 0$	49
3.21	O mesmo da figura 3.7 para $\Delta_2 = 0$ e $\Delta = \Delta_1$. O ponto em negrito é o ponto crítico terminal e está localizado em $(0.542, 0.356)$	50
3.22	O mesmo da figura 3.6 para $\Delta_2 = 1$ e $\Delta = \Delta_1$. O fase desordenada desaparece para $\Delta = 0.531$	51
3.23	O mesmo da figura 3.7 para $\Delta_2 = 1$ e $\Delta = \Delta_1$. O ponto em negrito representa o ponto crítico terminal e está localizado em $(0.547, 0.531)$	52
3.24	Comparação dos diagramas de fase no plano $\alpha - \Delta_1$, obtidos para $\Delta_2 = 0$ e $\Delta_2 = 1$ com o diagrama de fase da figura 3.7.	53
3.25	Parâmetro de dimerização D em função da frustração para alguns valores de Δ . Para $\Delta = 0.0, 0.4$ temos $D = 2.0, 1.736$, respectivamente, na fase desordenada. Para $\Delta = 0.432$ a fase desordenada desaparece e temos as fases AF e CAF se encontrando com $D = 1.414$	54

3.26	Magnetização alternada versus λ do sistema sem frustração. As fases anti-ferromagnética e colinear antiferromagnética são obtidas fazendo-se λ positivo e negativo, respectivamente.	55
4.1	Energia por unidade de spin e J_1 em função da frustração, para alguns valores de λ . As linhas sólidas correspondem as energias da fase AF e as tracejadas pertencem a fase CAF. Os círculos marcam o encontro das energias caracterizando uma transição de fase de primeira ordem e se deslocam para esquerda conforme λ diminui com a fase colinear se tornando estável para regiões cada vez maiores de α	62
4.2	Magnetização das fases ordenadas AF e CAF em função da frustração para alguns valores de λ . Ambas as magnetizações diminuem suavemente, m_{AF} da esquerda para direita e m_{CAF} da direita para esquerda até o ponto de transição de fase de primeira ordem, representado pelas linhas tracejadas para cada valor de λ	63
4.3	Diagrama de fase no plano $\lambda - \alpha$. Apenas uma linha de transição de fase primeira ordem acontece entre as fases AF e CAF e nenhuma fase intermediária é observada. O ponto na origem corresponde a uma extrapolação dos resultados.	64
5.1	Representação semi-clássica de uma onda de spin em uma cadeia ferromagnética. Em (a), ilustramos a onda de spin como os desvios nos ângulos de precessão dos spins, setas em azul, variando linearmente de spin para spin na direção de propagação \vec{k} ao longo da cadeia. Em (b), representamos o comprimento de onda através da linha tracejada em vermelho[1].	69
5.2	Esquema das subredes A e B no estado ordenado de Néel(a) e no colinear antiferromagnético(b).	76
5.3	Magnetização alternada para as fases AF e CAF em função de α , para alguns valores de Δ , onde $\Delta = \Delta_1 = \Delta_2$. A fase desordenada é obtida entre as fases ordenadas e desaparece para $\Delta = 0.244$. Para $\Delta = 1$, linha vermelha, obtemos o comportamento clássico. As linhas pontilhadas indicam transições de primeira ordem entre as fases ordenadas.	82
5.4	Diagrama de fase no plano $\alpha - \Delta$ para $\lambda = 1$. A linha sólida e as tracejada e traço-ponto representam transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. O ponto em negrito corresponde ao ponto crítico terminal localizado em (0.569, 0.244). A linha de transição CAF-PQ, em vermelho, é apenas uma representação esquemática, uma vez que via teoria de ondas de spin não obtemos a energia da fase desordenada.	83

5.5	<p>Comparação dos diagramas de fases no plano $\alpha - \Delta$ para diferentes valores de λ. A localização das fases AF, CAF e PQ é a mesma da figura 5.4 para cada λ de acordo com a cor, exceto para $\lambda = 0$ que possui apenas a fase colinear antiferromagnética. Os quadrados representam o ponto crítico terminal para cada valor de λ. Claramente, com $\lambda \rightarrow 0$ o ponto crítico terminal também vai à zero.</p>	84
5.6	<p>Diagrama de fase no plano $\lambda - \alpha$ para diferentes valores de Δ. As linhas tracejadas representam transições de primeira ordem e as linhas sólidas transições de segunda ordem. Os quadrados representam os pontos críticos terminais para cada valor de Δ. Em preto temos $\Delta = 0$, com o ponto crítico terminal na origem. Em azul $\Delta = 0.157$ com o ponto crítico terminal deslocado da origem na coordenada λ para $\lambda = 0.6$ e finalmente em vermelho $\Delta = 0.244$ como o ponto crítico terminal para $\lambda = 1$.</p>	85
5.7	<p>Magnetizações alternadas antiferromagnética m_{AF}, partindo de $\alpha = 0$, e colinear antiferromagnética m_{CAF}, partindo de $\alpha = 1$, em função da frustração para o valor fixo $\Delta_1 = 0$ e vários valores de $\Delta = \Delta_2$. Para $\Delta_2 = 10^{-4}$, temos $\alpha_c = 0.184$ e aproximadamente a partir de $\Delta_2 > 0.1$ a magnetização vai rapidamente à zero, o que sinalizamos através do círculo azul. As magnetizações m_{CAF} apresentam descontinuidades para valores de Δ_2 diferentes de zero, porém devido a ausência da energia da fase desordenada não podemos determinar o ponto onde a descontinuidade acontece com precisão e, por isso, não usamos linhas tracejadas para representá-las como na figura 3.13. O ponto em vermelho indica a magnetização colinear indo a zero rapidamente para $\Delta_2 = 1$.</p>	86
5.8	<p>Diagrama de fase no plano $\alpha - \Delta$ para $\Delta_1 = 0$ e $\Delta = \Delta_2$. Como indicado pelo gráfico menor inserido, a fase AF possui uma região muito pequena, em comparação as fases PQ e CAF, e concentra-se próximo à origem. A linha de transição da fase PQ-CAF, em vermelho, segue a mesma descrição da respectiva transição na figura 5.4.</p>	87
5.9	<p>O mesmo da figura 5.7 para $\Delta_1 = 1$. Ambas as magnetizações m_{AF} e m_{CAF} mantêm-se constantes até o ponto de transição de primeira ordem entre as fases ordenadas, indicados pelas linhas tracejadas para cada valor de Δ_2.</p>	88
5.10	<p>O mesmo da figura 5.8 para $\Delta_1 = 1$. Nesse caso, não observamos a presença da fase desordenada, apenas uma transição direta de primeira ordem entre as fases ordenadas.</p>	89

5.11	Diagrama de fase no plano $\alpha - \Delta_2$, para alguns valores de $\Delta_1 \leq 0.241$. O quadrado representa o ponto crítico terminal e marca o fim da fase desordenada no eixo $\Delta_2 = 0$	90
5.12	O mesmo da figura 5.11 para $0.241 \leq \Delta_1 \leq 0.544$. Com o aumento de Δ_1 dentro desta faixa de valores, observamos a diminuição da região desordenada, com o último ponto crítico terminal dado pelo quadrado em vermelho.	91
5.13	O mesmo da figura 5.11 para $0.544 \leq \Delta_1 \leq 1$. Neste intervalo não observamos mais a fase desordenada.	92
5.14	O mesmo da figura 5.3 para $\Delta_2 = 0$ e alguns valores de Δ_1 . As linhas tracejadas representam pontos de transição de primeira ordem entre as fases antiferromagnética e colinear antiferromagnética. Apenas a magnetização m_{AF} restabelece o valor clássico de 0.5 no limite $\Delta_1 = 1$	93
5.15	O mesmo da figura 5.4 para $\Delta_2 = 0$	94
5.16	O mesmo da figura 5.3 para $\Delta_2 = 1$ e alguns valores de Δ_1 . Os círculos negros indicam que as magnetizações m_{AF} e m_{CAF} vão à zero rapidamente em função da frustração α quando $\Delta_1 = 0$. As linhas tracejadas representam transições de primeira ordem entre as fases ordenadas.	95
5.17	O mesmo da figura 5.4 para $\Delta_2 = 1$	96
5.18	Comparação entre os diagramas de fase para $\Delta_1 = \Delta_2$, $\Delta_2 = 0$ e $\Delta_2 = 1$	97

Sumário

Agradecimentos	vii
Resumo	ix
Abstract	xi
Lista de Figuras	xiii
1 Introdução	1
1.1 Transições de fase	2
1.2 Transição de fase quântica	5
1.3 Sistemas de baixa dimensionalidade	8
1.4 Frustração	11
1.5 Fase desordenada	12
2 Ordem-desordem no modelo de Heisenberg quase-unidimensional antiferromagnético com spin $\frac{1}{2}$	17
2.1 Modelo de Heisenberg quase-unidimensional antiferromagnético com spin $\frac{1}{2}$	17
2.2 Método variacional	20
2.3 Método variacional no modelo Heisenberg quase-unidimensional antiferromagnético com spin $\frac{1}{2}$	20
2.4 Resultados	23
2.5 Conclusão	24
3 Estudo do estado fundamental do modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético spin-$\frac{1}{2}$	27
3.1 Modelo $J_1 - J'_1 - J_2$	27
3.2 Método variacional no modelo $J_1 - J'_1 - J_2$	31
3.3 Resultados	32

3.4	Conclusão	56
4	Estudo do estado fundamental do modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético spin-1	57
4.1	Modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ com spin-1	57
4.2	Método Variacional para spin-1	59
4.3	Resultados	61
4.4	Conclusão	65
5	Teoria de Ondas de Spin no modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ anisotrópico	67
5.1	Conceitos básicos sobre Teoria de Ondas de Spin	67
5.2	Transformação de Holstein-Primakoff	68
5.3	Teoria de Ondas de Spin no modelo $J_1 - J'_1 - J_2$	75
5.4	Resultados	80
5.5	Comparação dos resultados obtidos para o modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ via método variacional e teoria de ondas de spin	98
5.6	Conclusão	101
6	Conclusões e Perspectivas	103
	Referências Bibliográficas	109
	Apêndice A Equações de apoio para o capítulo 4	117

Capítulo 1

Introdução

Estudos teóricos e experimentais sobre transições de fase permanecem como um tópico atual e de extremo interesse na área de Física da Matéria Condensada. Estas transições podem acontecer à temperaturas finitas e à temperatura nula. Nesta tese, estamos especialmente interessados no último caso, mais conhecido como transições de fase quânticas. Na ausência de temperatura, as flutuações quânticas são as únicas responsáveis pela perda de algum tipo de ordem e estas são governadas pelo princípio de incerteza de Heisenberg [1]. Existem muitos sistemas que podem exibir uma transição de fase quântica [3], entretanto, no trabalho que se segue, exploraremos alguns aspectos relevantes das transições de fase quânticas que acontecem devido à competições de interações no sistema [4, 5, 6].

A seguir apresentamos a estrutura dos conteúdos desta tese.

- Neste capítulo, apresentamos um panorama geral sobre transições de fase quânticas em sistemas magnéticos em redes de baixas dimensionalidade, juntamente com suas motivações experimentais e teóricas. Abordamos o tema frustração dando exemplos de modelos que exibem esse comportamento em redes bidimensionais. Discutimos também, de uma forma breve, algumas características das fases ditas desordenadas.
- No capítulo 2, estudamos a transição ordem-desordem em uma rede quadrada no modelo de Heisenberg spin-1/2 quase-unidimensional através de um método variacional que é introduzido neste mesmo capítulo.
- No capítulo 3, ainda com o método variacional, analisamos o estado fundamental do modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$, explorando o diagrama de fase considerando anisotropias de troca iguais e diferentes para as interações entre primeiros

e segundos vizinhos. Além disso, um estudo da fase desordenada magneticamente por meio do parâmetro dimerização foi realizado.

- No capítulo 4, realizamos o mesmo estudo do capítulo 2 para o modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ com spin-1, sem considerar as anisotropias troca, apenas focando na procura da fase desordenada para este caso.
- No capítulo 5, tratamos o mesmo modelo do capítulo 3 do ponto de vista da Teoria Linear de Ondas de Spin e uma comparação entre estes resultados e os obtidos com o método variacional é analisada.
- Finalmente, no capítulo 6 apresentamos as conclusões desta tese de forma geral e as perspectivas para futuros trabalhos.

1.1 Transições de fase

Diariamente, presenciamos transições de fase acontecendo. O exemplo mais clássico é a transição sólido-líquido da água, controlada pela temperatura e que apresenta características peculiares como a descontinuidade na função densidade. Do mesmo modo, a matéria em geral está sujeita a transições de fase, caracterizadas por meio de mudanças em determinadas quantidades macroscópicas. Uma transição de fase acontece quando uma dada variável termodinâmica, ou parâmetro intensivo, responsável pela transição, é variado. E é neste ponto de transição que observamos singularidades em certas grandezas físicas. Se a transição de fase é do tipo ordem-desordem¹, podemos sempre associá-la a um parâmetro de ordem, respeitando as simetrias do sistema, de modo que na fase ordenada ele seja diferente de zero e na fase desordenada nulo. Assim, construímos um mecanismo eficiente para saber em qual fase o sistema se encontra e onde se localiza o ponto de transição. Do ponto de vista experimental, comumente temos como variável termodinâmica que desencadeia a transição a temperatura, pressão, campos magnéticos e elétricos, dopagem, entre outros[8].

As transições de fase podem ser classificadas em descontínuas ou de primeira ordem, quando o parâmetro de ordem vai a zero de forma descontínua, apresentando saltos, e como contínuas ou de segunda ordem, quando o parâmetro de ordem vai a zero de forma contínua, suave. As transições ditas de primeira ordem estão associadas à coexistência de fases, o que é um reflexo da descontinuidade na entropia, como o exemplo já citado da transição de fase sólido-líquido da água à temperatura de fusão

¹Existem outros tipos de transição de fase que não são necessariamente do tipo orde-desordem, como por exemplo as transições de fase topológicas[7].

do gelo, com descontinuidade na função que representa a densidade entre as duas fases. Por outro lado, a transição de fase de segunda ordem, que acontece no chamado ponto crítico ², a coexistência de fases não acontece. Na verdade as duas fases tornam-se iguais. É o caso da transição ferromagnética-paramagnética induzida pela temperatura, e o ponto terminal da linha de transição de primeira ordem de um fluido simples. Como nesse trabalho trataremos de sistemas magnéticos, consideraremos, abaixo, as grandezas na correspondente linguagem magnética.

Podemos também associar uma função correlação ao parâmetro de ordem, de modo que longe do ponto crítico esta função decai exponencialmente e, próximo da transição de fase, decai como lei de potência em função da distância espacial na rede, com um comprimento de correlação ξ , o qual mede o tamanho médio dos blocos correlacionados. Quando a transição é de primeira ordem, o correspondente comprimento de correlação é finito. No entanto, se a transição é de segunda ordem, essa grandeza diverge, deixando inclusive o sistema invariante por escala e é nessa vizinhança que observamos os fenômenos críticos. Outras grandezas físicas, provenientes de derivadas da energia livre, como por exemplo calor específico e susceptibilidade magnética, apresentam singularidades no ponto crítico, com comportamento assintótico como lei de potência na vizinhança da região crítica, sendo que a cada uma delas está associada um expoente crítico. Em geral, define-se seis expoentes críticos β , δ , γ , α , ν e η , que podem ser obtidos tanto teoricamente como experimentalmente, e que estão relacionados com as seguintes grandezas termodinâmicas (o expoente crítico dinâmico z será definido mais adiante)

- Magnetização

$$m(t, H) = - \left(\frac{\partial g}{\partial H} \right)_T \sim \begin{cases} (-t)^\beta, H = 0, t \rightarrow 0^- \\ (H)^{1/\delta}, T = T_c, H \rightarrow 0^+ \end{cases} \quad (1.1)$$

- Susceptibilidade

$$\chi(t) = - \left(\frac{\partial^2 g}{\partial H^2} \right)_T \sim |t|^{-\gamma}, H = 0, t \rightarrow 0^\pm$$

- Calor específico

$$c(t) = -T \left(\frac{\partial^2 g}{\partial T^2} \right)_H \sim |t|^{-\alpha}, H = 0, t \rightarrow 0^\pm$$

²O termo *ponto crítico* é usado apenas para as transições de segunda ordem, enquanto para as transições de primeira ordem é chamado simplesmente de ponto de transição.

- Função correlação

$$\Gamma(r) = \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2+\eta}}, \quad \xi \sim |t|^{-\nu} \quad (1.2)$$

onde $g = g(T, H)$ é a energia livre de Gibbs por partícula, T a temperatura absoluta, H o campo magnético externo, $t = (T - T_c)/T_c$ a temperatura reduzida, Γ é a função correlação, e d a dimensão espacial da rede cristalina.

Uma característica interessante é que esses expoentes não são, de fato, independentes entre si, pois obedecem, rigorosamente, a certas desigualdades, (que na prática são na verdade verificadas como igualdades) as chamadas leis de escala [9], algumas são dadas por

$$\begin{aligned} \beta\delta &\leq \beta + \gamma && \text{(desigualdade de Widom)} \\ \alpha + 2\beta + \gamma &\geq 2 && \text{(desigualdade de Rushbrooke)} \\ \alpha + \beta(1 + \delta) &\geq 2 && \text{(desigualdade de Griffiths)} \\ \alpha &= 2 - \nu d && \text{(lei de Hiperescala de Josephson)} \end{aligned} \quad (1.3)$$

Quando diferentes sistemas, do ponto de vista das interações microscópicas, apresentam um mesmo conjunto de expoentes críticos diz-se que eles pertencem a mesma classe de universalidade [9]. Esses expoentes dependem da dimensionalidade da rede cristalina e da dimensionalidade e simetrias do parâmetro de ordem.

Uma vez que trataremos de sistemas frustrados mais a diante, é importante destacar o que acontece com esses sistemas do ponto de vista da teoria dos expoentes críticos. A maioria dos experimentos com materiais frustrados mostra que estes podem exibir leis de escala, no entanto com expoentes críticos não universais, ou seja, variando de um material para outro. Além disso, são observados comportamentos como alguma lei de escala sendo violada para alguns materiais, dimensão anômala negativa ³, etc. No capítulo 3 da referência [10], o autor apresenta um panorama teórico e experimental dos magnetos frustrados apontando para um comportamento com leis de escala não universal, excluindo a possibilidade de que esses materiais sejam representados por uma nova classe de universalidade. Em todo caso, toda a criticalidade do sistema pode ser descrita a partir dos seus expoentes críticos.

Outro aspecto marcante e importante das transições de fase é a quebra espontânea de simetria. Por exemplo, na transição de fase ferromagnética-paramagnética a fase ferromagnética(ordenada) possui menor simetria em comparação a fase paramagnética(desordenada). A quebra espontânea de simetria é um fenômeno que pode

³A dimensão anômala deve assumir sempre um valor positivo em uma transição de segunda ordem, baseada na teoria de Landau.

acontecer à temperatura finita e quando o parâmetro de ordem não comuta com o Hamiltoniano. Por definição, um sistema têm quebra de simetria espontânea se o parâmetro de ordem se mantém diferente de zero mesmo quando o campo de ordenamento⁴ é levado a zero [11].

Até aqui, apresentamos aspectos básicos sobre o fenômeno de transições de fase clássicas ou térmicas. Vamos agora nos concentrar nas transições de fase quânticas que acontecem à temperatura nula, que é objeto de estudo desta tese.

1.2 Transição de fase quântica

Quando uma transição de fase acontece à temperatura nula, passamos a chamá-la de “transição de fase quântica”. O interesse nestas transições em sistemas de spins está relacionado com o surgimento de possíveis transições entre novas fases quânticas, como a fase de líquido de spin [1, 12]. Em $T = 0$, não temos flutuações térmicas, de modo que, sob certas condições, a ordem pode ser completamente destruída somente pelas flutuações quânticas. Do ponto de vista teórico, para que a transição aconteça, a amplitude dessas flutuações deve ser controlada através de algum parâmetro g do Hamiltoniano. Seja o Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + g\mathcal{H}_1, \quad (1.4)$$

onde g é um parâmetro de controle adimensional e \mathcal{H}_0 e \mathcal{H}_1 possuem diferentes estados quânticos e competem através de g . Em geral, \mathcal{H}_0 e \mathcal{H}_1 não comutam, i.e. $[\mathcal{H}_0, \mathcal{H}_1] \neq 0$. Isso significa que existe uma diferença de energia entre o estado fundamental e o estado excitado. Conforme o sistema se aproxima do limite termodinâmico, essa diferença vai diminuindo até o limite onde o estado excitado torna-se o estado fundamental em $g = g_c$. Quando isso acontece, a energia $E(g)$ ⁵ torna-se não analítica em g_c , o que caracteriza uma transição de fase quântica neste ponto. Essa transição pode acontecer no limite do cruzamento das energias ou em um cruzamento efetivo, como pode ser visto no diagrama apresentado na Figura 1.1. Se a singularidade no estado fundamental vem de um cruzamento efetivo, como em 1.1(a), temos uma transição de fase quântica de primeira ordem que pode acontecer mesmo em um sistema finito. Por outro lado, se os níveis de energia não se cruzam em um sistema finito, como em 1.1(b), mas se aproximam do toque conforme nos aproximamos do limite termodinâmico, então no

⁴Por exemplo, em sistemas magnéticos, onde o parâmetro de ordem é a magnetização, o campo de ordenamento pode ser um campo magnético externo aplicado.

⁵Uma vez em temperatura nula, a energia $E(g)$ corresponde a energia livre do sistema.

limite do sistema infinito temos uma transição de fase de segunda ordem. Nesse último caso, seja Δ a diferença entre a energia do estado fundamental e do primeiro estado excitado, onde geralmente Δ vai à zero como função do parâmetro g na forma

$$\Delta \sim |g - g_c|^{\nu z}, \quad (1.5)$$

onde νz funciona como um expoente crítico e é normalmente universal. Podemos relacionar Δ com o comprimento de correlação característico do sistema ξ , que para transições de segunda ordem diverge com

$$\xi \sim |g - g_c|^{-\nu}, \quad (1.6)$$

de forma que

$$\Delta \sim \xi^{-z}, \quad (1.7)$$

onde z é o chamado expoente crítico dinâmico. Ou seja, quando o comprimento de correlação diverge a diferença de energia entre o estado fundamental e estado excitado vai à zero.

No entanto, para identificarmos essas transições de fase precisamos verificar essas singularidades na energia do estado fundamental em $T = 0$. Como não podemos acessar tal temperatura em laboratório, apesar de se poder chegar bem próximo dela, o desafio é identificar os efeitos das transições de fase quânticas no comportamento físico em uma temperatura finita.

Sendo assim, considere uma transição de fase acontecendo em alguma temperatura finita, de modo que a sua descrição a partir da mecânica quântica se tornará importante quando $\hbar\omega_c \gg k_B T$, onde $\hbar\omega_c$ é a escala de energia típica das flutuações no parâmetro de ordem e $k_B T$ a energia térmica. Essa comparação entre energias nos leva a um interessante comportamento na vizinhança do ponto crítico quântico. Para observarmos esse comportamento, devemos considerar dois casos, dependendo se o sistema pode sustentar uma ordem de longo alcance à temperatura finita ou não. Na figura 1.2(a), temos o caso onde só existe ordem em $T = 0$, que corresponde a magnetos bidimensionais com simetria $SU(2)$, cuja ordem é proibida à temperatura finita (teorema de Mermin-Wagner [13]). Como não podemos acessar o zero absoluto em experiências reais, precisamos saber qual a região onde nossas conclusões teóricas acerca da transição de fase quântica serão relevantes. Assim, temos três regimes: (i) clássico desordenado, para $g < g_c$ onde só existe ordem em $T = 0$; (ii) quântico desordenado, para $(g > g_c)$ onde as flutuações quânticas destroem a ordem de longo alcance; e (iii) quântico crítico, região próximo ao ponto crítico quântico $g = g_c$ onde ambas

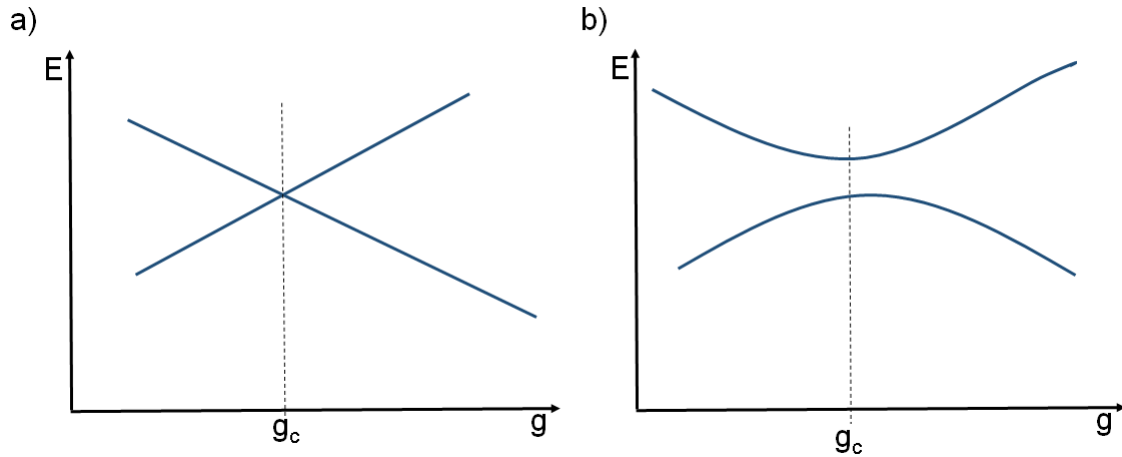


Figura 1.1. Representação esquemática das transições de fases quânticas através do cruzamento dos níveis de energia E do estado fundamental e do estado excitado, no ponto crítico quântico $g = g_c$. Em (a) temos o cruzamento simples dos níveis de energia, sinalizando uma transição de primeira ordem e em (b) o cruzamento só acontecerá no limite termodinâmico, caracterizando assim uma transição de segunda ordem.

as flutuações térmicas e quânticas são importantes e cujos limites dependem do ajuste do parâmetro de ordem g através da condição $k_B T > \hbar \omega_c \propto |g - g_c|^{\nu z}$, de modo que a criticalidade pode ser perdida se as flutuações térmicas tornarem-se suficientemente intensas (no caso dos magnetos isso acontece quando $k_B T$ é da ordem da energia de troca). Por outro lado, na figura 1.2(b), temos o caso de ordem de longo alcance à temperatura finita. Aqui, o ponto crítico quântico é o ponto terminal da linha crítica de transições com $T_c \neq 0$. As flutuações térmicas dominam na área sombreada em torno da linha crítica e diminuem à medida que nos aproximamos do ponto crítico quântico. De modo geral, como notamos a partir da figura 1.2, podemos nos aproximar do ponto crítico quântico de duas maneiras: uma é seguir na direção $g \rightarrow g_c$ em $T = 0$ e a outra é fazer $T \rightarrow 0$ em $g = g_c$. É este último que nos permite uma abordagem do ponto de vista experimental. Portanto, as flutuações térmicas são as responsáveis pelas transições de fase em modelos clássicos e, uma vez que essas flutuações somem em $T = 0$, os sistemas quânticos têm suas transições de fase a partir das flutuações quânticas que emergem do princípio de incerteza de Heisenberg.

As transições de fases quânticas são um tópico de grande interesse na área de matéria condensada, pois apesar de não podermos acessar experimentalmente $T = 0$, a presença do ponto crítico quântico pode ser a chave para compreendermos alguns problemas importantes, como por exemplo os supercondutores de altas temperaturas [14] [15].

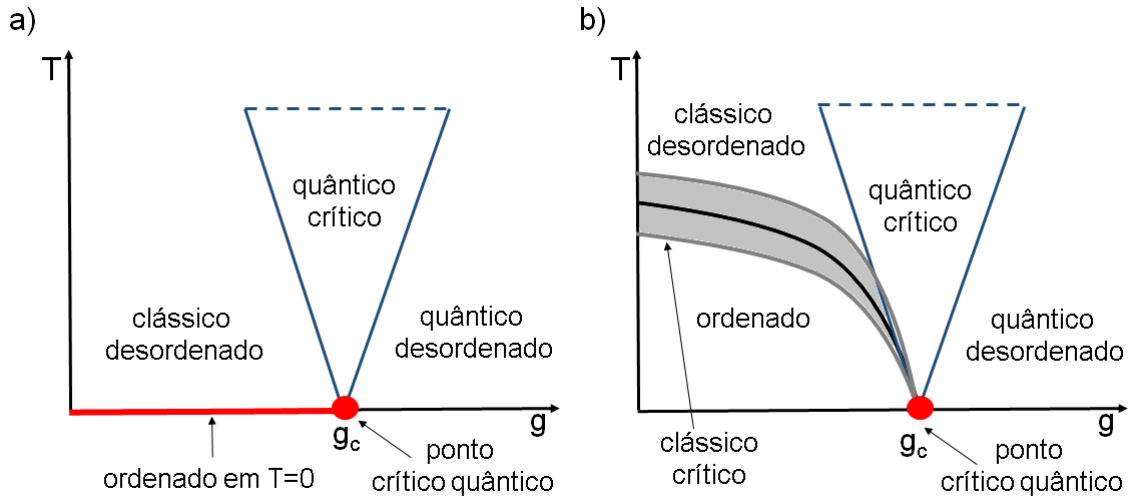


Figura 1.2. Representação esquemática de um diagrama de fases no plano g - T , na vizinhança do ponto crítico. Em (a) temos um sistema que possui ordem apenas em $T = 0$. A linha em vermelho representa a fase ordenada à temperatura nula. Em (b) temos uma transição de fase clássica acontecendo ao longo da linha crítica em preto, a área sombreada em torno da linha crítica é a região onde as flutuações térmicas dominam. Os círculos em vermelho são os pontos críticos quânticos de cada transição em $g = g_c$ e as áreas delimitadas pelas linhas em azul são as regiões onde ambas as flutuações térmicas e quânticas são relevantes. A linha tracejada em azul delimita a região onde esse comportamento é universal. Conforme referência [1].

1.3 Sistemas de baixa dimensionalidade

O estudo de sistemas de spins em redes de baixas dimensionalidades (isto é, redes com dimensões menores que três) é de grande interesse teórico e experimental na área de Física da Matéria Condensada [16]. Por exemplo, em duas dimensões, existe forte motivação experimental relacionada às propriedades magnéticas de perovskitas [17] tais como Rb_2MnF_4 , K_2NiF_4 , K_2MnF_4 , K_2CuF_4 , NiCl_2 , $\text{BaNi}_2(\text{PO}_4)_2$, filmes ferromagnéticos, multicamadas, etc.. Nos últimos anos, o interesse intensificou-se devido à pesquisa das propriedades magnéticas dos planos de cobre-oxigênio nos supercondutores de altas temperaturas como o La_2CuO_4 , veja a figura 1.3. Podemos ainda citar sistemas quase-unidimensionais que consistem em cadeias de spin com fraca interação de troca entre as cadeias, por exemplo $\text{Sr}(\text{Ca})_2\text{CuO}_3$, CsNiCl_3 e CsVCl_3 , com spin total $S = 1/2$, 1 e $3/2$, respectivamente.

Do ponto de vista teórico, pode-se tratar esses sistemas magnéticos através de spins localizados em diferentes sítios ao longo de uma determinada topologia de rede. Esses spins, por sua vez, interagem com uma interação do tipo de troca que no caso

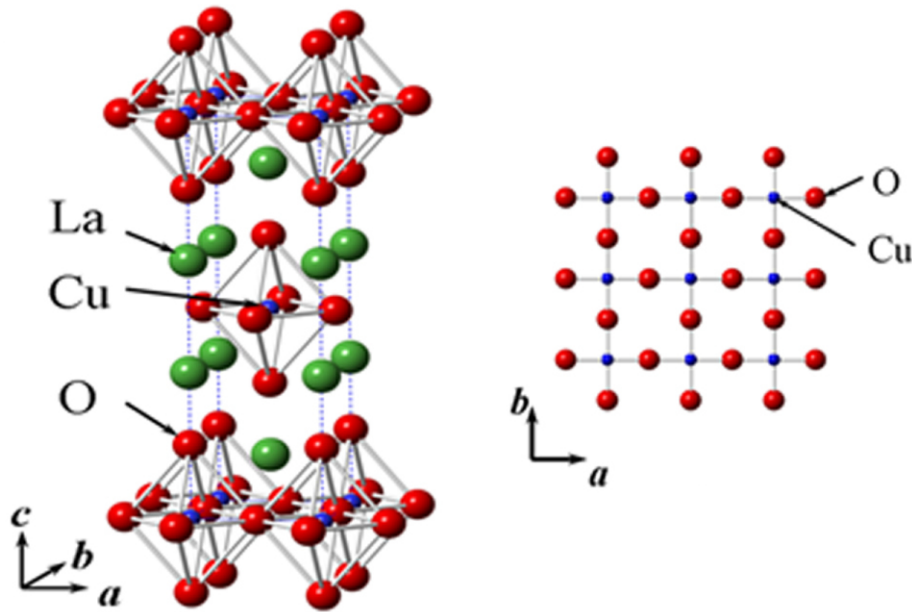


Figura 1.3. Representação esquemática da estrutura cristalina do composto La_2CuO_4 . Evidenciamos a direita os planos (a-b) de cobre-oxigênio CuO_4 [2].

isotrópico pode ser descrita pelo Hamiltoniano de Heisenberg [18], dado por

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (1.8)$$

onde a soma é realizada entre os spins vizinhos mais próximos, \vec{S}_i é o operador de spin localizado no sítio i da rede e $J_{i,j}$ é intensidade da interação de troca⁶ entre os spins localizados nos sítios vizinhos i e j . A magnitude do spin é dada por $S = \sqrt{s(s+1)}\hbar$, onde s pode assumir valores inteiros ou semi-inteiros.

A rede, em geral, pode ser d -dimensional. Por exemplo, uma cadeia de spins no caso unidimensional, uma rede quadrada em duas dimensões ou uma rede cúbica em três dimensões. Já a dimensionalidade do spin está relacionada com o seu número de componentes n . Assim, para $n = 1, 2$ e 3 , temos o modelo de Ising, XY e Heisenberg, respectivamente.

Por outro lado, a interação de troca não precisa ser considerada apenas entre primeiros vizinhos, e pode ser estendida a vizinhos mais distantes. Fica claro que as interações mais distantes terão intensidades cada vez menores, pelo fato delas possuírem menor superposição dos correspondentes orbitais. Além do mais, as interações entre

⁶A interação de troca é o resultado da superposição dos orbitais de átomos vizinhos, de tal forma que a energia depende da orientação relativa dos seus spins, o que é levado em conta no produto escalar.

vizinhos podem não ter a mesma intensidade ao longo de direções distintas da rede. Ao diferenciá-las passamos a tratar modelos mais realistas, uma vez que em cristais reais devem existir certas anisotropias espaciais.

A interação de troca é a responsável por estabelecer uma ordem magnética abaixo da temperatura crítica. Entretanto, para alguns sistemas de spins com interações competitivas, pode não existir uma ordem nem mesmo em $T = 0$. Os três tipos mais comuns de ordenamento são o ferromagnético(F), o antiferromagnético(AF) e o ferrimagnético(Fi). Para cada ordenamento o estado fundamental tem sua energia minimizada quando os spins estão todos alinhados (F), antiparalelamente alinhados (AF), e também antiparalelamente alinhados com spins de magnitudes diferente (Fi). O parâmetro de ordem no caso AF é a magnetização espontânea de subrede ou também chamada de magnetização alternada. Esses ordenamentos significam que em cada caso existe uma ordem de longo alcance.

Se considerarmos o modelo de Heisenberg isotrópico, com interações somente entre primeiros vizinhos, ou seja,

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.9)$$

temos que o sinal da interação de troca J determinará o tipo de ordenamento de menor energia. Assim, para $J > 0$ (< 0), o ordenamento favorável será o AF(F). O estado fundamental F clássico e quântico são os mesmos. Por outro lado, o estado fundamental AF clássico, estado de Néel, não corresponde ao estado fundamental quântico. Isto significa que o estado AF clássico não é um auto estado do Hamiltoniano (1.9). Entretanto, pelo fato do estado de Néel possuir ordem de longo alcance, pode-se supor um possível estado fundamental do tipo Néel com flutuações quânticas.

Com o Hamiltoniano do sistema bem definido, passamos ao problema de determinar seus autovalores e autofunções. Essa não é uma tarefa simples e apenas alguns casos possuem solução exata, onde destacamos a hipótese ou *ansatz* de Bethe [16] [19], que é capaz de resolver exatamente o espectro de excitações de sistemas quânticos unidimensionais.⁷ Em casos de spin 1/2, por exemplo, o número de auto-estados é 2^N , onde N é o número de sítios da rede. O que se faz, em geral, é determinar o estado fundamental e o espectro de baixas excitações⁸ de forma aproximada.

⁷A hipótese de Bethe é aplicável apenas a sistemas de muitos corpos em uma dimensão. Entretanto, nem todos os problemas quânticos unidimensionais podem ser resolvidos através desta técnica. Para estes problemas, assim como sistemas tratados em dimensões maiores, métodos aproximativos são comumente empregados.

⁸Excitações de baixas energias são especificadas em um regime de baixas temperaturas e fraca

Dentro do estudo do estado fundamental de um sistema de spins, temos que considerar as flutuações que dão origem as excitações quânticas. Essas excitações são criadas a partir de desvios dos spins da sua orientação natural no estado fundamental, podendo ainda interagir entre si. Muitos sistemas de spins podem exibir excitações de uma partícula ou excitações coletivas [20]. As excitações coletivas, em sistemas quânticos de spin, podem ser divididas em: ondas de spin, que são quantizadas como magnons, ou excitações topológicas, chamadas de vórtices. Ondas de spin ocorrem em magnetos do tipo Heisenberg nas fases ordenadas e com ordem de longo alcance, são estáveis e bem definidas em um regime de baixas temperaturas. São excitações de baixas energias e representam o movimento de precessão dos spins em torno da direção de magnetização espontânea da rede. Em fases ordenadas de curto alcance esses modos de ondas de spin são altamente amortecidas. Por outro lado, os vórtices são excitações de altas energias e geralmente ocorrem em altas temperaturas. O espectro de excitações pode ser com ou sem lacuna (do inglês *gap*). Sem lacuna significa que existe pelo menos um vetor de onda tal qual a energia de excitação é zero; com lacuna a menor excitação e o estado fundamental passam a ter uma diferença de energia não nula. A natureza do espectro de excitações, ou seja, com ou sem lacuna, determinará como as propriedades termodinâmicas do sistema dependerão da temperatura. Métodos ou técnicas empregados no estudo de sistemas magnéticos que de alguma forma levam em conta as excitações são superiores e apresentam melhores resultados quando comparadas com teorias que desprezam as excitações.

Com certa frequência, problemas de difícil tratamento em três dimensões tornam-se mais meleáveis em duas dimensões, o que pode auxiliar na modelagem teórica. Por isso, o estudo de sistemas em redes de baixas dimensionalidades pode permitir uma nova visão e compreensão de aspectos do magnetismo citados acima.

1.4 Frustração

Podemos ter estados fundamentais desordenados, i.e. com magnetização nula, devido ao fenômeno conhecido como frustração. Quando as energias associadas a todos os pares de spin em uma determinada rede não podem ser minimizadas simultaneamente, diz-se que o sistema está frustrado. Isso pode ocorrer devido a topologia da rede ou a presença da interação de mais vizinhos. As redes triangular [21] e kagomé [22] são bons exemplos de redes com frustração de origem topológica. Nestas redes o número de ligações em cada plaqueta elementar é sempre ímpar. Para melhor ilustrar esse

resposta a campos externos.

fato, considere spins do tipo Ising em uma rede triangular, como na figura 1.4. Se a energia de interação é do tipo antiferromagnética, então o estado de minimização de energia corresponde aos spins alinhados antiparalelamente. Porém, como podemos ver nessa figura, as três ligações não podem ser satisfeitas ao mesmo tempo. Portanto, o estado fundamental do modelo de Ising antiferromagnético em uma rede triangular é altamente degenerado, como mostrado na figura 1.5.

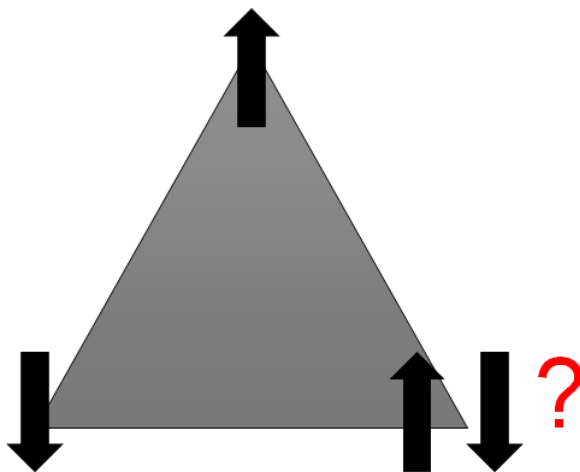


Figura 1.4. Exemplo de frustração devido a topologia da rede triangular. As setas representam os spins, que no modelo de Ising podem apontar para cima ou para baixo, somente. O símbolo interrogação indica a frustração do spin naquele sítio.

Outra maneira de frustrar uma rede de spins, *a priori* não frustrada topologicamente (por exemplo uma rede quadrada), é permitir que as interações possam ser mistas, ou seja, que possamos ter tanto interações ferro quanto antiferro, contanto que o número de interações antiferro seja sempre ímpar (veja ilustração na figura 1.6).

Por último, a adição de interações entre vizinhos mais distantes também pode gerar frustração. Como exemplo citamos o modelo com interações AF entre primeiros e segundos vizinhos na rede quadrada, como mostrado na figura 1.7.

1.5 Fase desordenada

Uma das principais motivações para o estudo de fases desordenadas são os supercondutores de altas temperaturas. Estes supercondutores, baseados em sistemas formados por planos de cupratos CuO_2 , compõem um arranjo muito bem modelado pelo Hamiltoniano de Heisenberg com interação antiferromagnética em uma rede quadrada. No estado não dopado, os cupratos exibem ordem de longo alcance abaixo da temperatura

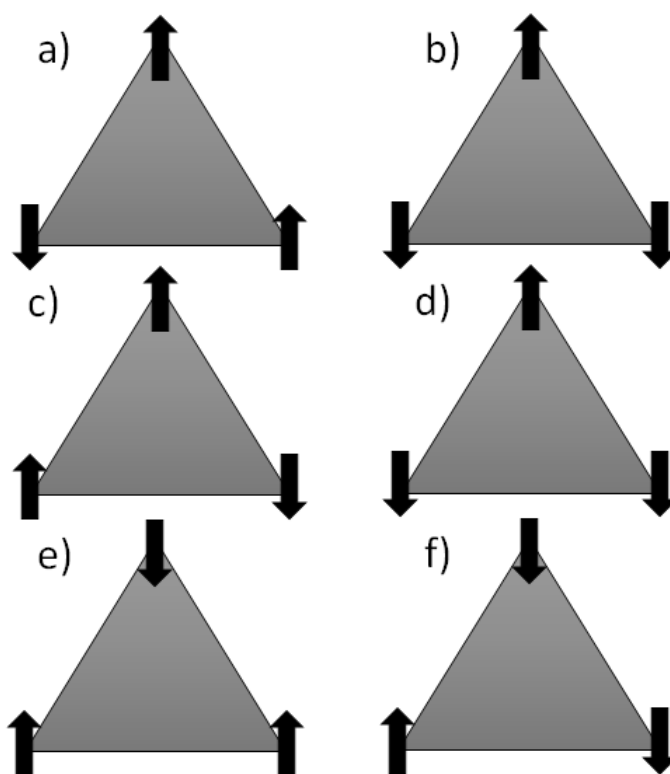


Figura 1.5. Degenerescência do estado fundamental para spins do tipo Ising em uma rede triangular. Cada triângulo representa uma das seis possíveis configurações onde apenas duas interações antiferromagnéticas são satisfeitas.

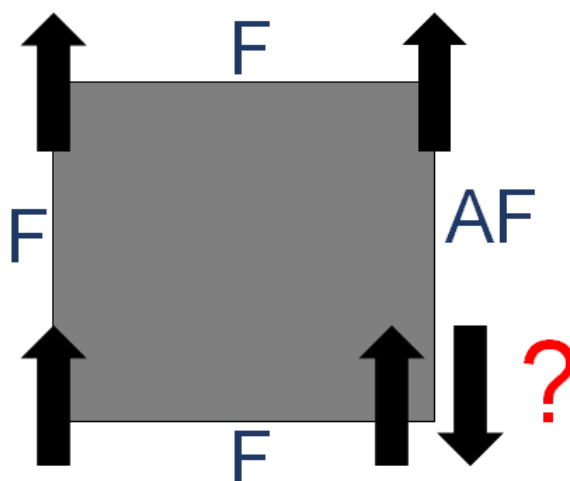


Figura 1.6. Exemplo de frustração devido a interações mistas. F indica interações ferromagnéticas enquanto AF antiferromagnéticas. Note que o spin do canto inferior direito não consegue satisfazer as duas ligações com seus vizinhos.

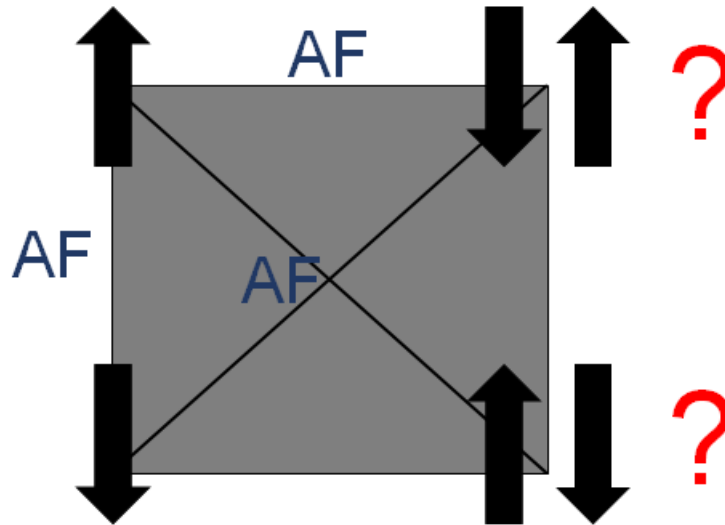


Figura 1.7. Exemplo de frustração devido a inclusão de segundos vizinhos na rede quadrada. Nesse caso os dois spins da direita estão frustrados.

de Néel. Sob dopagem, o sistema perde rapidamente sua ordem de longo alcance, em um valor crítico de dopagem, passando para um estado desordenado.

A natureza desta desordem deve ser investigada, uma vez que existem várias possibilidades de estados fundamentais desordenados [16]. Destacamos aqui os estados de dímeros ou estado de ligação de valência (*valence bond state*-VBS). O estado de menor energia do Hamiltoniano de Heisenberg com interação antiferromagnética, estado singlete com spin total nulo, é comumente denominado como um VBS⁹ ou um dímero¹⁰. Costuma-se representar uma ligação de valência ou um dímero como uma linha sólida ligando dois sítios, como na figura 1.8.

Uma rede quadrada com N sítios pode ter um máximo de $N/2$ ligações de valência (VB). Existem várias possibilidades de arranjos das $N/2$ ligações, cada possibilidade correspondendo a um estado VB. Por exemplo, dentre as muitas combinações de ligações teremos uma com ligações apenas na vertical e outra na horizontal (veja figura 1.9). A combinação linear de todos os possíveis estados corresponde ao estado VBS.

Se cada estado VBS tiver a mesma amplitude e além disso os coeficientes da combinação linear dependerem da distância entre o par de singletos, teremos o estado ressonante chamado *Resonating Valence Bond*-RVB. A diferença básica entre o

⁹Ligação covalente entre um par de átomos cujos orbitais estão em um estado de sobreposição, e seus elétrons formam um singlete devido à interação antiferromagnética.

¹⁰Dois elementos iguais que passam a se comportar como um elemento independente. No nosso caso, elementos que ocupam dois sítios.

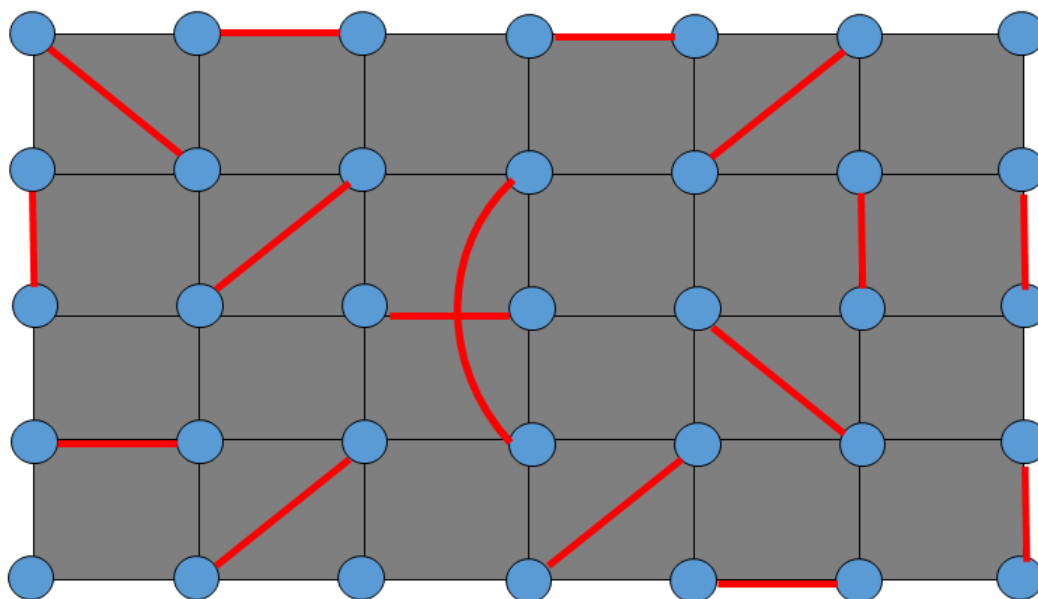


Figura 1.8. Representação de ligações de valência ou dímeros. Os pontos representam os sítios da rede. As linhas vermelhas, ligando dois sítios, representam os dímeros, que podem ser entre primeiros vizinhos, segundos vizinhos, etc..

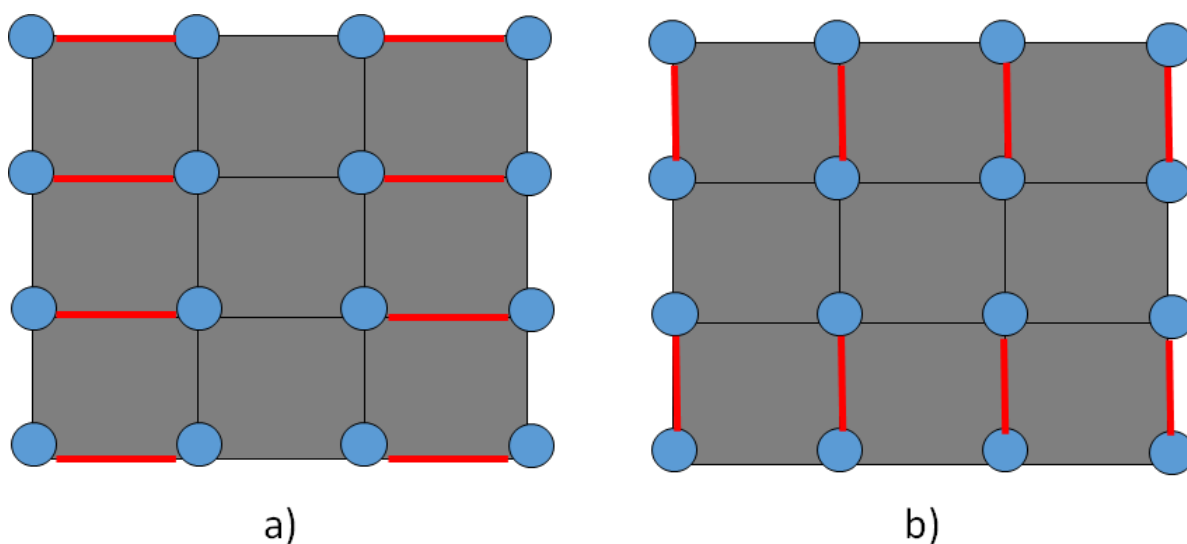


Figura 1.9. Possíveis estados de ligação de valência. A figura (a) representa a rede com dímeros na horizontal enquanto que (b) com dímeros na vertical.

VBS e o RVB é que no primeiro geralmente existe uma quebra de simetria, ou seja uma preferência de configuração, o que não acontece no estado ressonante. O estado RVB pode ser de longo ou de curto alcance. No caso das ligações de curto alcance o chamamos de estado quântico de líquido de spin (*Quantum Spin Liquid*-QSL) [23].

Apesar do estado fundamental desordenado não possuir ordem de longo alcance, este não deve ser prematuramente encarado como um simples paramagneto. Esta desordem pode apresentar diferentes tipos de ordem de curto-alcance, que podem ser estudados através de operadores cujos valores esperados sejam não nulos na região de desordem. Assim, definimos como paramagnético quântico (PQ) a um estado fundamental desordenado com algum tipo de ordem de curto-alcance, que deve ser diferente do estado paramagnético canônico que não apresenta nenhuma ordem local.

Capítulo 2

Ordem-desordem no modelo de Heisenberg quase-unidimensional antiferromagnético com spin $\frac{1}{2}$

Nesse capítulo, estudaremos as propriedades do estado fundamental do modelo de Heisenberg espacialmente anisotrópico juntamente com alguns apelos experimentais e teóricos. O método variacional utilizado é descrito e as correspondentes fases quânticas são obtidas, bem como as transições quânticas entre as mesmas.

2.1 Modelo de Heisenberg quase-unidimensional antiferromagnético com spin $\frac{1}{2}$

O modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin semi-inteiro $1/2$ com interações espaciais anisotrópicas descreve muito bem sistemas magnéticos quase-unidimensionais, quando a interação ao longo de uma direção for bem maior que as interações das duas outras direções perpendiculares. Um exemplo de composto quase-unidimensional, baseado no Césio, é o Cs_2CuCl_4 que possui uma estrutura cristalina ortorrômbica [24]. Os íons de cobre Cu^{+2} carregam o spin $1/2$ e localizam-se ao longo de cadeias unidimensionais paralelas. A interação de troca entre cadeias dentro de um plano é bem menor que a interação de troca ao longo das cadeias, e por sua vez a interação das cadeias entre planos pode ser considerada desprezível. Isso faz com que o sistema possa ser modelado por uma rede plana triangular quase-unidimensional. Na verdade, as propriedades magnéticas desse composto concordam com resultados teóricos obtidos para o modelo de Heisenberg antiferromagnético quase-unidimensional [25] com interação de troca da

ordem de $J = (0.34 \pm 0.02)\text{meV}$ e uma pequena interação de troca entre cadeias no plano $J' = 0.175\text{meV}$. Para mais detalhes sobre este composto ver as referências [26] e [27]. Levando em consideração resultados experimentais como motivação, podemos ainda consultar os autores [28, 29, 30, 31, 32] que consideram o estado fundamental magnético do modelo em questão.

Embora nosso objetivo não seja tratar esses compostos experimentais, estaremos interessados na influência que anisotropias espaciais possam exercer no correspondente estado fundamental. Para isso vamos analisar a magnetização alternada (*staggered magnetization*), m_s , através do modelo de Heisenberg anisotrópico em uma rede quadrada simples que é definido pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle_x} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j + J' \sum_{\langle i,j \rangle_y} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j, \quad (2.1)$$

onde $\langle i, j \rangle_{x(y)}$ representa a soma sobre os primeiros vizinhos ao longo das direções $x(y)$ em uma rede quadrada, $\vec{\sigma}_i = (\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z)$ são os operadores de spin de Pauli em um sítio i , J e J' são as interações de troca do sistema também nas direções x e y da rede. Assumimos J sempre positivo, enquanto J' poderá assumir valores positivos ou negativos, influenciando o tipo de ordenamento do Hamiltoniano. Essas interações irão então competir no sentido de minimizar a energia a seu favor. Definiremos o parâmetro que caracteriza essa competição como a razão entre essas interações $\lambda = |J'|/J$, com $0 \leq \lambda \leq 1$. Notamos que o modelo é simétrico para $\lambda > 1$.

Para valores positivos de J' o sistema é caracterizado pelo estado fundamental clássico do modelo de Heisenberg com ordenamento antiferromagnético (AF). Devido as flutuações quânticas a magnetização alternada deve ser sempre menor que o valor clássico $1/2$ e além disso deve diminuir continuamente com λ de modo que $m_s = 1/2 - \mathcal{F}(\lambda)$, onde $\mathcal{F}(\lambda)$ é uma função positiva e representa as flutuações quânticas do modelo.

No caso de $J' < 0$, temos o estado colinear antiferromagnético (CAF) que consiste nos spins alinhados paralelamente ao longo da interação J' (direção y) e antiparalelamente ao longo de J (direção x), como podemos ver na figura 2.1. Esperamos que *a priori* a mudança no valor de J' influencie a magnetização m_s de modo que $m_s(-J') \neq m_s(J')$, como acontece nos resultados obtidos via Monte Carlo quântico [33]. Enfatizamos que a teoria de campo médio não é sensível a esta mudança de sinal [34].

No limite isotrópico $\lambda = 1$ com $J' > 0$ na rede quadrada, o sistema exhibe um ordenamento AF com ordem de longo alcance em $T = 0$, com a magnetização assumindo o valor $m_s(\lambda = 1) \simeq 0.3075$. No entanto, em uma dimensão, ou seja $\lambda = 0$, o sistema

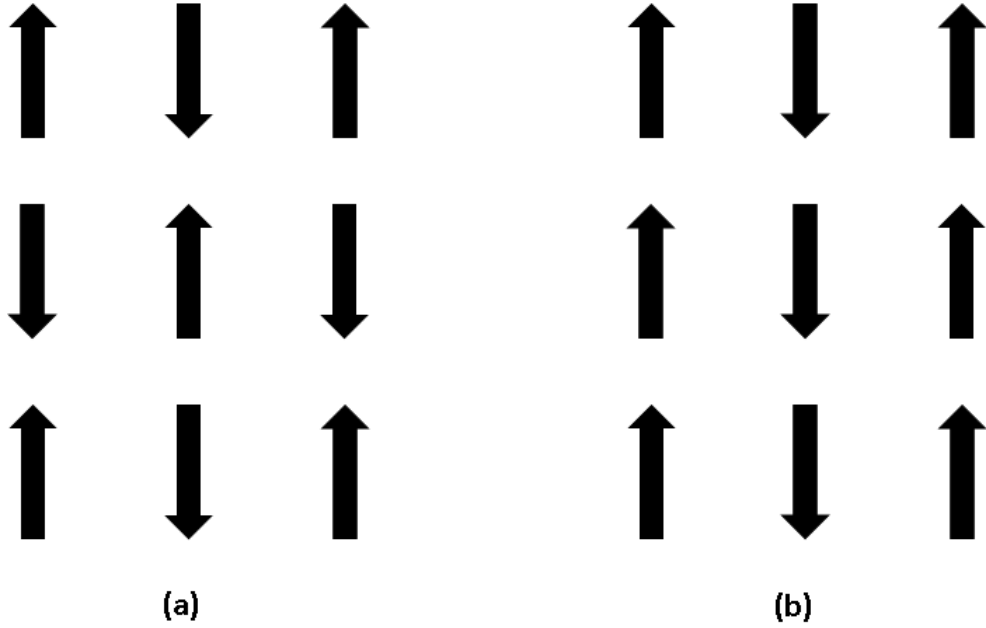


Figura 2.1. Ordenamento antiferromagnético (figura a) e colinear antiferromagnético (figura b). As setas indicam as componentes de spin na direção z .

não apresenta ordem de longo alcance, pois $m_s(\lambda = 0) = 0$ [35]. A solução exata para uma cadeia de Heisenberg antiferromagnética com spin-1/2 mostra que as excitações de menor energia são os chamados spinons [19] [36], bastante diferente das ondas de spin padrão. A temperatura finita e dimensão $d \leq 2$ as flutuações térmicas destroem a ordem de longo alcance dos modelos isotrópicos de Heisenberg nas fases antiferro ou colinear antiferro [13]¹¹.

Uma das questões que ainda permanece em aberto é a existência ou não de uma transição de ordem-desordem no modelo dado por 2.1 quando se varia o parâmetro λ . Por exemplo, a teoria de ondas de spin linear prevê um valor crítico $\lambda_c = 0.034$ [28], de modo que o sistema passa de um estado com ordem de longo alcance para $\lambda > \lambda_c$ a um estado de líquido de spin AF com ordem de curto alcance para $\lambda < \lambda_c$. O método grupo de renormalização prevê $\lambda_c = 0.047$ [37], aproximações em séries dão $\lambda_c < 0.002$ [32] e estudos de teoria de campos indicam $\lambda_c < 0.1$ [38]. Entretanto, alguns autores obtêm um valor crítico nulo $\lambda_c = 0$ [28, 30, 39, 40]. Salientamos que um valor nulo é um resultado muito mais plausível, uma vez que o modelo de Heisenberg AF com spin-1/2 em uma dimensão não apresenta lacuna (*gap*). Em particular, tratamentos com aproximações de campo médio mostram que a magnetização deve apresentar um comportamento $m_s(\lambda) \simeq \lambda^{1/2}$, que está relacionado à argumentos de relações de escala

¹¹O teorema de Mermin-Wagner afirma que: Não existe quebra espontânea de simetrias contínuas a temperatura finita em uma ou duas dimensões

[41]. Por outro lado, a teoria de ondas de spin renormalizada prevê um comportamento logarítmico $m_s(\lambda) \simeq 1/\ln(1/\lambda)$, que difere totalmente dos argumentos de escala. Isso deixa claro, que ainda existem questões fundamentais relacionadas ao modelo de Heisenberg em baixas dimensões a serem resolvidas, servindo como principal motivação para tratar este modelo com técnicas alternativas, como é o caso do método variacional a seguir.

2.2 Método variacional

Para investigar o comportamento das magnetizações alternada e CAF, bem como o valor crítico λ_c usaremos um método variacional. Nesta técnica a aproximação consiste em considerar as flutuações em torno do estado fundamental, em uma determinada fase, através de um estado tentativa. Este estado tentativa engloba uma combinação linear de todos os estados possíveis para a fase estudada. Uma vez especificada a fase, obtém-se a energia do sistema que é minimizada através do método de Lagrange. Embora esse método seja bastante geral, vamos exemplificá-lo no estudo do presente modelo, sendo sua generalização para estudo de outros sistemas feita de maneira bem direta.

2.3 Método variacional no modelo Heisenberg quase-unidimensional antiferromagnético com spin $\frac{1}{2}$

Consideremos uma plaqueta em uma rede quadrada com os spins localizados em seus vértices, como na figura 2.2. Portanto, cada plaqueta possui quatro spins. A plaqueta principal é nomeada de A e sua vizinhança consiste das plaquetas B, C e D. Assim, definimos nosso estado tentativa como

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{l=1}^{N/4} |\phi_{0l}\rangle, \quad (2.2)$$

onde o produto é tomado sobre as $N/4$ plaquetas sem sobreposição, onde N é o número de spins na rede bidimensional. O estado de cada plaqueta é definido pela combinação linear de vetores na base σ^z , tais que $\sum_{i=1}^4 \langle \sigma_i^z \rangle = 0$. Os estados numerados por n , $|n\rangle$, podem ser escritos como $|1\rangle = \begin{vmatrix} + & - \\ - & + \end{vmatrix}$, $|2\rangle = \begin{vmatrix} - & + \\ + & - \end{vmatrix}$, $|3\rangle = \begin{vmatrix} + & + \\ - & - \end{vmatrix}$,

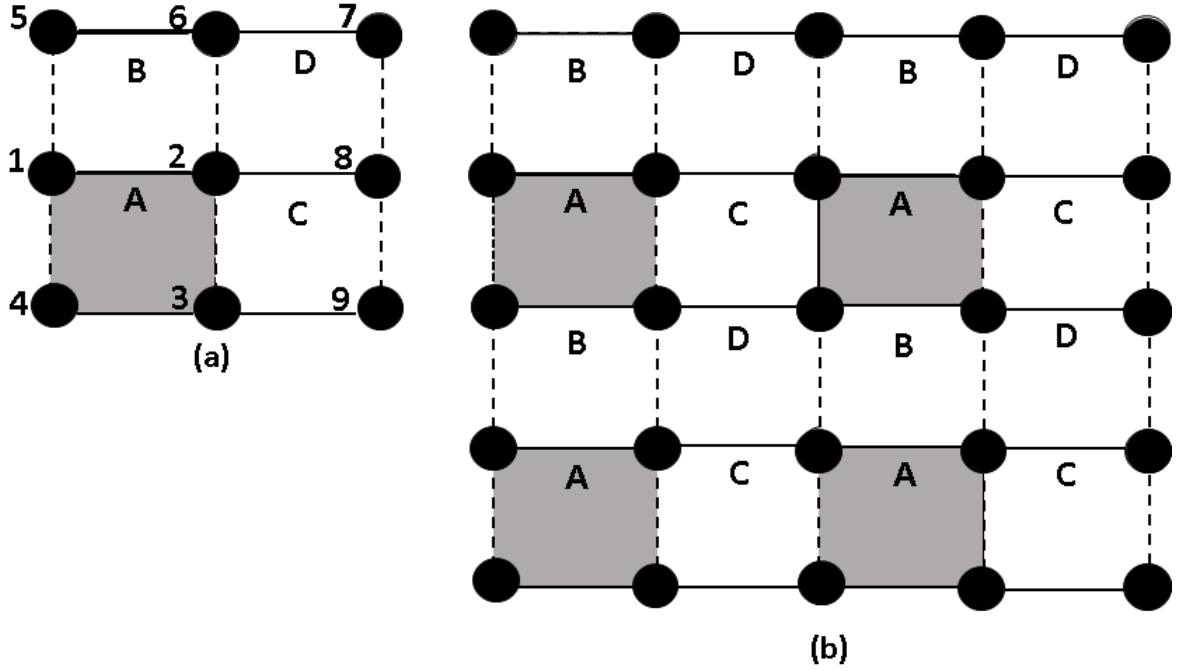


Figura 2.2. Em (a), temos a representação esquemática de uma rede quadrada com diferentes tipos de plaquetas A, B, C e D. Apenas as plaquetas em cinza possuem o estado fundamental dados por $|\phi_{0l}\rangle$. Em (a), temos os sítios numerados de 1 a 9, com 1–4 pertencendo a plaqueta A, enquanto 5–9 pertencem as demais plaquetas. Apenas nos sítios da plaqueta A os spins possuem as três componentes. Em (b), mostramos como a estrutura em (a) se repete para formar uma rede quadrada infinita.

$|4\rangle = \begin{vmatrix} - & + \\ - & + \end{vmatrix}$, $|5\rangle = \begin{vmatrix} - & - \\ + & + \end{vmatrix}$ e $|6\rangle = \begin{vmatrix} + & - \\ + & - \end{vmatrix}$. Então, a combinação linear destes estados fica

$$|\phi_{0l}\rangle = \sum_{n=1}^6 a_n |n\rangle_l. \quad (2.3)$$

Os coeficientes a_n acima correspondem aos parâmetros variacionais do método e obedecem a condição de normalização $\sum_{n=1}^6 a_n^2 = 1$. O valor médio de cada operador de spin na plaqueta é dado por $\langle \tilde{\sigma}_i \rangle = m_i \hat{z}$, onde $i = 1, 2, 3, 4$. A magnetização é definida como a média da componente z do operador de spin, para um sítio i na plaqueta, que pode ser obtido de $m_i = \langle \sigma_i^z \rangle = \langle \phi_{0l} | \sigma_i^z | \phi_{0l} \rangle$. Os valores médios das componentes x e y são nulas.

Usando o estado tentativa definido pela equação 2.3, obtemos a magnetização

para cada sítio

$$\begin{cases} m_1 = 2(xu + yv - zw) \\ m_2 = 2(-xu + yv + zw) \\ m_3 = 2(xu - yv + zw) \\ m_4 = -2(xu + yv + zw) \end{cases}, \quad (2.4)$$

onde $x = (a_1 + a_2)/\sqrt{2}$, $y = (a_3 + a_5)/\sqrt{2}$, $z = (a_4 + a_6)/\sqrt{2}$, $u = (a_1 - a_2)/\sqrt{2}$, $v = (a_3 - a_5)/\sqrt{2}$, e $w = (a_4 - a_6)/\sqrt{2}$, e preservam a condição de normalização $x^2 + y^2 + z^2 + u^2 + v^2 + w^2 = 1$ [42] (não confundir com as componentes x e y espaciais).

A energia do estado fundamental, por spin e em unidades de J , é calculada por $E_0 = \langle \Psi_0 | \mathcal{H} | \Psi_0 \rangle / 4NJ$, e pode ser escrita como

$$E_0 = \langle \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \rangle_A + \lambda \langle \vec{\sigma}_2 \cdot \vec{\sigma}_3 \rangle_A + \langle \vec{\sigma}_3 \cdot \vec{\sigma}_4 \rangle_A + \lambda \langle \vec{\sigma}_4 \cdot \vec{\sigma}_1 \rangle_A + \\ \lambda \langle \vec{\sigma}_1 \rangle_A \cdot \langle \vec{\sigma}_5 \rangle_B + \lambda \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_A \cdot \langle \vec{\sigma}_6 \rangle_B + \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_A \cdot \langle \vec{\sigma}_8 \rangle_D + \langle \vec{\sigma}_3 \rangle_A \cdot \langle \vec{\sigma}_9 \rangle_D, \quad (2.5)$$

onde A, B, C e D correspondem as plaquetas da figura 2.2. Aqui é importante notar que as médias na plaqueta A são tratadas de forma exata, enquanto que nas plaquetas B, C e D usamos um desacoplamento do tipo campo médio.

Para tomar o valor médio de um determinado observável \mathcal{O} dentro da plaqueta, $\langle \mathcal{O} \rangle_\mu = \langle \phi_{0\mu} | \mathcal{O} | \phi_{0\mu} \rangle$ ($\mu = A, B, C, D$), usamos as propriedades dos operadores de Pauli para spin-1/2, ou seja, $\sigma^z |\pm\rangle = \pm |\pm\rangle$, $\sigma^x |\pm\rangle = |\mp\rangle$ e $\sigma^y |\pm\rangle = \pm i |\mp\rangle$. Assim podemos expressar a energia 2.5 em termos dos parâmetros variacionais. A energia variacional E_0 fica

$$E_0 = - \left(\frac{\lambda + 1}{2} \right) (x^2 + u^2) - 2(\lambda + 1)x^2u^2 + \frac{(1 - \lambda)}{2} [y^2 + v^2 - z^2 - w^2] + \\ 2(1 - \lambda)(y^2v^2 - z^2w^2) + 2x(y\lambda + z). \quad (2.6)$$

Com o conhecimento da energia variacional, temos que garantir que esta corresponda ao valor mínimo de energia no estado fundamental. Para isso usaremos o método dos multiplicadores de Lagrange, lembrando que este valor mínimo deve obedecer a condição de normalização, que funcionará como um vínculo do sistema.

O método consiste em minimizar o funcional

$$\mathcal{F}(x, y, z, u, v, w, \eta) = E_0 - \eta (x^2 + y^2 + z^2 + u^2 + v^2 + w^2 - 1), \quad (2.7)$$

onde η é o multiplicador de Lagrange, de modo que $\delta\mathcal{F} = 0$. Obtemos, após a minimi-

zação da equação 2.7, o seguinte sistema de equações não lineares acopladas

$$\left\{ \begin{array}{l} -(\lambda + 1)x(1 + 4u^2) + 2(y\lambda + z) = 2\eta x \\ (1 - \lambda)y(1 + 4v^2) + 2x\lambda = 2\eta y \\ -(1 - \lambda)z(1 + 4w^2) + 2x = 2\eta z \\ (\lambda + 1)u(1 + 4x^2) = 2\eta u \\ (1 - \lambda)v = 2\eta v \\ -(1 - \lambda)w = 2\eta w \end{array} \right. \quad (2.8)$$

Estas equações podem ser resolvidas numericamente e muitas soluções são possíveis, porém a mais estável corresponderá aquela que minimizará a energia.

Para resolvê-las devemos especificar o estado. Cada estado estará sujeito a determinadas condições de contorno que modificarão o funcional a ser minimizado e por conseguinte as equações 2.8. Por exemplo, podemos sempre encontrar a fase desordenada, onde $m_1 = m_2 = m_3 = m_4 = 0$, com energia maior que as fases ordenadas.

2.4 Resultados

Na fase AF, temos $J' > 0$ e na ausência de campos externos deveremos ter $m_1 = -m_2 = m_3 = -m_4$. As equações 2.4 deverão se adequar a esse estado, para isso os parâmetros variacionais para a fase AF ficam $v = w = 0$ e x, y, z , e u são $\neq 0$. Obtemos então $m_1 = 2xu$. A magnetização alternada é definida como $m_s = (m_1 - m_2 + m_3 - m_4)/4 = xu$. Portanto a solução dependerá dos parâmetros variacionais não nulos e da competição entre as interações de troca λ . O comportamento de $m_s = m_s(\lambda)$ é dado pela linha sólida (a) na figura 2.3, onde $m_A = m_s/2 = \langle \vec{S}_i^z \rangle$, e $\vec{S}_i = \frac{\vec{\sigma}_i}{2} (\hbar \equiv 1)$.

No limite isotrópico, $\lambda = 1$, temos que $m_A = 0.44$ que pode ser comparado ao resultado $m_A = 0.3075$ [35]. Além disso quando $\lambda \rightarrow 0$ a magnetização também vai a zero com $m_A \sim \lambda^{1/2}$, caracterizando um comportamento tipo campo médio.

Analisando a outra fase ordenada CAF, que acontece quando $J' < 0$, temos que $m_1 = -m_2 = -m_3 = m_4$. A partir das equações 2.4, essa condição é satisfeita para $u = w = 0$ e x, y, z e $v \neq 0$, deixando $m_1 = -2zw$. A magnetização alternada aqui é definida como $m_s = (m_1 - m_2 - m_3 + m_4)/4 = -2zw$. Na figura 2.3, a linha pontilhada (a) representa o comportamento da magnetização em função de λ da fase CAF (novamente $m_A = m_s/2$). Para $\lambda = 1$, obtemos $m_A = 0.46$ e o mesmo comportamento quando $\lambda \rightarrow 0$ observado no caso AF. Um resultado de extrema importância é a diferenciação do método para os casos $J' > 0$ e $J' < 0$, como podemos perceber na figura para valores de $\lambda > 0.4$. Ressaltamos ainda que o valor crítico $\lambda_C = 0$ foi obtido, sendo este mais

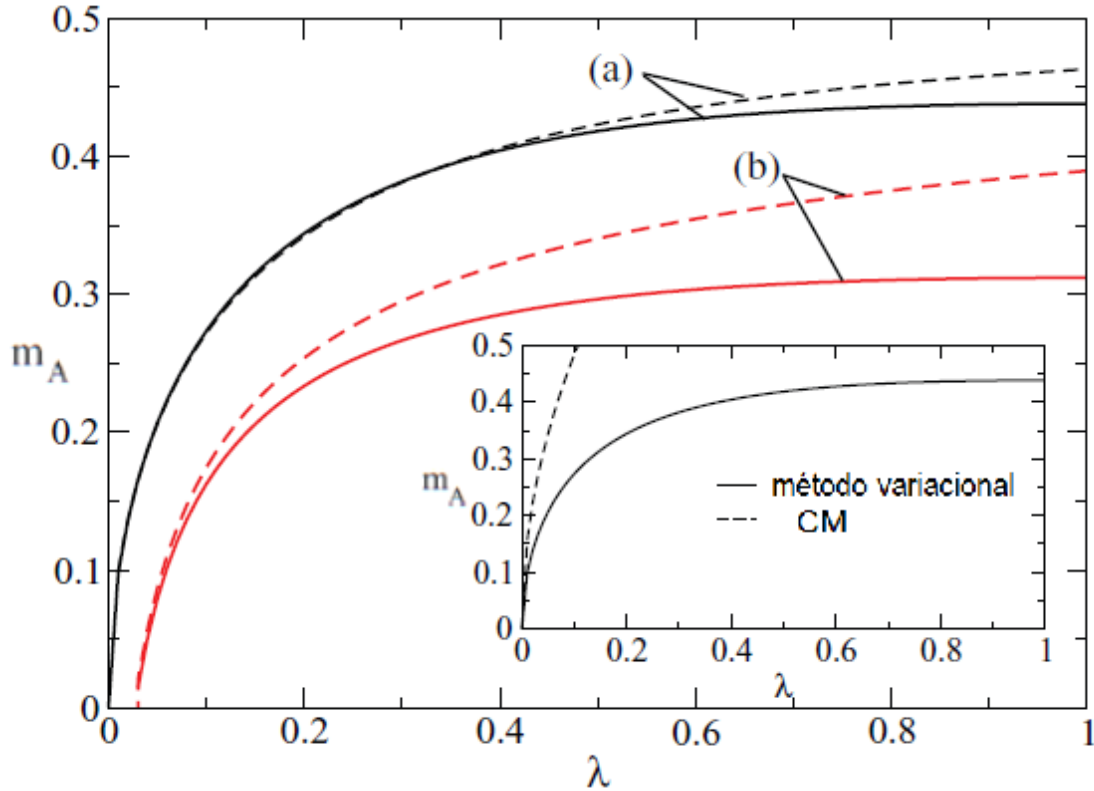


Figura 2.3. Magnetização alternada para as fases AF e CAF em função de $\lambda = |\lambda|$. Os resultados (a) correspondem ao método variacional para o caso AF e CAF, linha sólida e pontilhada, respectivamente. O conjunto (b) de curvas está relacionado aos mesmos resultados obtidos via ondas de spin. O gráfico inserido no canto inferior direito apresenta uma comparação entre os resultados de campo médio (MFA) e o método variacional para a fase AF.

consistente com a física do modelo uma vez que o modelo para spin $1/2$ não possui lacuna (*gap*).

2.5 Conclusão

Nossos resultados deixam claro que o comportamento da magnetização alternada difere nas fases AF e CAF, ou seja $m_A(J') \neq m_A(-J')$, e essa diferença se torna mais evidente a partir de $\lambda \simeq 0.4$. Antes deste valor, as linhas quase coincidem apresentando o mesmo comportamento assintótico $m_A \simeq \lambda^{1/2}$ no limite de $\lambda \rightarrow 0$. O mesmo comportamento crítico é obtido através de aproximações de campo médio [34, 43, 41], como podemos ver no gráfico inserido da figura 2.3. Essa correspondência para pequenos valores de λ não surpreende, uma vez que nossa aproximação variacional corresponde a uma

aproximação do tipo campo médio. Um comportamento diferente foi obtido para o modelo de Heisenberg AF por Sandvik [30] usando simulação de Monte Carlo quântico, revelando uma forte dependência logarítima do tipo $m_A \simeq \lambda^{1/2} \ln^{1/3}(\lambda)$, que não é reproduzida pelo presente método variacional. No limite oposto, $\lambda = 1$, observamos que a magnetização CAF é maior que a AF. Diferença que também foi confirmada recentemente pelo método de Monte Carlo [33]. Na figura 2.3, apresentamos uma comparação com resultados obtidos via teoria de ondas de spin [28], para o qual o valor crítico é $\lambda_c = 0.034$. Entretanto, no presente caso, o valor crítico é $\lambda_c = 0$ e dentro do esperado para o modelo [28, 30, 39, 40]. A ordem de longo alcance desaparece no valor crítico, sendo restaurada para valores infinitesimais de λ , mostrando que o sistema não apresenta lacuna (*gap*).

Em resumo, destacamos que embora o limite assintótico da magnetização alternada seja o mesmo obtido via teoria de campo médio, o comportamento global em função da razão entre as interações de troca λ tem um desempenho superior àqueles do tipo campo médio, como podemos observar no gráfico menor inserido. Argumentamos então que o presente método variacional é capaz de revelar o verdadeiro comportamento, dentro do esperado conforme referências citadas acima, do modelo de Heisenberg AF e CAF de spin-1/2 quase-unidimensional. Este trabalho gerou a publicação na revista *Physical Review E* com o título *Order-disorder quantum phase transition in the quase-one-dimensional spin-1/2 collinear antiferromagnetic Heisenberg model* [44]. Portanto, esses resultados nos motivaram a usar o método variacional para investigar sistemas quânticos mais complexos, como é o caso do modelo estudado no próximo capítulo.

Capítulo 3

Estudo do estado fundamental do modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético spin- $\frac{1}{2}$

Aqui usaremos o método variacional descrito no Capítulo 2 para estudar o estado fundamental do modelo de Heisenberg com uma anisotropia de troca nas componentes x, y dos operadores de spin e frustração devido às interações antiferromagnéticas entre segundos vizinhos em uma rede quadrada (veja figura 1.7). Analisaremos a magnetização alternada para as fases ordenadas (AF e CAF) e a dimerização da fase desordenada, em função da anisotropia e do parâmetro de frustração do sistema. Um estudo detalhado dos limites referentes a anisotropia também é apresentado.

3.1 Modelo $J_1 - J'_1 - J_2$

Como discutido anteriormente, os modelos frustrados bidimensionais têm despertado grande interesse [45, 46] dentro dos sistemas magnéticos, principalmente devido à combinação de frustração magnética e flutuações quânticas ser uma forma efetiva de destruir a ordem magnética, criando então novas fases quânticas.

Um ótimo exemplo de um sistema frustrado é o modelo de Heisenberg de spin-1/2 antiferromagnético com interações entre primeiros e segundos vizinhos em uma rede quadrada. Frequentemente, este modelo é designado por $J_1 - J'_1 - J_2$, sendo J_1 e J'_1 as interações de troca segundo as direções x e y , respectivamente, e J_2 a interação ao

longo das diagonais. O Hamiltoniano desse modelo pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & J_1 \sum_{\langle i,j \rangle_x} [(1 - \Delta_1)(\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + \sigma_i^z \sigma_j^z] + \\ & J'_1 \sum_{\langle i,j \rangle_y} [(1 - \Delta_1)(\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + \sigma_i^z \sigma_j^z] + \\ & J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} [(1 - \Delta_2)(\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + \sigma_i^z \sigma_j^z], \end{aligned} \quad (3.1)$$

onde $\langle i, j \rangle_x$ e $\langle i, j \rangle_y$ significam os primeiros vizinhos nas direções x e y , respectivamente, enquanto $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ representa os segundos vizinhos nas direções diagonais. As interações de troca J_1 , J'_1 e J_2 , todas positivas, atuam sobre as direções horizontal, vertical e diagonal da rede quadrada, respectivamente, como indicado na figura 3.1. Os parâmetros de anisotropia Δ_1 e Δ_2 foram introduzidos no modelo com o objetivo de se investigar os limites $\Delta_1 = \Delta_2 = 0$, para o qual temos o modelo de Heisenberg isotrópico para primeiros e segundos vizinhos, e $\Delta_1 = \Delta_2 = 1$ onde os operadores de spin se tornam do tipo Ising em todas as direções consideradas. Definimos ainda os

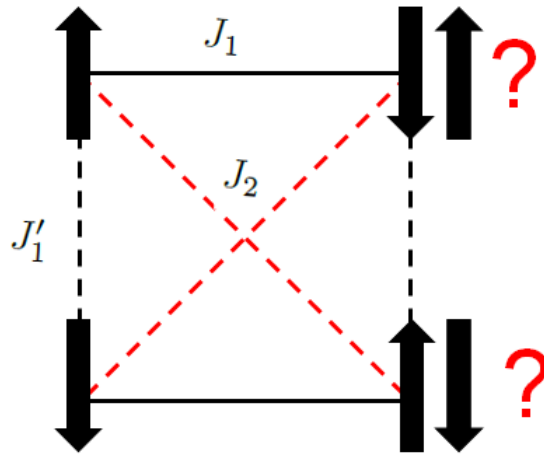


Figura 3.1. Rede quadrada com frustração devido a competição entre as interações de primeiros e segundos vizinhos. As interações de troca J_1 e J'_1 atuam nas direções horizontal e vertical, respectivamente, enquanto J_2 representa a interação ao longo das diagonais. As interrogações em vermelho localizam os sítios onde os spins estão frustrados.

parâmetros de competição entre as interações que atuam sobre os primeiros vizinhos como a razão $\lambda = J'_1/J_1$, e o parâmetro da frustração pela razão $\alpha = J_2/J_1$, induzindo competição entre primeiros e segundos vizinhos. Tanto λ quanto α podem variar entre 0 e 1. O modelo com $J'_1 = J_1$ é frequentemente chamado de $J_1 - J_2$.

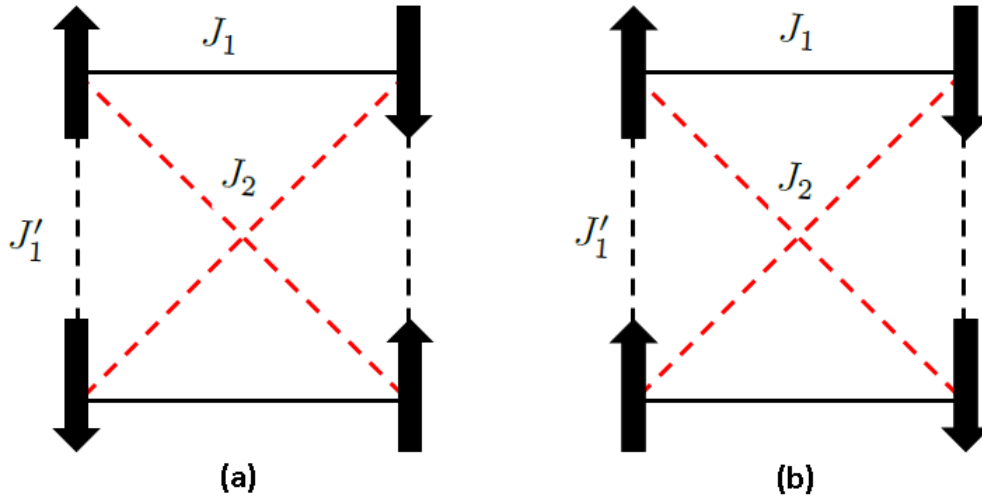


Figura 3.2. Estado fundamental do modelo de Heisenberg spin-1/2 em uma rede quadrada, nas fases ordenadas a) antiferromagnética (AF) e b) colinear antiferromagnética (CAF).

Para esse modelo existem também algumas questões relacionadas ao estado fundamental e as transições de fases que não estão ainda completamente esclarecidas. No que diz respeito ao estado fundamental para o modelo clássico, onde consideramos os spins como vetores de comprimento fixo, a figura 3.2 mostra os ordenamentos antiferromagnético e colinear antiferromagnético esperados (estes ordenamentos dependem naturalmente das competições entre os parâmetros λ e α). No caso quântico espera-se comportamento semelhante, porém as flutuações adicionais diminuem o valor esperado da componente z do spin. A magnetização de subrede na direção z para um valor fixo de λ é dada esquematicamente na figura 3.3 para os casos clássico e quântico. No caso clássico, para valores pequenos de α o sistema se encontra na fase de Néel (AF) que é a fase energeticamente mais favorável. Entretanto, para valores próximos de um o sistema se encontra na fase CAF. O interessante é que pode-se mostrar que as duas fases se encontram em $\alpha = 0.5$, não havendo a possibilidade de estado desordenado em $T = 0$. Em particular, para $\alpha = 0.5$ temos uma transição de primeira ordem onde as fases AF e CAF coexistem.

Por outro lado, a versão quântica do modelo sofre influência das flutuações quânticas que alteram o comportamento do sistema. Essas flutuações fazem com que a magnetização em $\alpha = 0$ seja menor que o valor de saturação, o mesmo ocorrendo no limite da fase colinear [47]. A frustração, por sua vez, ajuda a destruir a ordem de longo alcance, especialmente próximo ao ponto de transição de primeira ordem clássica $\alpha = 0.5$, porém podendo resultar numa fase magneticamente desordenada entre as fases AF e CAF [48] [49][veja figura 3.3(b)]. Como resultado de vários trabalhos,

existe atualmente um consenso de que a fase desordenada esteja entre $0.4 < \alpha < 0.65$ [50] [51] [52] [53]. Porém, quanto à natureza da fase desordenada alguns trabalhos apontam para um estado de VBS (*Valence Bond Solid*) [54], enquanto outros para uma fase de líquido de spin QSL [48]. Trabalhos mais recentes depõem em favor da fase VBS [55, 51, 56]. A ordem dessas transições para a fase desordenada também não

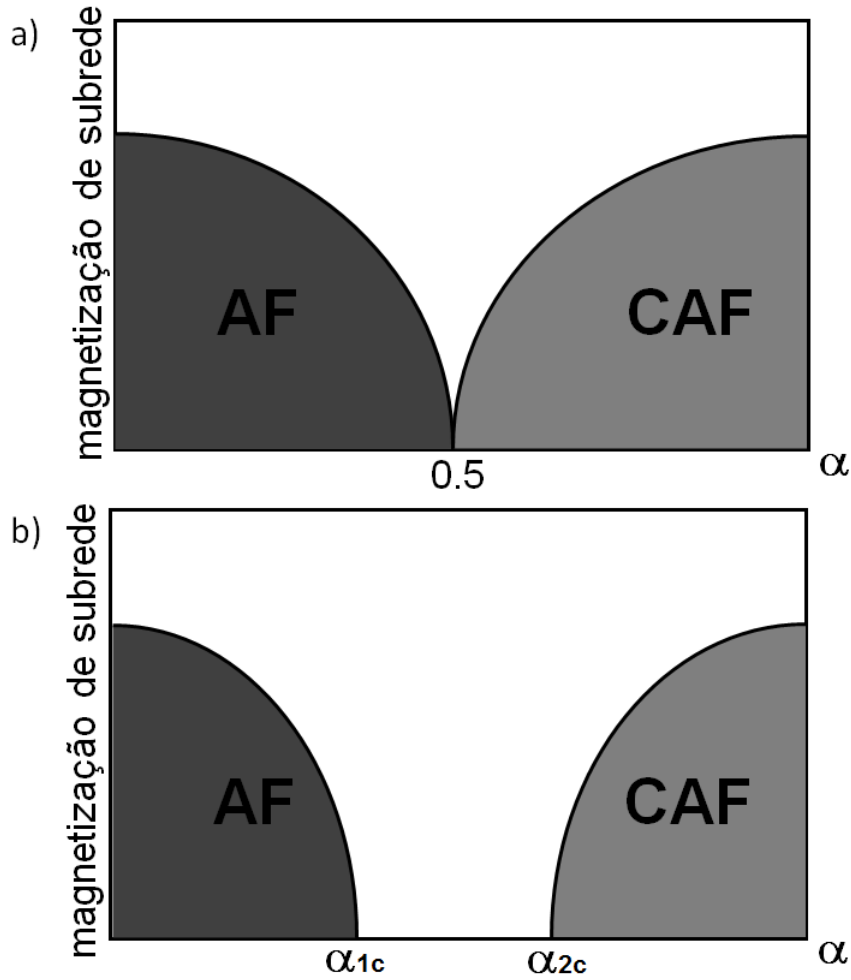


Figura 3.3. Magnetização esquemática de subrede em função da frustração α para $\lambda = 1$. AF e CAF designam as fases antiferromagnética e a colinear antiferromagnética, respectivamente. Em (a) temos o caso clássico onde ocorre uma quebra de simetria em $\alpha = 0.5$ e em (b) um possível caso quântico, onde α_{1c} e α_{2c} representam os valores críticos entre os quais tem-se a fase desordenada, de modo que para $\alpha < \alpha_{1c}$ temos a fase AF e para $\alpha > \alpha_{2c}$ a fase CAF.

está completamente estabelecida e é portanto motivo de muita controvérsia. Enquanto a transição da fase colinear para a desordenada é aceita como sendo de primeira ordem [50, 51, 56, 57, 53], alguns trabalhos indicam uma transição de primeira ordem entre a fases AF (ou de Néel) e desordenada [56] ou de segunda ordem, como nos trabalhos

[50, 51]. Portanto, temos as seguintes questões em aberto: existência ou não da fase desordenada perto de $\alpha = 0.5$, determinação dos valores α_{1c} e α_{2c} , e a ordem dessas transições.

A maioria dos trabalhos citados anteriormente considera $J_1 = J'_1$. Assim, o presente modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ representa uma extensão do modelo $J_1 - J_2$ e portanto corresponde a um ótimo sistema para estudar as questões acima dentro do método variacional.

3.2 Método variacional no modelo $J_1 - J'_1 - J_2$

O modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ é antiferromagnético e bidimensional, então a plaqueta a ser considerada corresponde a mesma ilustrada na figura 2.2. Portanto, o procedimento inicial é exatamente o mesmo do modelo estudado no capítulo anterior, a saber, $|\Psi_0\rangle = \prod_{l=1}^{N/4} |\phi_{0l}\rangle$, onde $|\phi_{0l}\rangle = \sum_{n=1}^6 a_n |n\rangle_l$, com os estados $|n\rangle$ definidos em 2.3. Obtemos também o mesmo conjunto de equações 2.4 para as magnetizações e usamos a mesma transformação canônica para o conjunto de parâmetros variacionais x, y, z, u, v, w [42] (novamente aqui, não confundir com as componentes x e y).

A energia do estado fundamental, dada por $E_1 = \langle \Psi_0 | \mathcal{H} | \Psi_0 \rangle / 4NJ_1$, agora depende das anisotropias Δ_1, Δ_2 e dos parâmetros de competição λ e α . Assim, a energia por spin e em unidades de J_1 fica

$$\begin{aligned}
E_1 = & \langle \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \rangle_A + \langle \vec{\sigma}_3 \cdot \vec{\sigma}_4 \rangle_A + \lambda [\langle \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_4 \rangle_A + \\
& \langle \vec{\sigma}_2 \cdot \vec{\sigma}_3 \rangle_A] + \alpha [\langle \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_3 \rangle_A + \langle \vec{\sigma}_2 \cdot \vec{\sigma}_4 \rangle_A] + \\
& \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_A \cdot \langle \vec{\sigma}_8 \rangle_D + \langle \vec{\sigma}_3 \rangle_A \cdot \langle \vec{\sigma}_9 \rangle_C + \\
& \lambda [\langle \vec{\sigma}_1 \rangle_A \cdot \langle \vec{\sigma}_5 \rangle_B + \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_A \cdot \langle \vec{\sigma}_6 \rangle_B] + \\
& \alpha [\langle \vec{\sigma}_1 \rangle_A \cdot \langle \vec{\sigma}_6 \rangle_B + \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_A \cdot \langle \vec{\sigma}_5 \rangle_B + \\
& \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_A \cdot \langle \vec{\sigma}_7 \rangle_D + \langle \vec{\sigma}_6 \rangle_A \cdot \langle \vec{\sigma}_8 \rangle_D + \\
& \langle \vec{\sigma}_2 \rangle_A \cdot \langle \vec{\sigma}_9 \rangle_C + \langle \vec{\sigma}_3 \rangle_A \cdot \langle \vec{\sigma}_8 \rangle_C].
\end{aligned} \tag{3.2}$$

Para obter o valor esperado de cada observável dentro da plaqueta devemos considerar os operadores de Pauli para o spin 1/2. Conseqüentemente, a energia em função

dos parâmetros variacionais é dada por

$$\begin{aligned}
 E_0 = & 2(1 - \Delta_1)(z + \lambda y)x + 2(1 - \Delta_2)\alpha yz + \\
 & - \frac{1}{2}[(1 + \lambda - \alpha)(x^2 + u^2) + (\lambda + \alpha - 1)(y^2 + v^2) + \\
 & (1 - \lambda + \alpha)(z^2 + w^2)] + 2[(3\alpha - \lambda - 1)x^2u^2 + \\
 & (1 - \lambda - 3\alpha)y^2v^2 + (1 + \lambda - 3\alpha)z^2w^2].
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Novamente, devemos minimizar a energia para obtermos o comportamento físico do modelo $J_1 - J'_1 - J_2$. Através da equação 2.7, fazendo $\delta\mathcal{F} = 0$ tem-se

$$\left\{ \begin{array}{l}
 2(1 - \Delta_1)(z + \lambda y) + [(\alpha - \lambda - 1) + \\
 4(3\alpha - \lambda - 1)u^2]x = 2\eta x \\
 \\
 2(1 - \Delta_1)\lambda x + 2(1 - \Delta_2)\alpha z + [(1 - \lambda - \alpha) + \\
 4(1 - \lambda - 3\alpha)v^2]y = 2\eta y \\
 \\
 2(1 - \Delta_1)x + 2(1 - \Delta_2)\alpha y + [(\lambda - \alpha - 1) + \\
 4(1 + \lambda - 3\alpha)w^2]z = 2\eta z \\
 \\
 [(\alpha - \lambda - 1) + 4(3\alpha - \lambda - 1)x^2]u = 2\eta u \\
 \\
 [(1 - \lambda - \alpha) + 4(1 - \lambda - 3\alpha)y^2]v = 2\eta v \\
 \\
 [(\lambda - \alpha - 1) + 4(1 + \lambda - 3\alpha)z^2]w = 2\eta w
 \end{array} \right. , \tag{3.4}$$

lembrando que η é o multiplicador de Lagrange.

O conjunto de soluções estáveis é associado a energia mínima do sistema. Agora vamos estudar cada fase para analisarmos as transições quânticas das fases ordenadas AF e CAF para a desordenada.

3.3 Resultados

Analisamos as magnetizações das fases ordenadas AF e CAF. Na fase de Néel exigimos que $m_1 = -m_2 = m_3 = -m_4$, as quais são satisfeitas para $v = w = 0$. Na fase colinear temos que $m_1 = m_2 = -m_3 = -m_4$, o que implica em $u = w = 0$. Com isso estudamos cada fase e seu comportamento em relação às anisotropias do modelo.

Em uma primeira análise, fizemos $\Delta = \Delta_1 = \Delta_2$ e $\lambda = 1$. O comportamento da magnetização alternada e colinear antiferromagnética em função do parâmetro de anisotropia Δ são dadas, respectivamente, pelas figuras 3.4(AF) e 3.5(CAF), para vários valores da frustração $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$. Observamos na figura 3.4 que para $\Delta = 1$ a magnetização

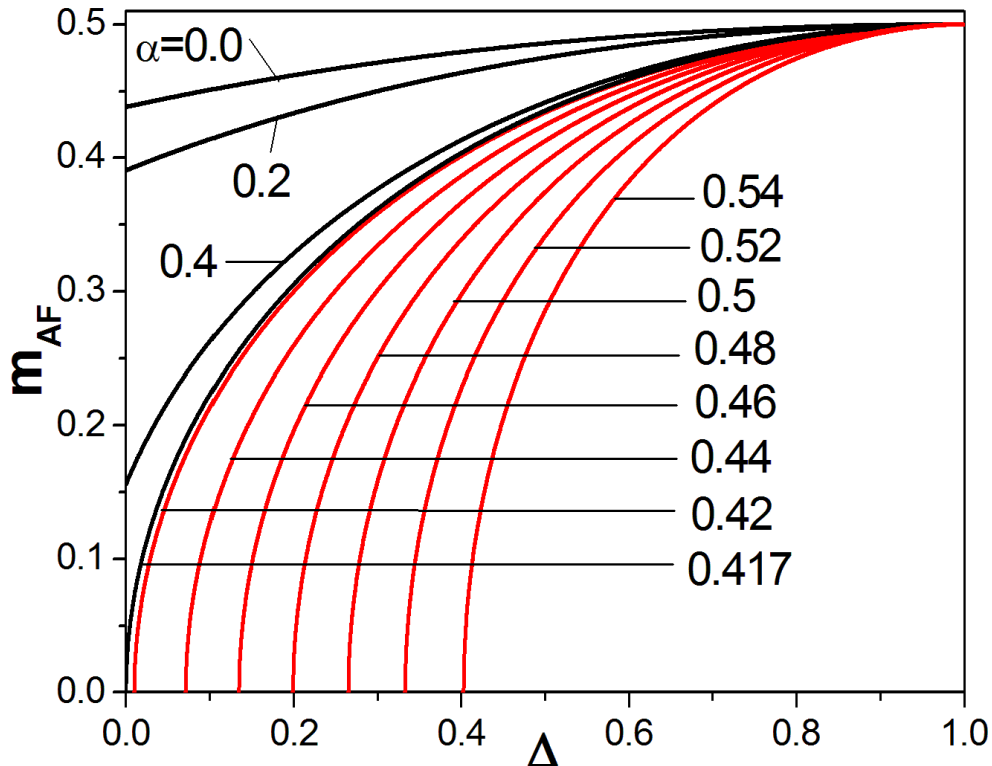


Figura 3.4. Magnetização alternada na fase AF em função de Δ , para vários valores de α . As linhas vermelhas são para os valores de α onde temos a transição de fase quântica.

é sempre 0.5, independente dos valores α de frustração. Isso está relacionado ao fato de nesse limite termos o modelo clássico. Para $\alpha = 0$, sem frustração, a medida que a anisotropia de troca diminui, a magnetização também diminui, e atinge o valor $m_A = 0.437$, menor que meio devido as flutuações quânticas, como discutido anteriormente no texto [47]. O comportamento é o mesmo para pequenos valores de α . Porém, para $\alpha > 0.417$ a magnetização se anula antes de $\Delta = 0$, implicando numa transição de fase quântica contínua, ou de segunda ordem. Finalmente, para $\alpha > 0.54$, não temos mais a fase AF.

Na figura 3.5, obtemos a magnetização da fase CAF em função da anisotropia

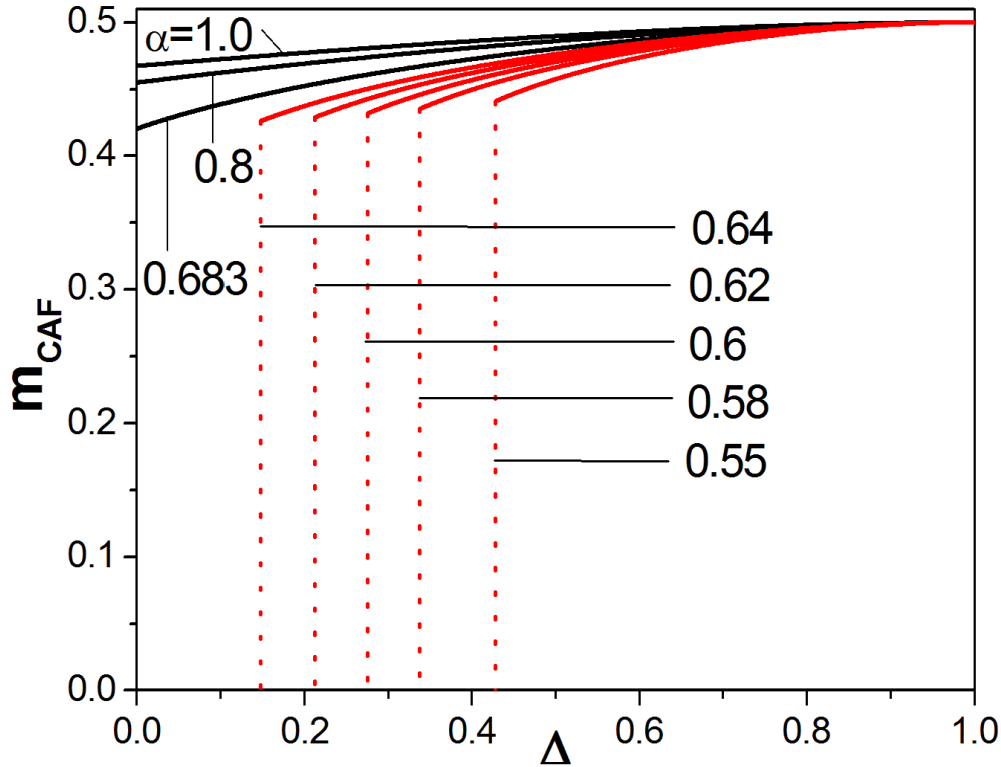


Figura 3.5. O mesmo da figura 3.4 para a magnetização CAF.

Δ para alguns valores de frustração. Notamos um comportamento semelhante ao do gráfico anterior (figura 3.4), porém agora os valores de frustração são próximos de 1, exatamente para que tenhamos a fase CAF como a mais estável. As transições acontecem agora para $\alpha < 0.683$ e para $\alpha < 0.55$ não temos mais a fase CAF estável. Notamos ainda, claramente, uma descontinuidade na magnetização, mostrando tratar-se de uma transição de primeira ordem. Essa faixa de valores de α obtidos pelo presente método variacional está dentro do aceito na literatura [50, 51, 52, 53].

É interessante analisar o comportamento da magnetização em função da frustração para alguns valores de Δ (veja figura 3.6), onde distinguimos as magnetizações alternada e colinear antiferromagnética fazendo $m_A = m_{AF}$ e $m_A = m_{CAF}$, respectivamente. Observamos mais uma vez o parâmetro de ordem (magnetização) indo a zero de forma contínua para fase AF e descontínua para a fase CAF, configurando assim transições de segunda e primeira ordem para uma fase desordenada, respectivamente, concordando com os resultados das referências [50, 51]. Em $\Delta = 0$, temos a fase mag-

neticamente desordenada entre as fases ordenadas e com o aumento da anisotropia Δ observamos uma progressiva diminuição da região da fase desordenada até seu desaparecimento completo em $\Delta = 0.432$. A partir deste ponto, as transições passam a acontecer de forma direta e descontínua entre as fases ordenadas AF e CAF. No limite de $\Delta = 1$, vemos claramente que a frustração não desempenha qualquer influência sobre as magnetizações, que permanecem no valor clássico para todo valor de α , como esperado. Com a coleção dos pontos de transição α_1 e α_2 , obtemos o diagrama

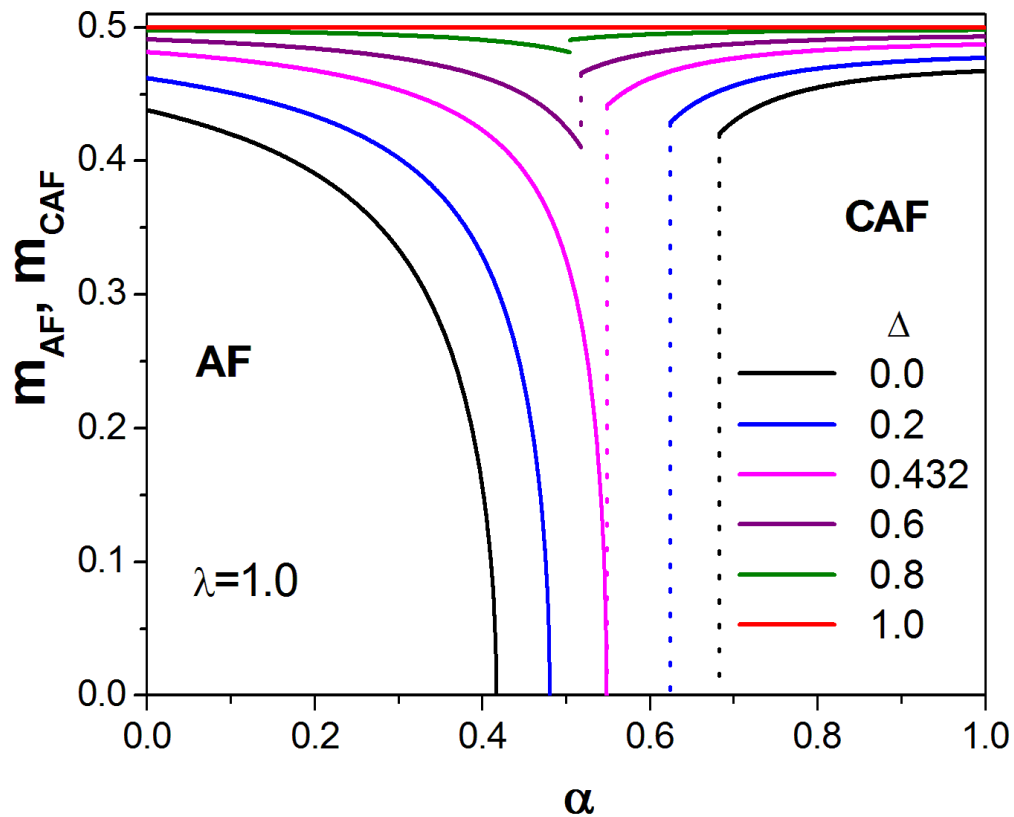


Figura 3.6. Magnetização alternada para as fases AF e CAF em função de α , para alguns valores de Δ . Uma fase desordenada é obtida entre as fases ordenadas e desaparece para $\Delta = 0.432$. Para $\Delta = 1$, linha vermelha, obtemos o comportamento clássico. As linhas pontilhadas indicam transições descontínuas.

de fase na figura 3.7. A linha sólida e as linhas pontilhadas representam transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. Chamamos atenção para o ponto em negrito (0.548, 0.432) onde a linha de transição de segunda ordem termina na linha de primeira ordem. Este ponto é designado por ponto crítico terminal. Na linha de primeira ordem temos a coexistência entre as fases AF e CAF e entre as fases CAF e

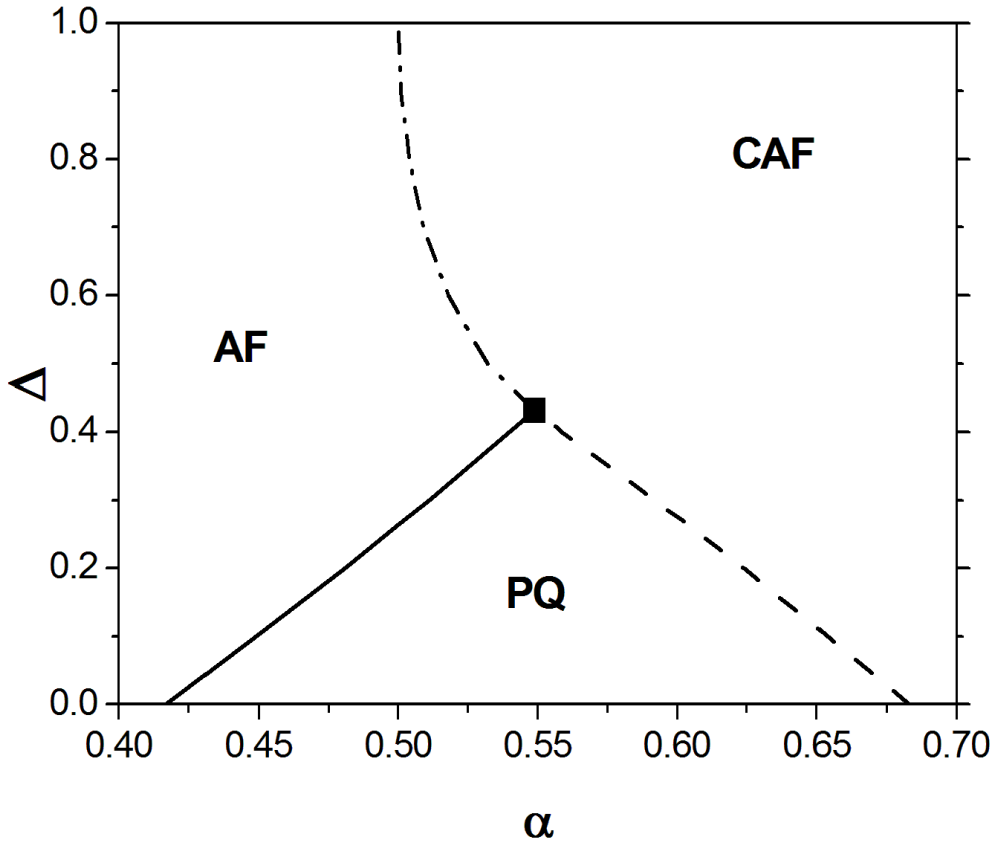


Figura 3.7. Diagrama de fase no plano $\alpha - \Delta$ perto da região de $\alpha = 0.5$ para o modelo $J_1 - J_2$, i.e. quando $\lambda = 1$, anisotrópico em uma rede quadrada. A linha sólida e as tracejadas representam transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. O ponto em negrito corresponde ao ponto crítico terminal localizado em $(0.548, 0.432)$. AF representa a fase antiferromagnética, CAF a fase colinear AF e PQ a fase paramagnética quântica ou desordenada.

desordenada. Então, observamos que para pequenos valores de Δ existe uma fase desordenada entre os pontos α_1 e α_2 e que a diferença entre estes valores vai se tornando cada vez menor, conforme intensificamos o valor da anisotropia Δ , até convergirem no ponto crítico terminal. O surgimento da região desordenada é prevista pelos trabalhos [48] [49].

Os resultados acima foram obtidos para o caso espacialmente isotrópico $\lambda = 1$. Para $\lambda = 0.8$, os correspondentes resultados estão mostrados nos gráficos das figuras 3.8, 3.9, 3.10. Explorando valores cada vez menores de λ obtemos o diagrama de fases, Fig. 3.11. De modo geral, o comportamento dos diagramas são semelhantes ao obtido para $\lambda = 1$. A principal diferença encontrada ao considerarmos λ ligeiramente menor é que as transições para a fase desordenada começam a acontecer para valores menores de

frustração, sendo $\alpha = 0.362$ para as transições da fase AF e $\alpha = 0.518$ para as da fase CAF. Isso significa que enfraquecer a interação de troca J_1' deixa o sistema mais sensível a interação de segundos vizinhos J_2 , e como resultado temos uma área desordenada progressivamente menor. No limite $\lambda \rightarrow 0$ temos a fase colinear antiferromagnética como a única fase estável em toda região de α , refletindo o comportamento físico esperado. Podemos visualizar esse comportamento do ponto de vista do diagrama de fases no plano $\lambda - \alpha$ Fig.3.12. Quando o modelo é isotrópico, ou seja $\Delta = 0$, temos que a fase desordenada desaparece apenas na origem. O efeito de aumentar a anisotropia de troca, faz com que o ponto crítico saia da origem e se desloque ao longo do diagrama diminuindo a região paramagnética, até finalmente para $\Delta = 0.432$ a fase desordenada desaparece completamente, ficando apenas uma transição de fase direta de primeira ordem entre as fases ordenadas.

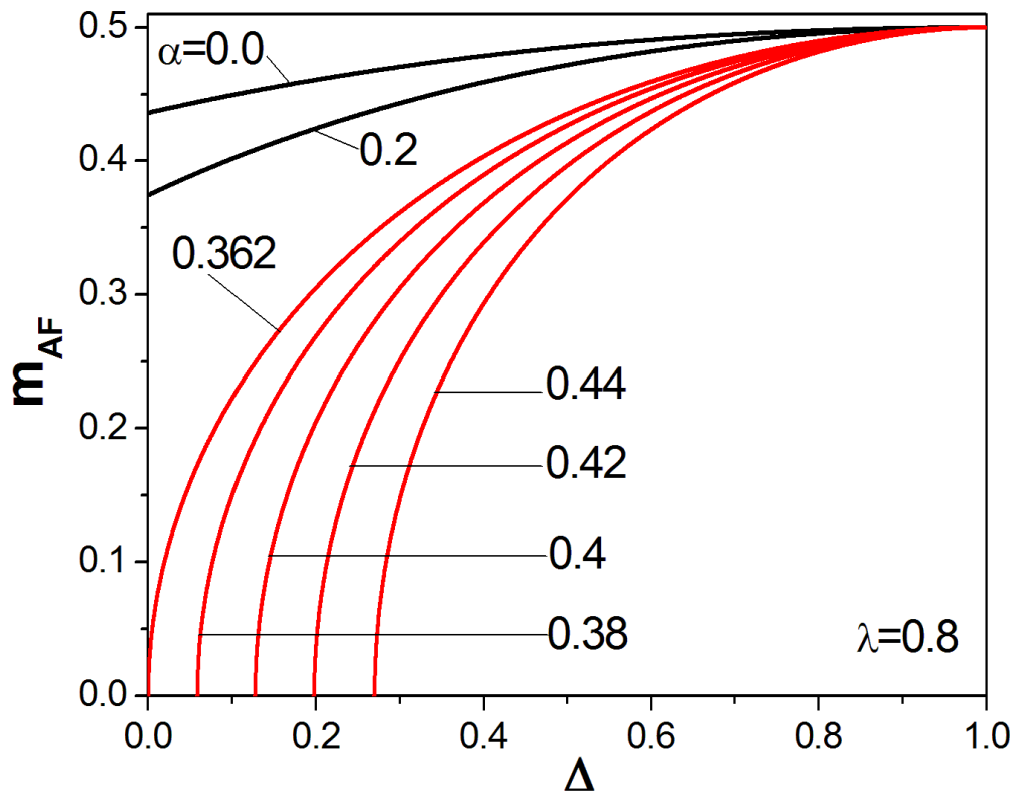


Figura 3.8. O mesmo da figura 3.4 para $\lambda = 0.8$.

Até aqui consideramos as anisotropias Δ_1 e Δ_2 iguais. O próximo passo é estudar o sistema fixando uma delas e permitindo que a outra varie normalmente no intervalo

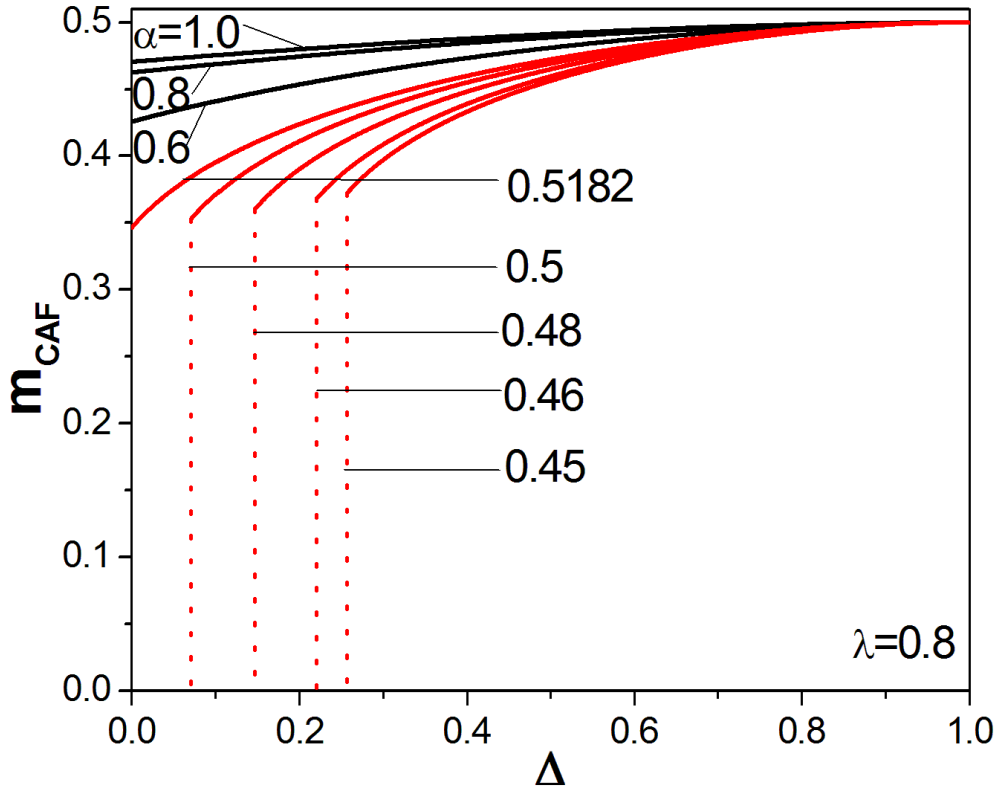


Figura 3.9. O mesmo da figura 3.5 para $\lambda = 0.8$.

de 0 e 1. Primeiramente, vamos considerar $\Delta_1 = 0$ e $\Delta_2 = \Delta$. Nesse caso, obtemos as magnetizações alternada m_{AF} e colinear antiferromagnética m_{CAF} em função da frustração para vários valores de Δ , figura 3.13. Notamos que ambas as magnetizações m_{AF} e m_{CAF} partem de valores menores que o valor de saturação clássica ($1/2$) para os limites $\alpha = 0$ e $\alpha = 1$, respectivamente. Além disso, as magnetizações m_{AF} seguem o mesmo comportamento a partir de $\alpha = 0$, diferenciando-se no ponto de transição para a fase desordenada para cada valor de Δ . Para $\alpha = 1$ observamos as magnetizações m_{CAF} partindo de valores diferentes para cada Δ considerado. Isso acontece, pois nessa região a anisotropia Δ_2 têm maior relevância uma vez que está associada a parte do Hamiltoniano com interações entre segundos vizinhos. As ordens das transições das fases ordenadas para a fase desordenada se mantem como antes. Na figura 3.14, temos o diagrama de fase para esse caso que mostra claramente que a fase desordenada não desaparece. A inclinação das linhas de transição de fase não são esperadas, uma vez que quando vamos para o limite Ising de $\Delta_2 = 1$ a fase desordenada aumenta.

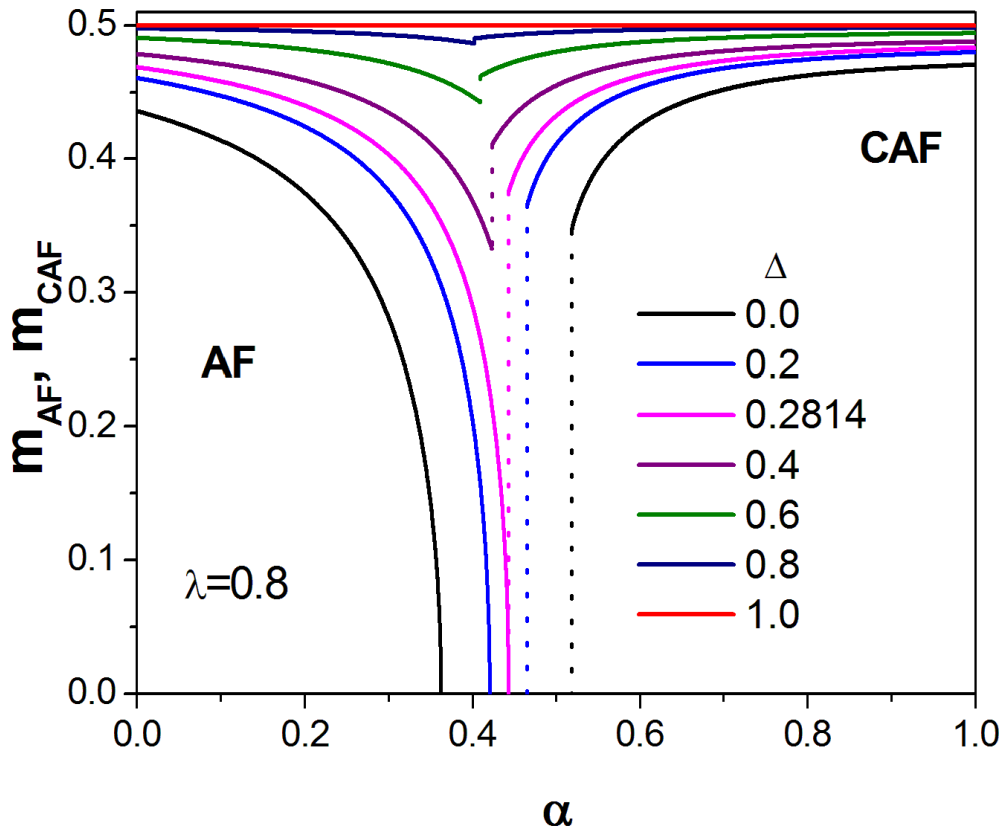


Figura 3.10. O mesmo da figura 3.6 para $\lambda = 0.8$.

Portanto, notamos que para $\Delta_1 = 0$ a fase desordenada persiste em toda a região de frustração considerada. Para entender por que isso acontece, vamos voltar ao cenário onde as anisotropias Δ_1 e Δ_2 são iguais. Quando $\Delta = 1$, temos o caso clássico que não possui fase desordenada, e no presente caso esse limite só pode ocorrer para Δ_2 , uma vez que fixamos $\Delta_1 = 0$. Portanto, entendemos que as flutuações quânticas induzidas pelo fato de termos fixado o Hamiltoniano de primeiros vizinhos como Heisenberg isotrópico faça com que a interação de segundos vizinhos seja incapaz induzir o fim da fase desordenada, e isso acontece até mesmo no limite de segundos vizinhos Ising ($\Delta_2 = 1$).

Ao considerarmos $\Delta_1 = 1$, a interação entre primeiros vizinhos se comporta como Ising. O impacto dessa escolha se reflete no gráfico da magnetização versus frustração dado pela figura 3.15 em função de Δ_2 . Notamos que para $\Delta_2 = 1$, o sistema se torna completamente Ising fazendo com que a magnetização fique fixa no valor clássico $1/2$ para qualquer valor de frustração. Ao diminuirmos o valor da anisotropia Δ_2 as mag-

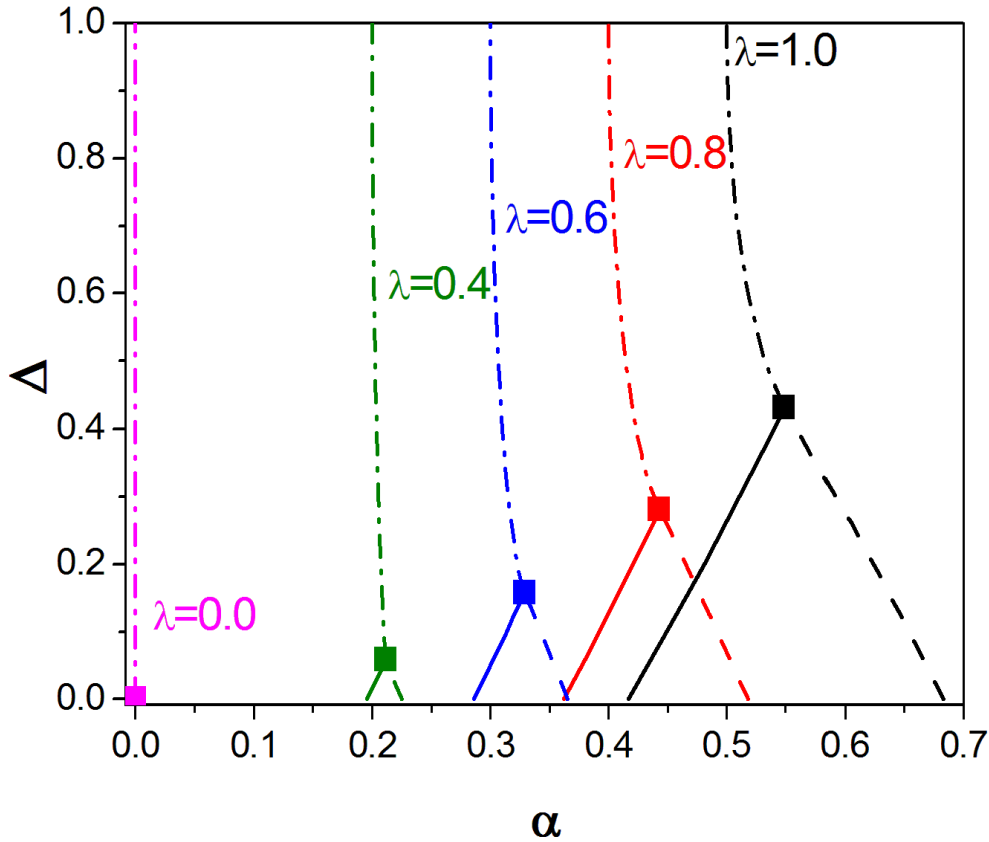


Figura 3.11. Comparação dos diagramas de fases no plano $\alpha - \Delta$ para diferentes valores de λ . A localização das fases AF, CAF e PQ é a mesma da figura 3.7 para cada λ de acordo com a cor, exceto para $\lambda = 0$ que possui apenas a fase colinear antiferromagnética. Os quadrados representam o ponto crítico terminal para cada valor de λ . Claramente, com $\lambda \rightarrow 0$ o ponto crítico terminal também vai à zero.

netizações da fase AF não sofrem mudança alguma. Entretanto, as magnetizações da fase CAF partem de valores ligeiramente mais baixos que $1/2$ em $\alpha = 1$ e não observamos uma diminuição gradativa destas magnetizações, ao contrário elas se mantêm fixas até uma transição de primeira ordem acontecer entre as fases ordenadas. A fase desordenada não surge para nenhum par (Δ, α) . Isso pode ser visualizado no diagrama de fase da figura 3.16, onde apenas uma linha de transição de fase de primeira ordem é encontrada entre as fases ordenadas e observamos a total ausência de fase desordenada. Notamos uma brusca mudança de comportamento dos diagramas de fases nos limites isotrópico e Ising adotados para a anisotropia Δ_1 . Onde para $\Delta_1 = 0$ (figura 3.14) temos a fase paramagnética acontecendo sempre presente, enquanto para $\Delta_1 = 0$ (figura 3.16) a fase é completamente ausente. Para entendermos melhor o que acontece,

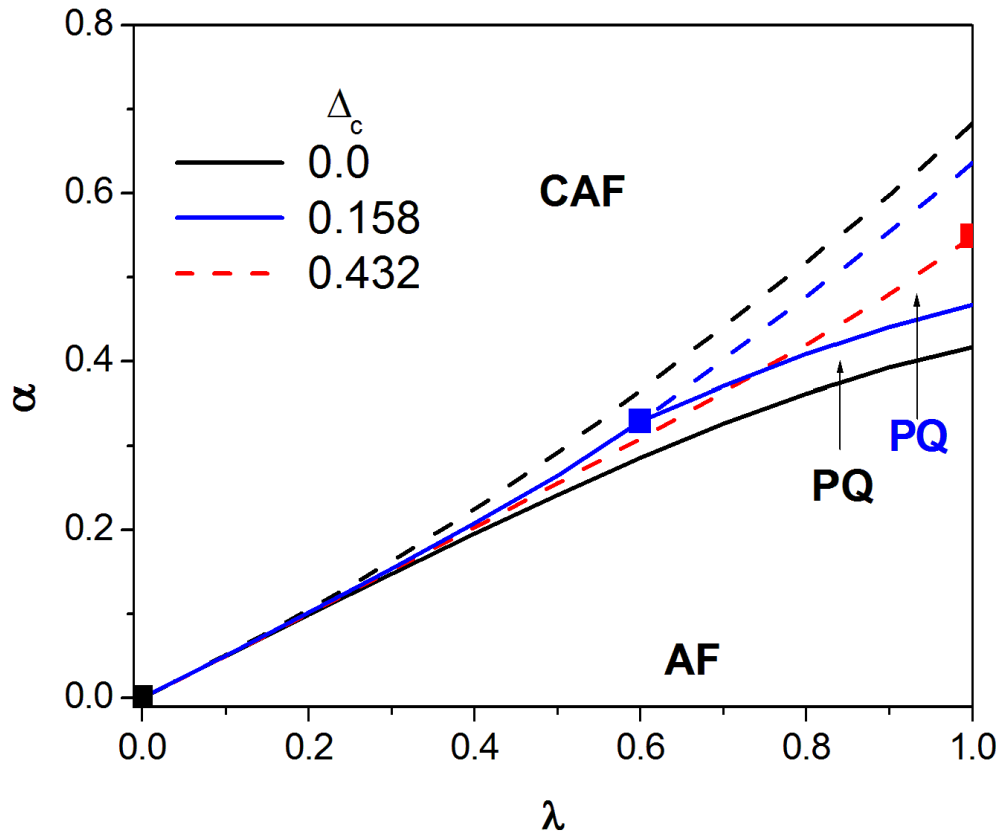


Figura 3.12. Diagrama de fase no plano $\lambda - \alpha$ para diferentes valores de Δ . As linhas tracejadas representam transições de primeira ordem e a linha sólida uma transição de segunda ordem. Os quadrados representam os pontos críticos terminais para cada valor de Δ . Em preto temos $\Delta = 0$, com o ponto crítico terminal na origem. Em azul $\Delta = 0.158$ com o ponto crítico terminal deslocado da origem na coordenada $\lambda = 0.6$ e finalmente em vermelho $\Delta = 1.0$ como o ponto crítico terminal na coordenada $\lambda = 1$.

analisemos os diagramas de fase obtidos para valores intermediários de Δ_1 . Pelo diagrama da figura 3.17, vemos que o ponto crítico terminal surge apenas em $\Delta_1 = 0.346$, marcando o ponto onde a fase desordenada termina no eixo $\Delta_2 = 0$. Continuando com o aumento de Δ_1 , observamos no diagrama 3.18 que o ponto crítico se desloca no sentido do aumento de Δ_2 apresentando uma fase desordenada progressivamente menor, até a fase desordenada desaparecer no último ponto crítico terminal para $\Delta_1 = 0.531$. No diagrama da figura 3.19, recuperamos o comportamento obtido para $\Delta_1 = 1$, ou seja, sem fase paramagnética e transição de fase de primeira ordem entre as fases ordenadas. Então, fica claro que dependendo do valor fixo de Δ_1 podemos estar em três regimes diferentes: (i) $0 < \Delta_1 < 0.346$ com fase desordenada sem ponto crítico

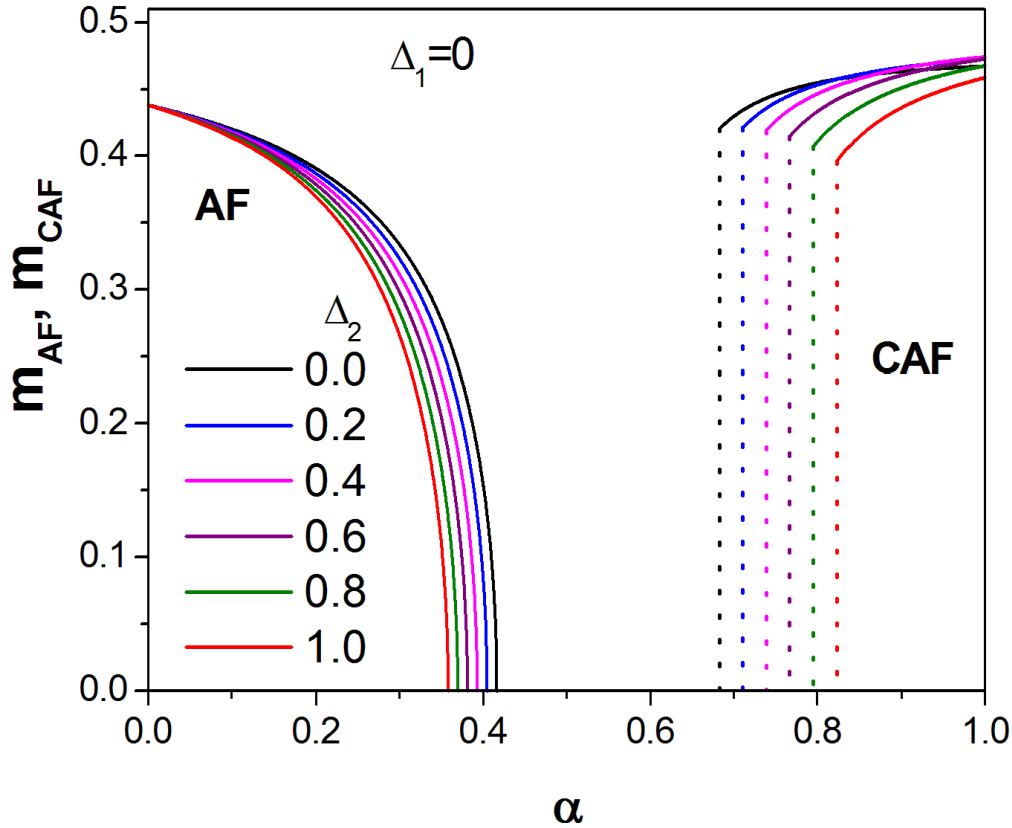


Figura 3.13. Magnetizações alternadas antiferro m_{AF} e colinear antiferro m_{CAF} em função da frustração para $\Delta_1 = 0$ e vários valores de $\Delta = \Delta_2$. As linhas pontilhadas partem dos pontos onde existe descontinuidade no parâmetro de ordem (magnetizações) e representam transições de primeira ordem.

terminal, (ii) $0.346 < \Delta_1 < 0.531$ com fase desordenada com ponto crítico terminal e (iii) $0.531 < \Delta_1 < 1.0$ sem fase desordenada. Com isso, fica completo o comportamento do modelo para valores fixos de Δ_1 .

Vamos agora investigar o comportamento que obtemos quando fixamos a anisotropia Δ_2 . No gráfico da figura 3.20 fixamos $\Delta_2 = 0$, notamos que as magnetizações são muito parecidas com o caso onde as anisotropias são iguais. A maior diferença reside no fato de que agora os valores de saturação para $\alpha = 1$ são menores dos que $1/2$. Isso é esperado, pois apenas na região onde a frustração é mais intensa é que as flutuações quânticas induzidas pela interação de segundos vizinhos desempenham um papel relevante. Obtemos também o diagrama de fase para este caso, que é dado pela figura 3.21. Podemos perceber que a existência do ponto crítico terminal é recuperada. Se por outro lado, fixarmos $\Delta_2 = 1$, i.e. considerando interações de segundos vizinhos tipo

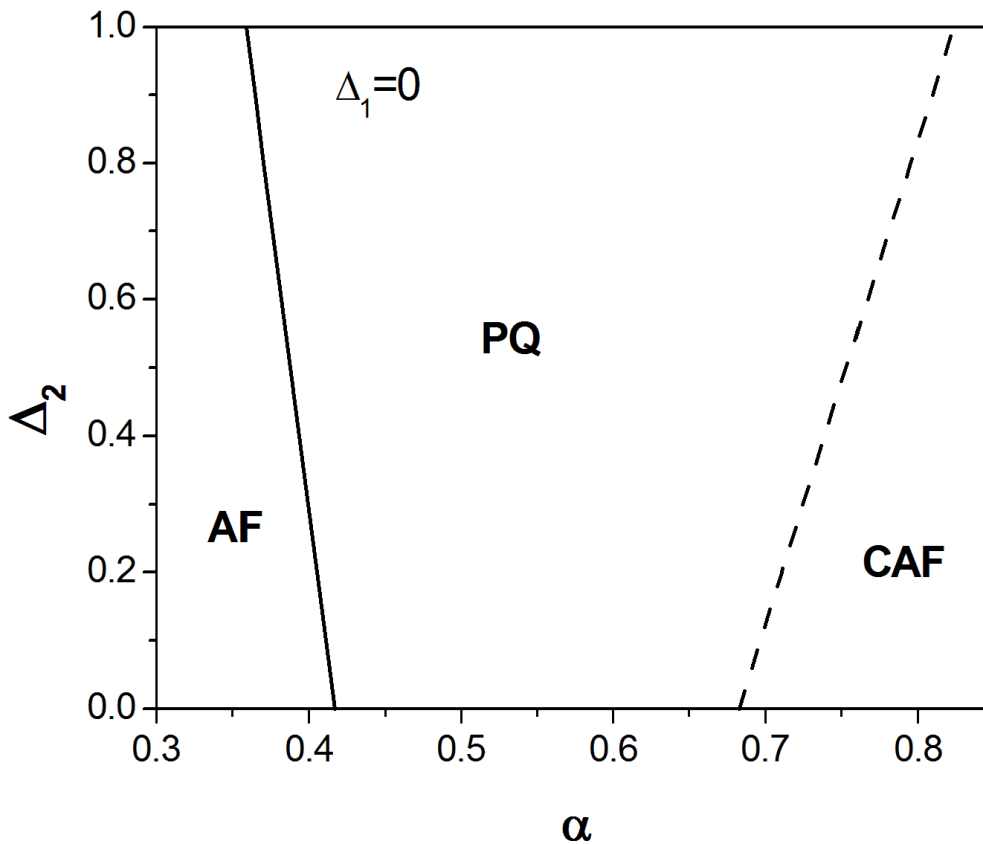


Figura 3.14. Diagrama de fase no plano $\alpha - \Delta$ para $\Delta_1 = 0$ e $\Delta = \Delta_2$.

Ising, obtemos o gráfico da magnetização em função da frustração mostrada na figura 3.22, a qual é muito parecida com o mesmo gráfico obtido fazendo-se $\Delta_1 = \Delta_2$ da figura 3.6. Essa semelhança evidencia que o Hamiltoniano de segundos vizinhos exerce uma função menos importante quando comparado ao de primeiros vizinhos. No diagrama de fase obtido para este caso, figura 3.23, observamos que a fase desordenada começa a surgir para valores menores de frustração, na transição da fase AF para a desordenada, e maiores de frustração, na transição da fase CAF para a desordenada, fazendo com que a área paramagnética seja maior comparada ao da figura 3.7. O ponto crítico terminal está localizado em $(0.547, 0.531)$. Na figura 3.24, comparamos os diagramas de fases para $\Delta_2 = 0$, $\Delta_2 = 1$ e $\Delta_2 = \Delta_1$. Os comportamentos globais do diagrama são os mesmos. Porém, mais uma vez obtivemos um resultado, a priori, não esperado onde a fase desordenada seja maior para $\Delta_2 = 1$ e menor para $\Delta_2 = 0$. No entanto, no que diz respeito aos limites onde as anisotropias são iguais o comportamento é recuperado.

Agora que ficou claro a influência das interações de primeiros e segundos vizinhos

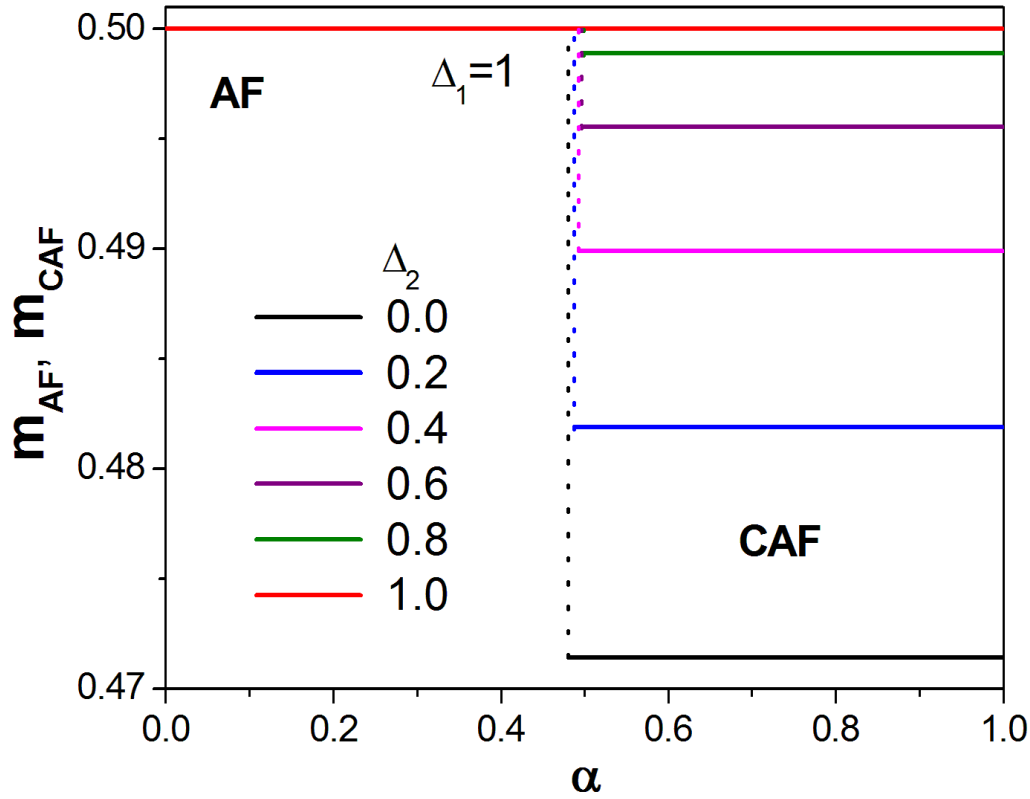


Figura 3.15. Magnetizações alternadas m_{AF} e m_{CAF} para $\Delta_1 = 1$ e $\Delta = \Delta_2$. A fase desordenada não é observada. O comportamento clássico é obtido para $\Delta = 1$, linha vermelha. Transições de primeira ordem acontecem entre $\alpha = 0.48$ e 0.5 .

no surgimento ou não da fase desordenada, usaremos o caso particular $\Delta = \Delta_1 = \Delta_2$. Este caso possui o cenário ideal para o estudo da dimerização das fases ordenadas e fase desordenada, uma vez que as três fases são encontradas. Dentro desta análise, para estudar a natureza da fase desordenada introduzimos o parâmetro dimerização D dado por [58]

$$D = \langle \vec{\sigma}_k \cdot \vec{\sigma}_j \rangle - \langle \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \rangle, \quad (3.5)$$

onde (i, j) e (j, k) são pares de primeiros vizinhos ao longo da mesma direção. Esse parâmetro, como o próprio nome indica, visa avaliar o grau de dimerização em cada fase, ou seja, mede a formação de dímeros. Assim, obtemos o comportamento de D em função da frustração para vários valores de Δ . Em especial, para Δ nulo obtemos o mesmo resultado de [42]. Note que o valor da dimerização na fase desordenada em

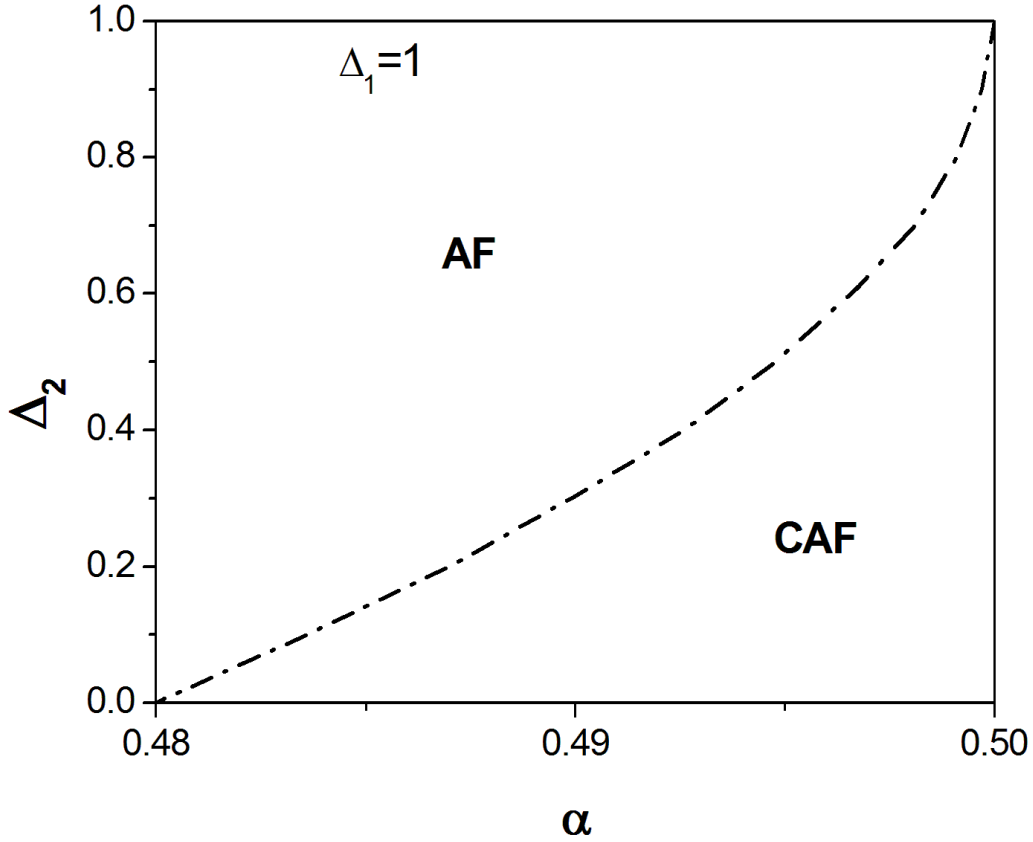


Figura 3.16. Diagrama de fase no plano $\alpha - \Delta$ para $\Delta_1 = 1$ e $\Delta = \Delta_2$. Apenas uma linha de transição de fase de primeira ordem é observada entre as fases AF e CAF. A transição só ocorre para $0.48 < \alpha < 0.5$.

$\Delta = 0$ é $D = 2$. Para entender esse valor, vamos reescrever a equação 3.5 como

$$D = \langle \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i-1} \rangle - \langle \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+1} \rangle \quad (3.6)$$

onde o índice i representa um sítio na plaqueta A, de modo que $i - 1$ é um vizinho que pertence a plaqueta principal A e $i + 1$ um vizinho que pertença a uma das plaquetas da vizinhança B, C ou D, de modo a ainda permanecerem na mesma direção. Assim, se considerarmos a numeração da plaqueta da figura 2.2, teremos $D = \langle \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \rangle - \langle \sigma_2^z \cdot \sigma_8^z \rangle$. Se $\Delta = 0$ cada média pode alcançar seu valor máximo que, em módulo, é 1, pois uma correlação nunca pode ter um valor maior que a unidade. Assim, na fase desordenada devemos ter $\langle \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \rangle = 1$ e $\langle \sigma_2^z \cdot \sigma_8^z \rangle = -1$, resultando em $D = 2$. Um valor de correlação positivo significa que os spins dos sítios em questão estão ligados de modo a formarem um dímero, enquanto uma correlação negativa indica que não existe essa formação.

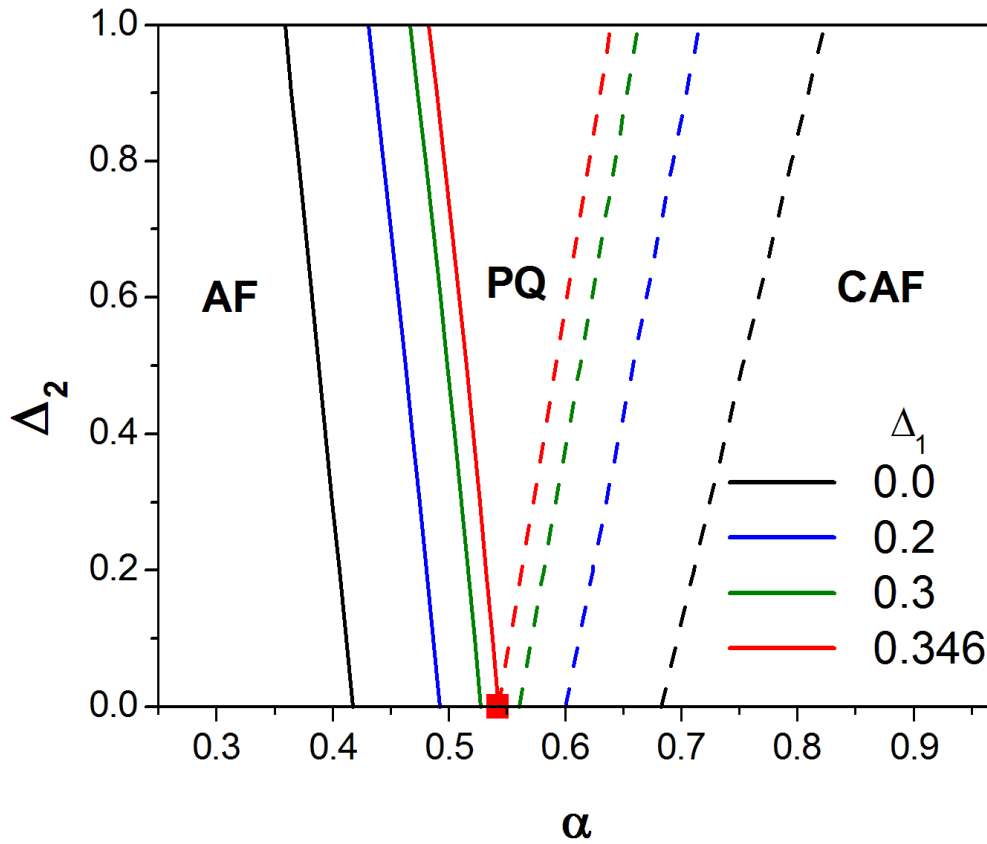


Figura 3.17. Diagrama de fase no plano $\alpha - \Delta_2$, para alguns valores de $\Delta_1 \leq 0.346$. O quadrado representa o ponto crítico terminal e marca o fim da fase desordenada no eixo $\Delta_2 = 0$.

Portanto, podemos interpretar esse resultado como a existência de dímerno entre os sítios 1 e 2 e a não existência dele entre os sítios 2 e 8. Portanto, ressaltamos que o comportamento esperado do parâmetro dimerização, ou seja, menor nas fases ordenadas e maior na fase desordenada, é verificado para os valores de Δ considerados, até o fim da fase desordenada em $\Delta = 0.432$.

Para finalizar, temos na figura 3.26 uma extensão do comportamento das magnetizações AF e CAF do modelo sem frustração do capítulo anterior, porém considerando agora a inclusão da anisotropia de troca. Para $\Delta = 0$ temos o resultado anterior da figura 2.3 e notamos que ao aumentar o seu valor, as curvas de magnetização deslocam-se para cima até atingirem o valor constante clássico $1/2$ para qualquer valor de λ . Portanto, isso deixa claro que o mecanismo responsável pelas transições fases é a frustração.

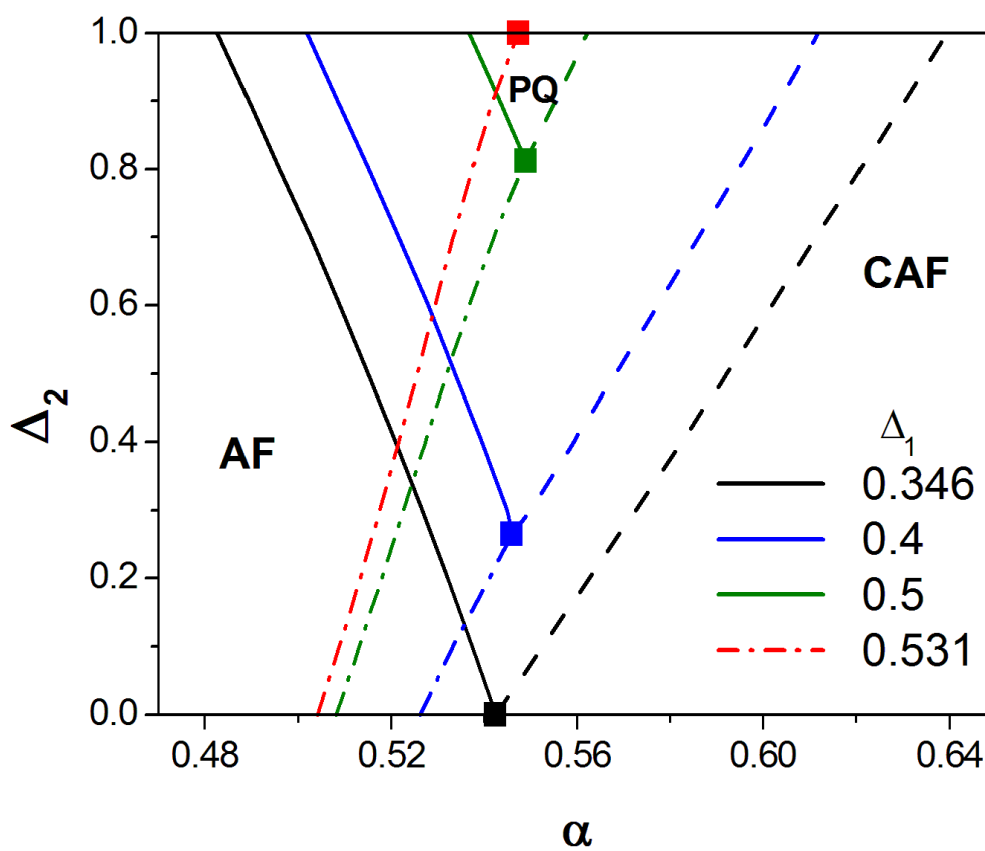


Figura 3.18. O mesmo da figura 3.17 para $0.346 \leq \Delta_1 \leq 0.531$. Com o aumento de Δ_1 dentro desta faixa de valores, observamos a diminuição da região da fase desordenada, com o último ponto crítico terminal dado pelo quadrado em vermelho.

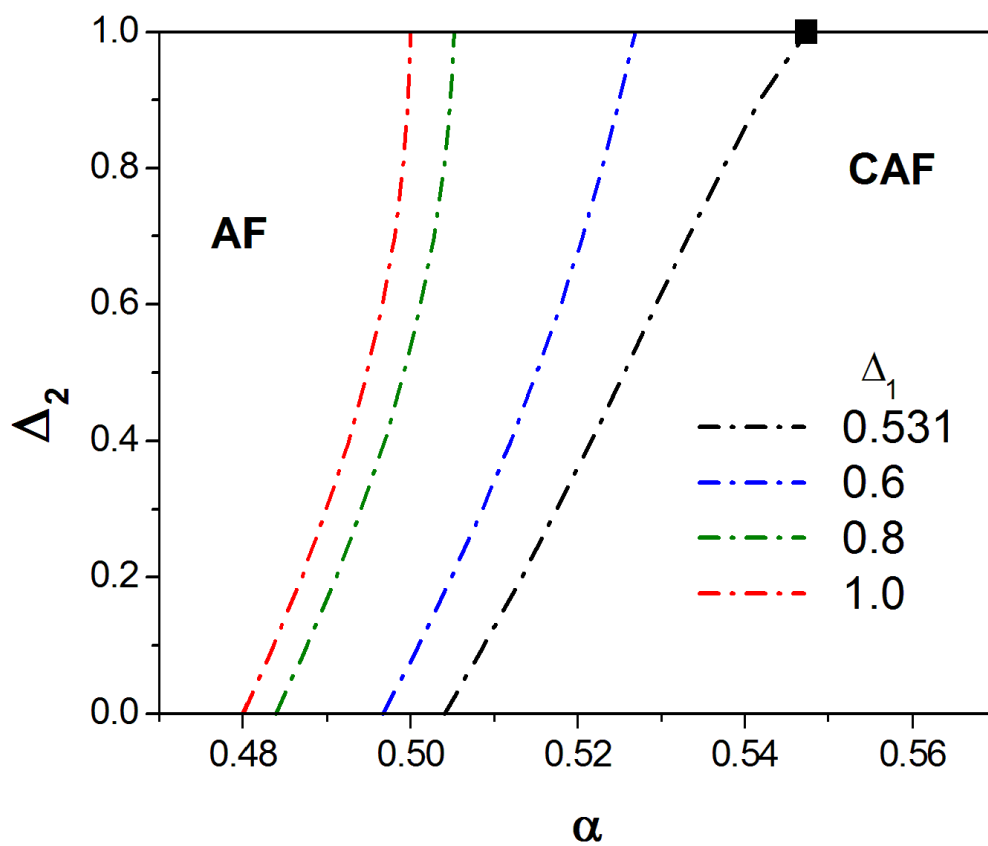


Figura 3.19. O mesmo da figura 3.17 para $0.531 \leq \Delta_1 \leq 1$. Neste intervalo não observamos mais a fase desordenada.

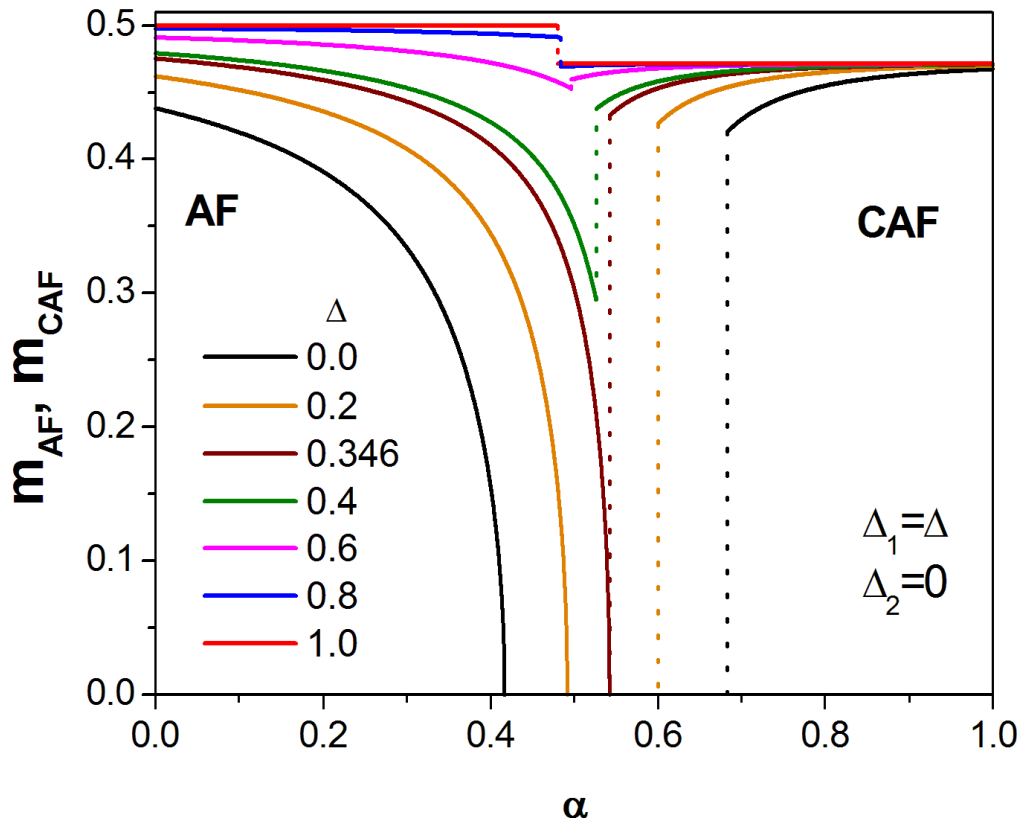


Figura 3.20. Magnetizações alternadas m_{AF} e m_{CAF} em função da frustração para $\Delta_2 = 0$ $\Delta = \Delta_1$. Existe uma fase desordenada entre as fases ordenadas AF e CAF que desaparece $\Delta = 0.346$. As magnetizações m_{CAF} partem de um valor diferente de 0.5 para $\Delta = 1$, pois fixamos $\Delta_2 = 0$.

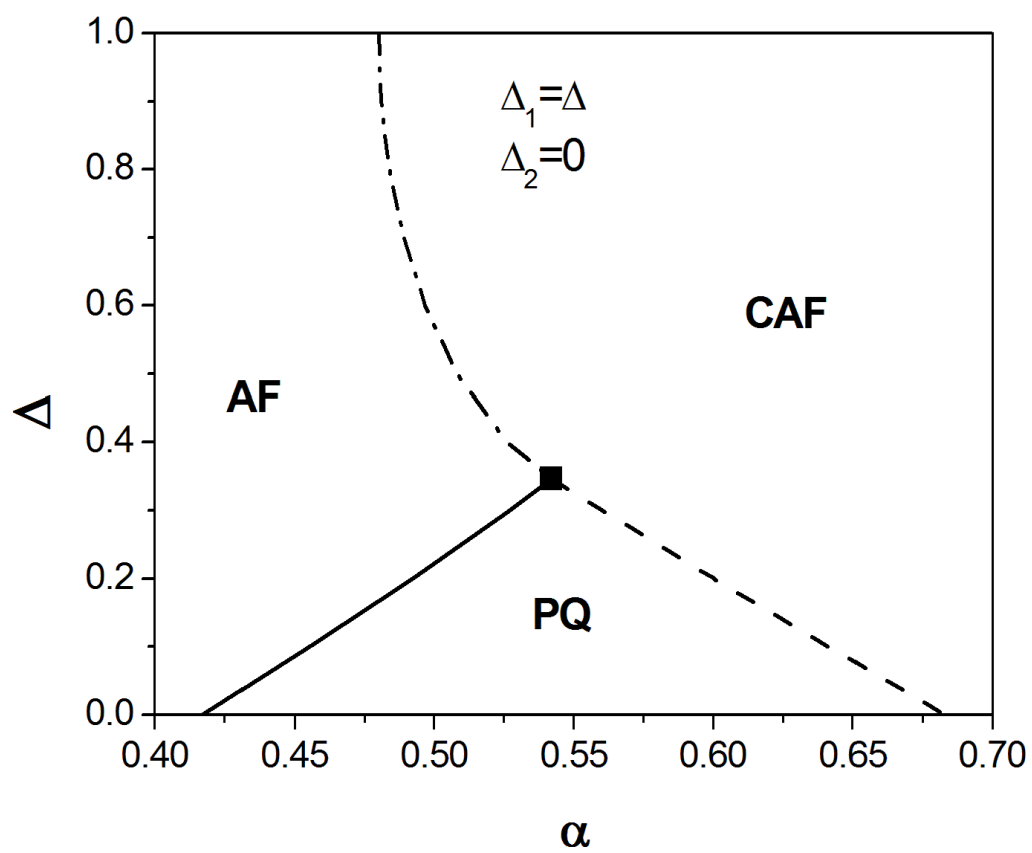


Figura 3.21. O mesmo da figura 3.7 para $\Delta_2 = 0$ e $\Delta = \Delta_1$. O ponto em negro é o ponto crítico terminal e está localizado em $(0.542, 0.356)$.

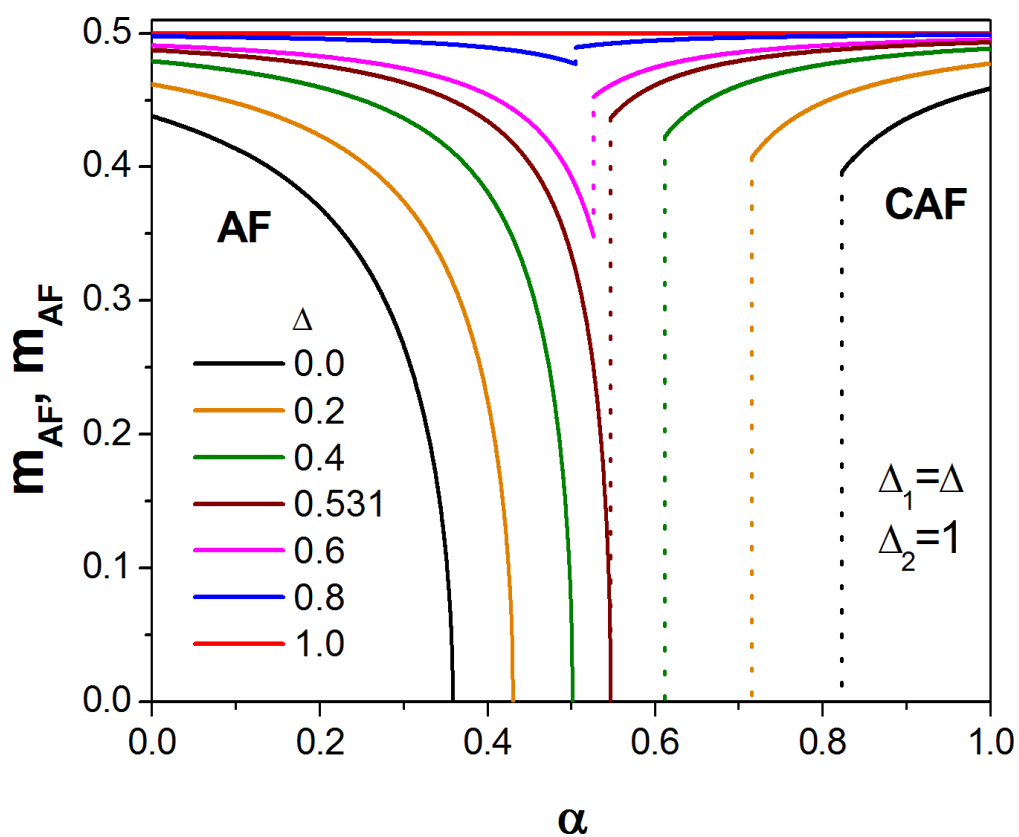


Figura 3.22. O mesmo da figura 3.6 para $\Delta_2 = 1$ e $\Delta = \Delta_1$. O fase desordenada desaparece para $\Delta = 0.531$.

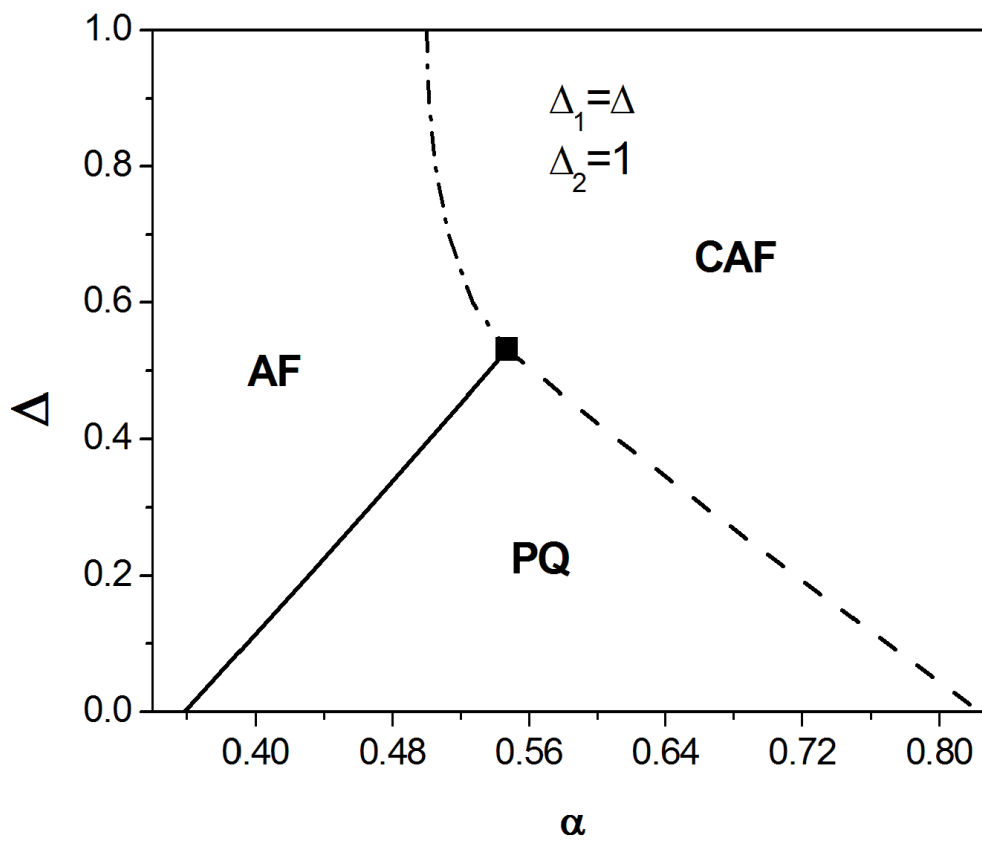


Figura 3.23. O mesmo da figura 3.7 para $\Delta_2 = 1$ e $\Delta = \Delta_1$. O ponto em negrito representa o ponto crítico terminal e está localizado em (0.547, 0.531).

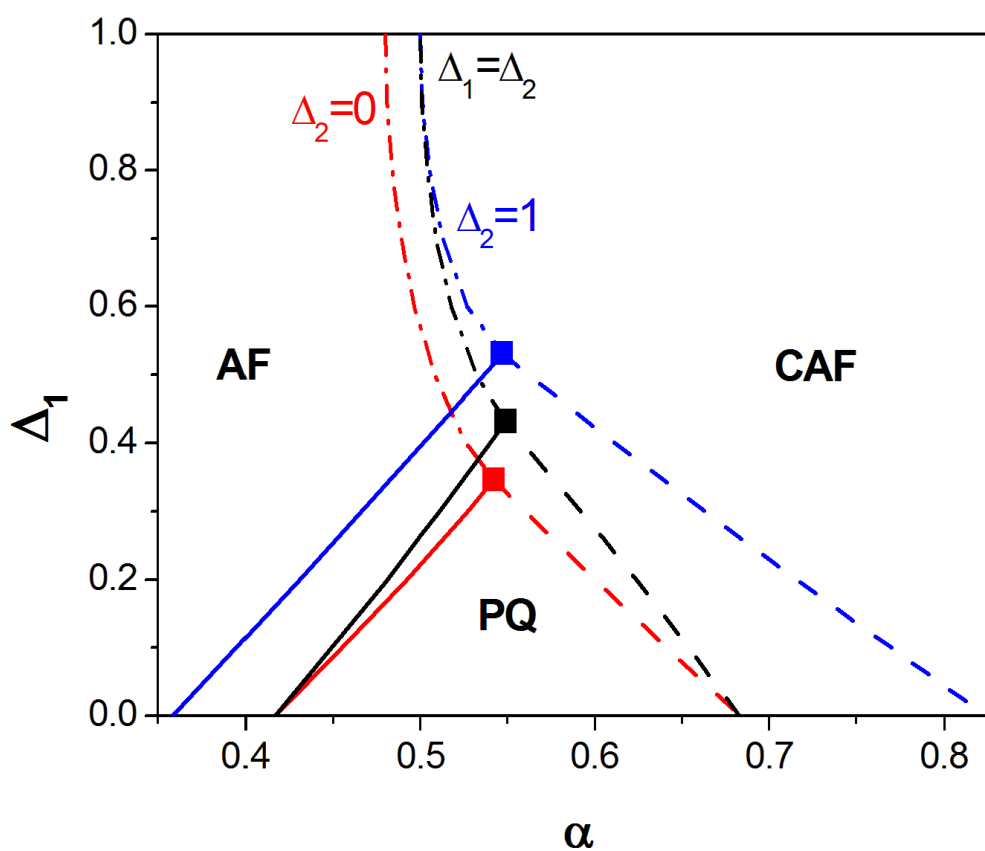


Figura 3.24. Comparação dos diagramas de fase no plano $\alpha - \Delta_1$, obtidos para $\Delta_2 = 0$ e $\Delta_2 = 1$ com o diagrama de fase da figura 3.7.

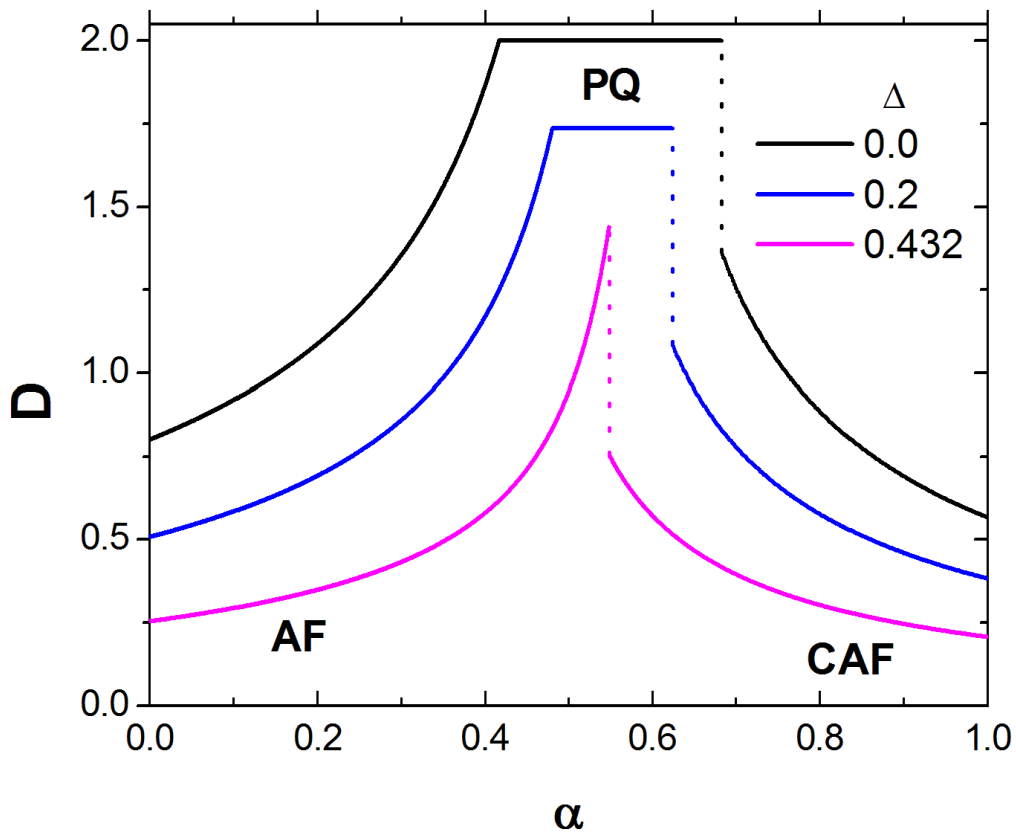


Figura 3.25. Parâmetro de dimerização D em função da frustração para alguns valores de Δ . Para $\Delta = 0.0$, 0.4 temos $D = 2.0$, 1.736 , respectivamente, na fase desordenada. Para $\Delta = 0.432$ a fase desordenada desaparece e temos as fases AF e CAF se encontrando com $D = 1.414$.

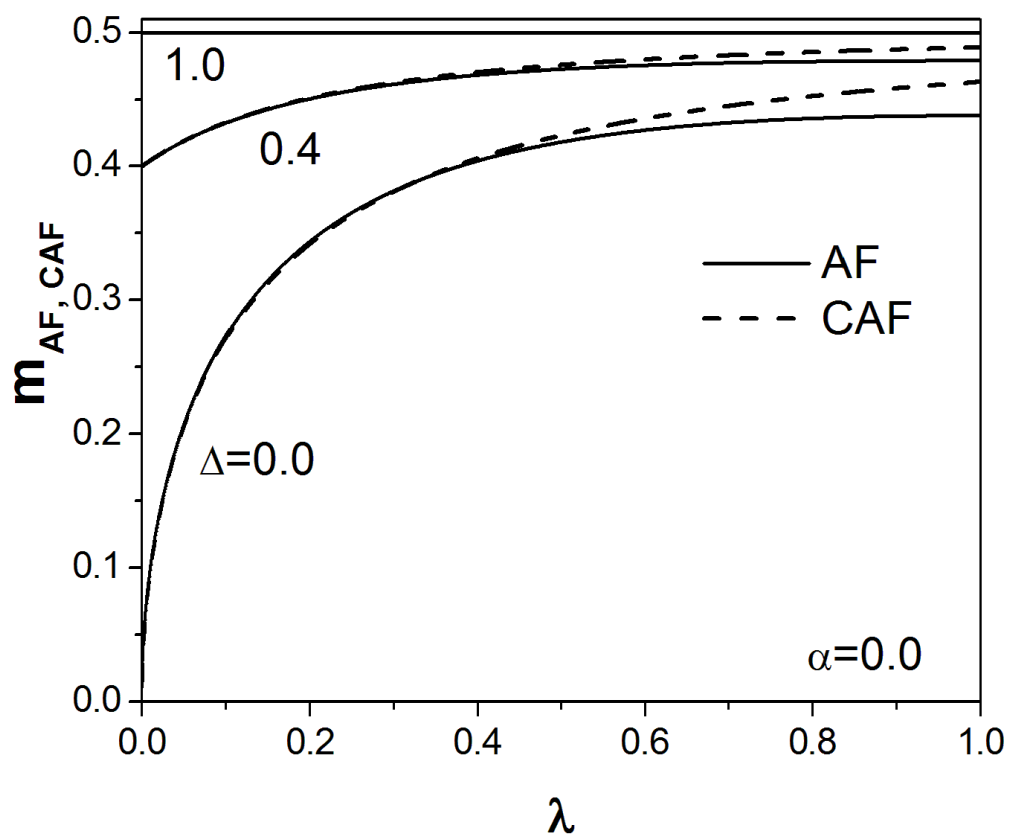


Figura 3.26. Magnetização alternada versus λ do sistema sem frustração. As fases antiferromagnética e colinear antiferromagnética são obtidas fazendo-se λ positivo e negativo, respectivamente.

3.4 Conclusão

Analisamos nesse capítulo o modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético com o método variacional que usa um estado fundamental tentativa, gerando uma energia variacional que é minimizada para cada fase estudada. O método variacional mostrou a existência da fase desordenada no modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ para certos limites de anisotropias Δ_1 e Δ_2 de forma coerente, sendo que apenas o caso $\Delta_1 = 1$ não apresentou fase desordenada. Obtivemos os valores de frustração α_1 e α_2 que delimitam a fase desordenada. Conseguimos determinar as ordens das transições de fases, de modo que as transições da fase colinear antiferromagnética para a fase desordenada são sempre de primeira ordem e as transições da fase antiferromagnética para a fase desordenada são sempre de segunda ordem. Comportamentos não esperados *a priori*, são encontrados quando as anisotropias de troca são tratadas de forma diferente para primeiros e segundos vizinhos, onde a anisotropia de troca que varia passa a ser um parâmetro que favorece a desordem ao invés de ser um simples parâmetro que ajusta o Hamiltoniano entre os limites Heisenberg isotrópico e Ising. Além disso, um breve estudo sobre a natureza da fase desordenada foi realizado através do parâmetro dimerização, corroborando com a idéia de que a fase desordenada possui um grau de formação de dímeros maior que o das fases ordenadas. Portanto, podemos concluir que nossos resultados conseguem descrever o modelo proposto através da presente técnica variacional com significativa concordância no cenário mais aceito do sistema estudado na literatura.

Capítulo 4

Estudo do estado fundamental do modelo de Heisenberg $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético spin-1

Neste capítulo, vamos estender o trabalho do capítulo 3 no estudo do estado fundamental do modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ com spin $S = 1$, porém sem considerar as anisotropias de troca. Este estudo representa um desafio, tanto do ponto de vista analítico, quanto computacional, para o método variacional de de Oliveira [42], uma vez que este nunca foi considerado para spin inteiro. Assim, analisamos as energias, magnetizações de subrede e o diagrama de fases explorando a interação $J'_1 \rightarrow 0$, ou seja, indo para o limite unidimensional do modelo.

4.1 Modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ com spin-1

Assim como no caso spin-1/2, o modelo $J_1 - J_2$ para spin-1 em uma rede quadrada possui, como estado fundamental para pequenos valores de J_2/J_1 , a fase de Néel, e para valores maiores, a fase mais estável torna-se a fase colinear antiferromagnética. Sabemos que no caso de spin-1/2 existe a fase desordenada, ou quântica paramagnética, separando as fases ordenadas, como de fato foi confirmada pelo método variacional no capítulo anterior para o caso isotrópico do Hamiltoniano. Entretanto, uma mudança no valor do spin pode desempenhar um papel de destaque, e não trivial, no comportamento global de um modelo frustrado, que é justamente a motivação principal deste capítulo. Sabe-se que a intensidade das flutuações quânticas podem ser ajustadas colocando-se anisotropias no Hamiltoniano, seja no espaço real ou no espaço dos spins (como feito no capítulo 3, com as anisotropias espaciais J_1 e J'_1 , e as anisotropias de troca Δ_1 e Δ_2

para spin-1/2), modificando-se a dimensão espacial da rede cristalina, ou simplesmente variando-se o valor do número quântico de spin S [59, 60]. É essa última influência que iremos analisar nesse capítulo.

Os magnetos bidimensionais frustrados com spin-1 têm chamado muita atenção, não apenas pelo apelo de compará-lo com o caso spin-1/2, mas pelo próprio mérito intrínseco, uma vez que materiais reais com essas características podem ser realizados experimentalmente. Por exemplo, destacamos a descoberta do supercondutor LaOFeAs, com temperatura de transição dada por $T_c \approx 26K$ nas camadas de ferro do composto, quando dopado pela troca parcial de átomos de oxigênio por átomos de flúor na razão $\text{LaO}_{1-x}\text{F}_x\text{FeAs}$, com $x \approx 0.05 - 0.11$ [61] [62]. Posteriormente descobriu-se supercondutores com temperaturas de transição mais altas, da ordem de $T_c \geq 50K$, com uma classe de materiais dopados similares ao $\text{LaO}_{1-x}\text{F}_x\text{FeAs}$. Em especial, o composto LaOFeAs é muito bem descrito pelo modelo $J_1 - J_2$ com spin-1 em uma rede quadrada com $J_1, J_2 > 0$, e portanto servindo como base e motivação experimental para cálculos teóricos [63, 64].

Assim, como no caso do spin-1/2, a existência de uma fase intermediária, sem ordem magnética, entre as fases ordenadas, também é tema de debate. Por exemplo, a teoria de ondas de spin linear (*LSWT-Linear Spin Wave Theory*) encontra uma fase desordenada estreita, porém não nula, na faixa $0.47 \leq J_2/J_1 \leq 0.50$ [48]. Outro método que aponta para a existência da fase paramagnética é o Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (*DMRG-Density Matrix Renormalization Group*), cuja fase desordenada encontra-se no intervalo $0.525 \leq J_2/J_1 \leq 0.555$. [65] Em ambos os métodos a região desordenada é bem pequena em comparação com o caso spin-1/2, dada por $0.41 \leq J_2/J_1 \leq 0.62$. Por outro lado, utilizando-se o método Aglomerado Acoplado (*CMM-Coupled Cluster Method*) nenhuma fase desordenada é observada [66]. Mas, de modo geral, espera-se que o intervalo da fase desordenada, pelo menos no limite isotrópico $J'_1 = J_1$, possa ser da forma $\Delta\alpha = \alpha_{2c} - \alpha_{1c} \propto 1/S$, onde $\alpha = J_2/J_1$. Desse modo, no limite clássico ($S \rightarrow \infty$) teremos $\Delta\alpha = \alpha_{2c} - \alpha_{1c} = 0$, com $\alpha_{2c} = \alpha_{1c} = 1/2$, como esperado. Então, as flutuações quânticas tendem a diminuir com o aumento do valor de spin S . Entretanto, existem ainda certas divergências com relação ao exposto acima. Um exemplo bem conhecido é a conjectura de Haldane [67], que diferencia o comportamento de uma cadeia unidimensional de spins semi-inteiros e inteiros, com o gap de energia de excitação nulo (*gapless*) e não nulo (*gapped*), respectivamente.

Assim, com o método variacional, vamos investigar a existência da fase paramagnética e explorar o comportamento no sentido do limite unidimensional fazendo $J'_1 \rightarrow 0$ para o modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ com spin-1 em uma rede quadrada, cujo Hamiltoniano é

dado pela Eq.(4.1) para $\Delta_1 = \Delta_2 = 0$, a saber

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & J_1 \sum_{\langle i,j \rangle_x} [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z] + \\ & J'_1 \sum_{\langle i,j \rangle_y} [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z] + \\ & J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z]. \end{aligned} \quad (4.1)$$

4.2 Método Variacional para spin-1

O tratamento é semelhante ao realizado no capítulo 3, pois o modelo possui todas as interações de troca antiferromagnéticas dispostas em uma rede quadrada e, portanto, apresenta o mesmo tipo de frustração da Figura 3.1. Assim, nossos cálculos baseiam-se no esquema da plaqueta 2.2. A energia do estado fundamental será dada pela Eq.(3.2), porém, para spin $S = 1$, o número de possibilidades para o estado fundamental tem um aumento considerável em comparação com o caso spin $S = 1/2$, uma vez que o momento magnético pode assumir agora três valores $(-1, 0, 1)$ ao invés de apenas dois $(-1/2, 1/2)$, resultando num aumento de $n = 6$ para $n = 19$ estados possíveis, resultando em

$$|\phi_{0l}\rangle = \sum_{n=1}^{19} a_n |n\rangle_l, \quad (4.2)$$

de modo que os dezenove possíveis estados possuem magnetização total nula e são dados por

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \begin{vmatrix} + & - \\ - & + \end{vmatrix} & |2\rangle &= \begin{vmatrix} - & + \\ + & - \end{vmatrix} & |3\rangle &= \begin{vmatrix} + & + \\ - & - \end{vmatrix} & (4.3) \\ |4\rangle &= \begin{vmatrix} - & - \\ + & + \end{vmatrix} & |5\rangle &= \begin{vmatrix} - & + \\ - & + \end{vmatrix} & |6\rangle &= \begin{vmatrix} + & - \\ + & - \end{vmatrix} \\ |7\rangle &= \begin{vmatrix} + & - \\ 0 & 0 \end{vmatrix} & |8\rangle &= \begin{vmatrix} - & + \\ 0 & 0 \end{vmatrix} & |9\rangle &= \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ + & - \end{vmatrix} \\ |10\rangle &= \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ - & + \end{vmatrix} & |11\rangle &= \begin{vmatrix} + & 0 \\ - & 0 \end{vmatrix} & |12\rangle &= \begin{vmatrix} - & 0 \\ + & 0 \end{vmatrix} \\ |13\rangle &= \begin{vmatrix} 0 & + \\ 0 & - \end{vmatrix} & |14\rangle &= \begin{vmatrix} 0 & - \\ 0 & + \end{vmatrix} & |15\rangle &= \begin{vmatrix} + & 0 \\ 0 & - \end{vmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 |16\rangle &= \begin{vmatrix} - & 0 \\ 0 & + \end{vmatrix} & |17\rangle &= \begin{vmatrix} 0 & + \\ - & 0 \end{vmatrix} & |18\rangle &= \begin{vmatrix} 0 & - \\ + & 0 \end{vmatrix} \\
 |19\rangle &= \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}.
 \end{aligned}$$

Novamente, os coeficiente a_n são os parâmetros variacionais e devem obedecer a condição de normalização $\sum_{n=1}^{19} a_n^2 = 1$. Fazendo uma transformação canônica [42], temos

$$\begin{aligned}
 x &= (a_1 + a_2) / \sqrt{2} \quad , \quad u = (a_1 - a_2) / \sqrt{2}, & (4.4) \\
 y &= (a_3 + a_4) / \sqrt{2} \quad , \quad v = (a_3 - a_4) / \sqrt{2}, \\
 z &= (a_5 + a_6) / \sqrt{2} \quad , \quad w = (a_5 - a_6) / \sqrt{2}, \\
 x_1 &= (a_7 + a_8) / \sqrt{2} \quad , \quad u_1 = (a_7 - a_8) / \sqrt{2}, \\
 x_2 &= (a_9 + a_{10}) / \sqrt{2} \quad , \quad u_2 = (a_9 - a_{10}) / \sqrt{2}, \\
 y_1 &= (a_{11} + a_{12}) / \sqrt{2} \quad , \quad v_1 = (a_{11} - a_{12}) / \sqrt{2}, \\
 y_2 &= (a_{13} + a_{14}) / \sqrt{2} \quad , \quad v_2 = (a_{13} - a_{14}) / \sqrt{2}, \\
 z_1 &= (a_{15} + a_{16}) / \sqrt{2} \quad , \quad w_1 = (a_{15} - a_{16}) / \sqrt{2}, \\
 z_2 &= (a_{17} + a_{18}) / \sqrt{2} \quad , \quad w_2 = (a_{17} - a_{18}) / \sqrt{2}, \\
 x_0 &= a_{19},
 \end{aligned}$$

que preserva a condição de normalização, que neste caso é dada por

$$\begin{aligned}
 x^2 + y^2 + z^2 + x_1^2 + x_2^2 + y_1^2 + y_2^2 + z_1^2 + z_2^2 + \\
 u^2 + v^2 + w^2 + u_1^2 + u_2^2 + v_1^2 + v_2^2 + w_1^2 + w_2^2 = 1.
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

Conforme o estado tentativa definido pela equação (4.2) e pelos estados (4.3), obtemos as magnetizações

$$\begin{aligned}
 m_1 &= 2(xu + yv - zw + x_1u_1 + y_1v_1 + z_1w_1) & (4.6) \\
 m_2 &= 2(-xu + yv + zw - x_1u_1 + y_2v_2 + z_2w_2) \\
 m_3 &= 2(xu - yv + zw - x_2u_2 - y_2v_2 - z_1w_1) \\
 m_4 &= 2(-xu - yv - zw + x_2u_2 - y_1v_1 - z_2w_2).
 \end{aligned}$$

Conseqüentemente, considerando os operadores de spin para $S = 1$

$$\left\{ \begin{array}{l} S^x |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |-1\rangle) \\ S^x |\pm 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\pm 1\rangle \end{array} \right\}, \quad \left\{ \begin{array}{l} S^y |0\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |-1\rangle) \\ S^y |\pm 1\rangle = \frac{\mp i}{\sqrt{2}}|\pm 1\rangle \end{array} \right\}, \quad \left\{ \begin{array}{l} S^z |0\rangle = 0 \\ S^z |\pm 1\rangle = \pm |\pm 1\rangle \end{array} \right\}, \quad (4.7)$$

encontramos a energia do estado fundamental, que é dada por

$$\begin{aligned} E_{01} = & [\sqrt{2}x_0(x_1 + x_2) + (x + z)(x_1 + x_2) + (u + w)(u_1 - u_2) + \\ & (y_1 + y_2)(z_1 + z_2) + (v_1 + v_2)(w_1 + w_2) - (x^2 + u^2 - y^2 - v^2 + z^2 + w^2)]/2 \\ & - (x_1^2 + u_1^2 + x_2^2 + u_2^2)/4 + (m_1m_2 + m_3m_4)/4 + \lambda\{[\sqrt{2}x_0(y_1 + y_2) + \\ & (x + y)(y_1 + y_2) + (u + v)(v_1 - v_2) + (x_1 + x_2)(z_1 + z_2) + (u_1 + u_2)(w_1 - w_2) - \\ & (x^2 + u^2 + y^2 + v^2 - z^2 - w^2)]/2 - (y_1^2 + v_1^2 + y_2^2 + v_2^2)/4 + (m_1m_4 + m_2m_3)/4\} + \\ & \alpha\{[\sqrt{2}x_0(z_1 + z_2) + (y + z)(z_1 + z_2) + v(w_1 + w_2) + w(w_2 - w_1) + \\ & (x_1 + x_2)(y_1 + y_2) + (u_1 - u_2)(v_1 - v_2) - (-x^2 - u^2 + y^2 + v^2 + z^2 + w^2)]/2 - \\ & (z_1^2 + w_1^2 + z_2^2 + w_2^2)/4 + 3(m_1m_3 + m_2m_4)/4\}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Assim, usando o método dos multiplicadores de Lagrange e minimizando um funcional semelhante a equação Eq. (2.7), porém com o conjunto de parâmetros variacionais e condição de normalização adotados para o caso $S = 1$, equações (4.4) e (4.5), respectivamente, obtemos um conjunto de 19 equações não lineares [veja Apêndice A, Eq. (A.1)], que uma vez associadas ao mínimo da energia do sistema são as soluções estáveis para cada fase estudada individualmente.

4.3 Resultados

Seguindo as condições a partir das magnetizações (4.6) para cada fase, somos capazes de especificar a região de estabilidade. Assim, para a fase AF ($m_1 = -m_2 = m_3 = -m_4$), temos que $v = w = 0 = w_2 = w_1 = 0$, $x_2 = x_1$, $y_2 = y_1$, $z_2 = z_1$, $u_2 = -u_1$ e $v_2 = -v_1$. Na fase CAF ($m_1 = -m_2 = -m_3 = m_4$), $u = v = 0 = v_2 = v_1 = 0$, $x_2 = x_1$, $y_2 = y_1$, $z_2 = z_1$, $u_2 = u_1$ e $w_2 = -w_1$. Por fim, para a fase paramagnética quântica PQ, devemos ter $u = v = w = 0 = u_1 = u_2 = v_1 = v_2 = w_2 = w_1 = 0$.

Obtemos o gráfico da energia do estado fundamental, por unidade de spin, em função do parâmetro de frustração α na Fig. 4.1 para alguns valores de λ . As linhas

sólidas representam as energias do estado AF e as tracejadas da fase CAF. A energia da fase paramagnética é maior em comparação com as energias das fases ordenadas para todos os valores de λ e, portanto, não aparece no gráfico. Os círculos denotam onde acontece uma transição de primeira ordem diretamente entre as fases AF e CAF. Assim, com o método variacional para o modelo frustrado com $S = 1$ não observamos a presença da fase intermediária acontecendo entre as fases ordenadas para nenhum valor de λ . Conforme diminuirmos λ , é possível perceber um aumento na região de estabilidade da fase colinear antiferromagnética, até que no limite de $\lambda = 0$ (linha em vermelho), temos a fase CAF como mais estável em todo o intervalo de α .

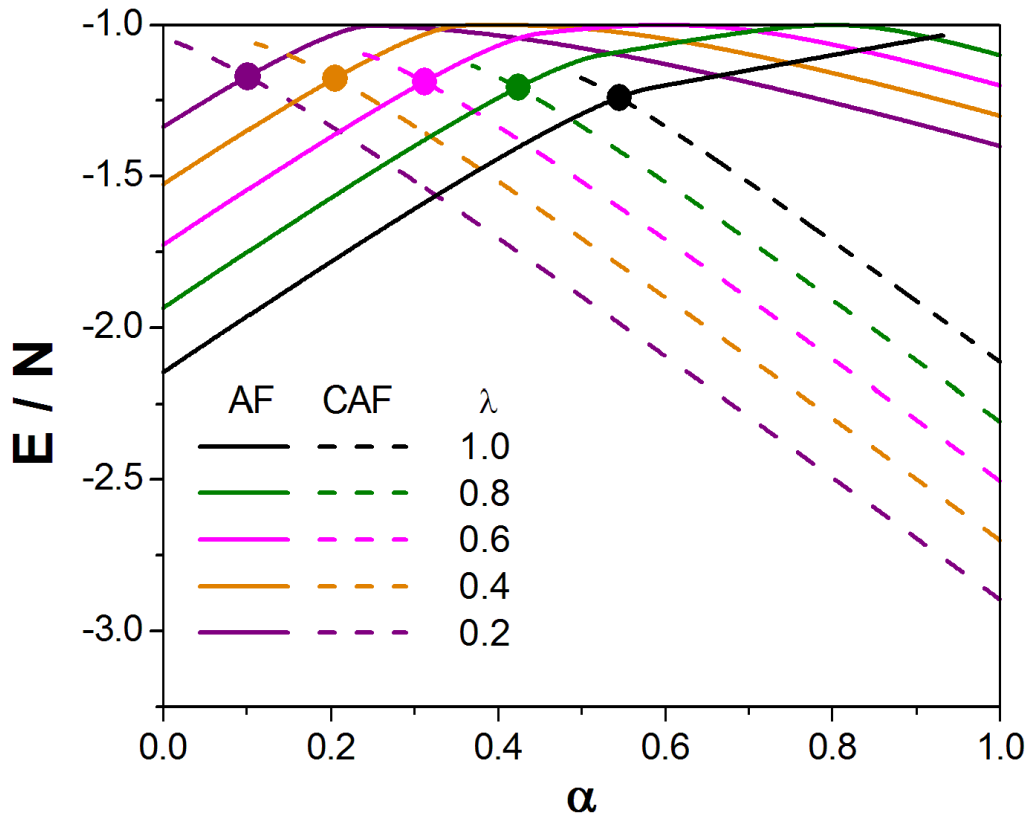


Figura 4.1. Energia por unidade de spin e J_1 em função da frustração, para alguns valores de λ . As linhas sólidas correspondem as energias da fase AF e as tracejadas pertencem a fase CAF. Os círculos marcam o encontro das energias caracterizando uma transição de fase de primeira ordem e se deslocam para esquerda conforme λ diminui com a fase colinear se tornando estável para regiões cada vez maiores de α .

Na Fig. 4.2, podemos observar as curvas das magnetizações das fases AF e CAF cujos valores são sempre menores que o valor de saturação $m = 1$ devido as flutuações

quânticas. Ambas as magnetizações antiferromagnética e colinear antiferromagnética diminuem suavemente até a transição de fase de primeira ordem, representadas pelas linhas tracejadas. Note que o salto na magnetização se torna cada vez menor com a diminuição em λ .

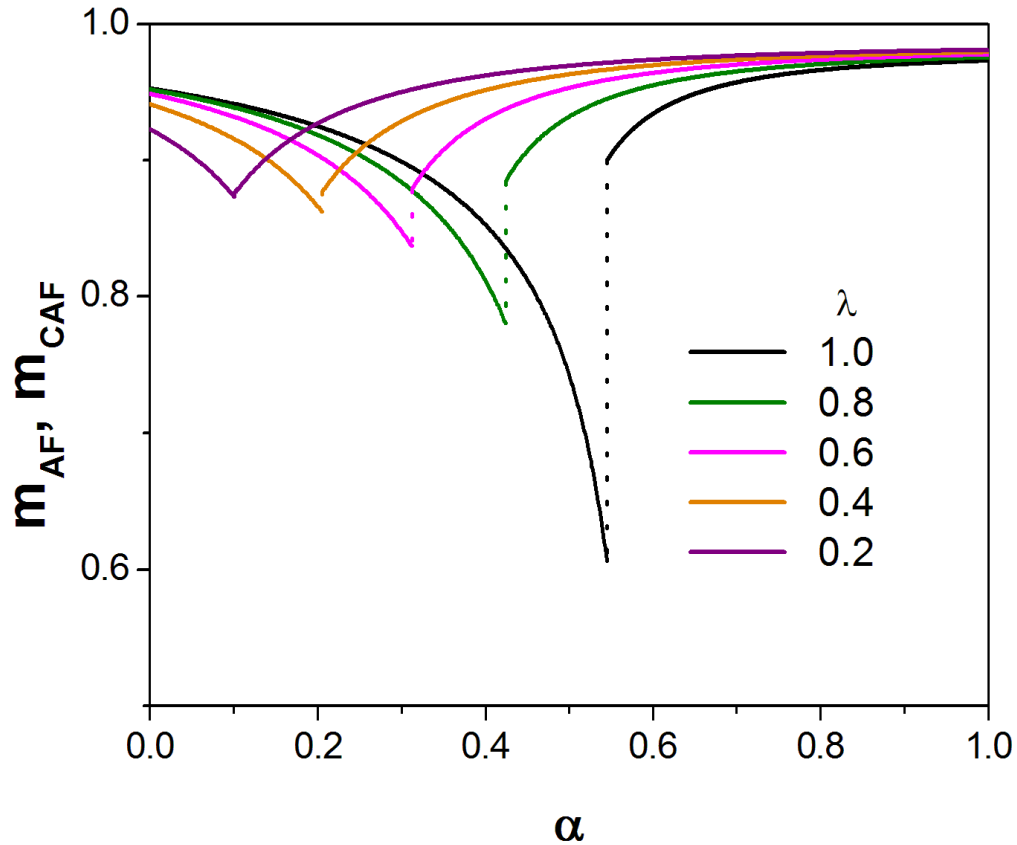


Figura 4.2. Magnetização das fases ordenadas AF e CAF em função da frustração para alguns valores de λ . Ambas as magnetizações diminuem suavemente, m_{AF} da esquerda para direita e m_{CAF} da direita para esquerda até o ponto de transição de fase de primeira ordem, representado pelas linhas tracejadas para cada valor de λ .

Com base no comportamento das energias em função da frustração, obtemos o diagrama de fase para $S = 1$, dado pela Fig. 4.3. O diagrama de fases evidencia a não existência da fase desordenada, e apenas uma linha de transição de primeira ordem entre as fases ordenadas é observada. O ponto na origem, apesar de ser uma solução matemática do nosso trabalho, não é física, pois possui uma magnetização diferente de zero, violando o teorema de Mermin-Wagner [13], e encontra-se no gráfico apenas para completar o diagrama de fase na região de λ pequeno. Esse ponto evidencia a ne-

cessidade de uma abordagem diferenciada para o spin-1 unidimensional que deve levar em consideração a conjectura de Haldane no desenvolvimento do método variacional.

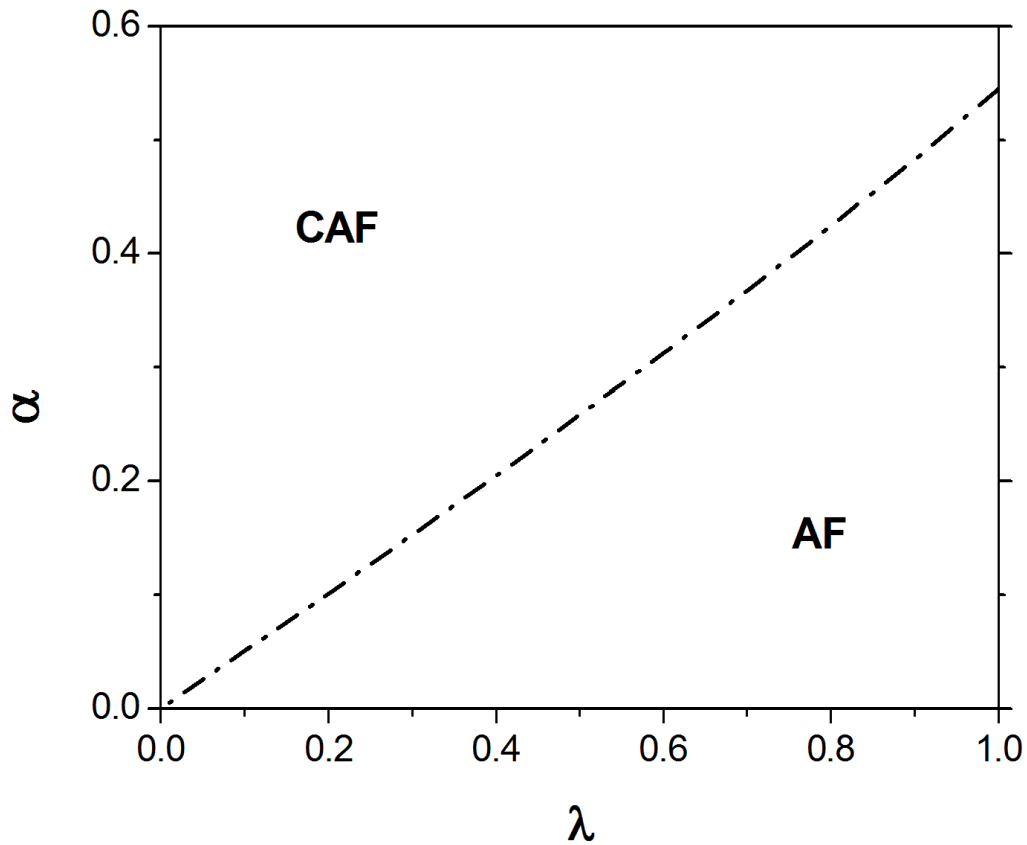


Figura 4.3. Diagrama de fase no plano $\lambda - \alpha$. Apenas uma linha de transição de fase primeira ordem acontece entre as fases AF e CAF e nenhuma fase intermediária é observada. O ponto na origem corresponde a uma extrapolação dos resultados.

4.4 Conclusão

Estudamos o modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ com spin inteiro $S = 1$ na região de interações de troca J'_1 e J_2 intensas via método variacional [42] com o objetivo de verificar a existência da fase desordenada para este caso. Assim, através da análise das energias e magnetizações de subrede, obtivemos o diagrama de fase, Fig. 4.3, com o qual não observamos a fase desordenada e apenas uma transição de fase de primeira ordem entre as fases ordenadas é encontrada. Esse resultado discorda dos trabalhos como teoria de ondas de spin linear e Grupo de Renormalização Matriz Densidade [65], que encontram uma região desordenada, estreita porém não nula, em torno de $\alpha = 0.5$ para o caso simétrico ($\lambda = 1$). Entretanto, o método que concorda com a não existência da fase desordenada é o método de aglomerado acoplado [66], que também encontra transição de fase apenas entre as fases ordenadas em uma região de $\lambda \gg 0$. No entanto, o método variacional e CCM não concordam inteiramente quanto a ordem dessa transição. Enquanto o método variacional nos diz que transição de fase é completamente de primeira ordem, o método CCM a linha de transição é dividida por um ponto quântico tricrítico localizado em $J'_1 \approx 0.66 \pm 0.03$ e $J_2 \approx 0.35 \pm 0.02$, onde abaixo deste ponto a transição é de segunda ordem e acima dele de primeira ordem, e claramente esse ponto não foi observado pelo método variacional. Porém, neste mesmo trabalho Bishop *et al.* concluem que a transição de segunda ordem abaixo do ponto quântico tricrítico deve ser uma fraca transição de primeira ordem, e por fim passando a concordar com o método variacional quanto a ordem da transição entre as fases ordenadas. Comparando nossos resultados com o método variacional para spin-1/2 (capítulo 3) e spin-1, a diferença que se destaca é a presença da fase desordenada apenas para o caso com spin semi-inteiro, por outro lado em ambos os casos a transição de fase que acontece entre as fases ordenadas é completamente de primeira ordem. Isso pode sugerir que esse comportamento da transição entre as fases ordenadas se estenda para o caso com spin-1, uma vez que associar a ausência da fase desordenada com a diminuição das flutuações quânticas induzidas pelo aumento da anisotropia de troca e o aumento no valor do spin, para o modelo com $S = 1/2$ e $S = 1$, respectivamente. Partindo desse ponto de vista, podemos argumentar que uma transição de fase de primeira ordem é o resultado mais plausível para o modelo com spin inteiro $S = 1$.

Finalmente, podemos afirmar que o método variacional foi capaz de tratar o modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ com spin-1, superando assim o desafio de ser aplicável para sistemas tanto de spin semi-inteiro quanto inteiro. Além disso, apesar da simplicidade, mostrou-se robusto o suficiente para obter resultados fisicamente plausíveis como a ausência da fase desordenada e a transição de fase de primeira ordem entre as fases ordenadas.

Capítulo 5

Teoria de Ondas de Spin no modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ anisotrópico

Neste capítulo, usaremos o método de Ondas de Spin Linear para estudarmos o modelo de Heisenberg anisotrópico. Até onde sabemos, apenas um trabalho explorou as anisotropias de troca diferentes para o Hamiltoniano de primeiros e segundos vizinhos com esta técnica, não exatamente como consideramos no Hamiltoniano 4.1. Porém, identificamos considerações equivocadas neste trabalho, o que nos motivou a realizar o tratamento correto da teoria de ondas de spin para o dado modelo. Uma pertinente comparação entre os resultados obtidos via o método variacional, capítulo 3, e teoria de ondas de spin é realizada, focando na fase magneticamente desordenada.

5.1 Conceitos básicos sobre Teoria de Ondas de Spin

A teoria de ondas de spin é um método largamente conhecido que pode ser usado no estudo de sistemas magnéticos em baixas temperaturas. Desenvolvida originalmente por F. Block [68], a teoria parte de duas hipóteses básicas: o estado fundamental do sistema é ordenado e os estados excitados, ou excitações elementares, podem ser descritos como uma coleção de ondas de spin. Por exemplo, podemos imaginar uma cadeia ferromagnética com os spins alinhados na direção de um dado campo magnético aplicado. Então, um dado aumento de temperatura no sistema produz um desvio em um dos spins e, devido às interações entre esse spin e os seus vizinhos, esse desvio se propaga por toda a cadeia com simetria contínua, como visto na Fig. 5.1(a). Conseqüentemente, o sistema sairá do estado fundamental para um estado excitado, cuja

excitação coletiva é a onda de spin Fig. 5.1(b) [69]. Assim, quanto maior o aumento na temperatura maior podem ser o número de spins afetados, podendo gerar comportamentos mais complexos dentro da rede (como o espalhamento no caso de choque de dois spins que sofreram desvios diferentes, e portanto possuem velocidades de propagação distintas). Em consequência disso, a teoria de ondas de spin corresponde a uma aproximação válida apenas para baixas temperaturas, muito abaixo da temperatura de Curie. Por isso, em baixas temperaturas é possível negligenciar a interação entre as ondas de spin, uma vez que sob essas condições esperamos que a amplitude das ondas sejam pequenas, fazendo com que as ondas de spin sejam independentes entre si.

Essas excitações elementares são quantizadas, e o seu quantum é chamado de magnon, onde o vetor de onda \vec{k} determina a fase de um spin com relação ao outro. A excitação coletiva magnon¹² pode ser interpretada com uma partícula que se move ao longo da cadeia. Os dois mecanismos básicos de interação entre os spins são o acoplamento magnético dipolo-dipolo e a interação de troca. As interações dipolares tornam-se mais importantes quando o comprimento das ondas de spin é muito maior que a distância entre os spins dispostos em uma dada rede, por outro lado a interação de troca domina o cenário quando o comprimento das ondas de spin é da ordem do espaçamento entre os spins [70]. É claro, consideraremos o último caso neste trabalho, pois o Hamiltoniano de Heisenberg é baseado na interação de troca entre os spins.

As excitações coletivas, ondas de spin, podem ser observadas experimentalmente através de técnicas de espalhamento. Em especial, através do método de espalhamento de neutrons a energia perdida pelo feixe de neutrons, a qual é responsável pela excitação do magnon, pode ser medida em função do vetor espalhamento, da temperatura e do campo magnético externo.

Para uma descrição mais completa de ondas de spin em um sólido em duas ou três dimensões, é interessante fazer um mapeamento baseado no modelo do oscilador harmônico, pois, como veremos, alguns conceitos introduzidos neste modelo desempenham um importante papel na descrição dos magnons [70].

5.2 Transformação de Holstein-Primakoff

A ideia da transformação de Holstein-Primakoff é trocar os operadores de spin pelos operadores criação e aniquilação.

¹²Ao magnon é associado uma quasepartícula com uma massa efetiva. Essa quasepartícula carrega uma quantidade específica de energia com spin 1, ou seja, um bóson e, portanto, deve obedecer a estatística de Bose-Einstein.

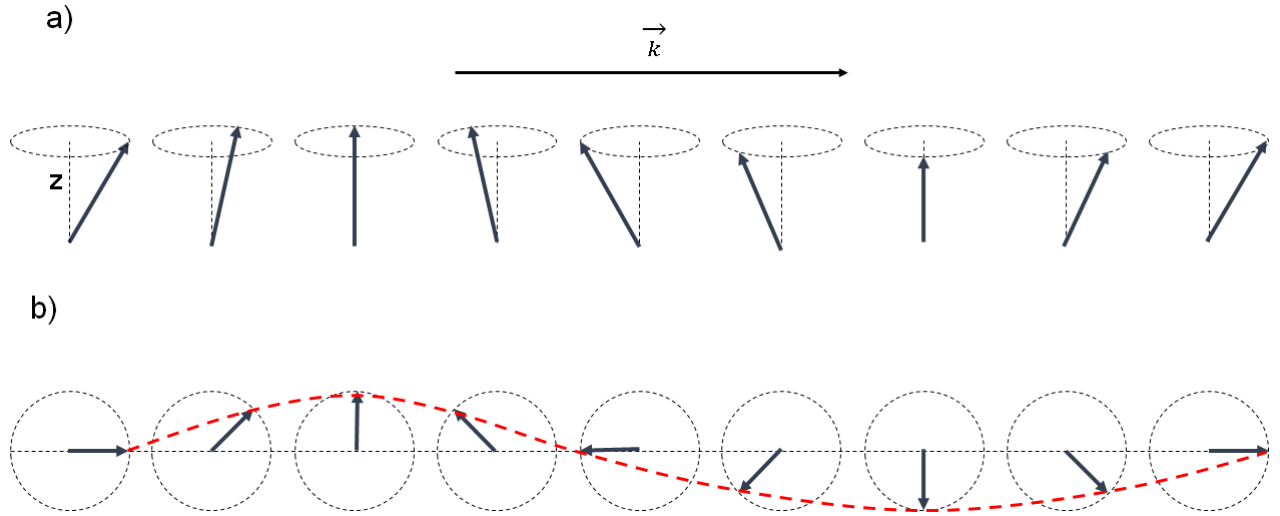


Figura 5.1. Representação semi-clássica de uma onda de spin em uma cadeia ferromagnética. Em (a), ilustramos a onda de spin como os desvios nos ângulos de precessão dos spins, setas em azul, variando linearmente de spin para spin na direção de propagação \vec{k} ao longo da cadeia. Em (b), representamos o comprimento de onda através da linha tracejada em vermelho[1].

Por simplicidade, vamos considerar um sistema ferromagnético em duas dimensões com interações apenas entre primeiros vizinhos, com Hamiltoniano dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,\vec{\delta}} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+\vec{\delta}}, \quad (5.1)$$

onde cada spin localiza-se em um sítio i e $\vec{\delta}$ representa o vetor dos vizinhos mais próximos, que poderá assumir duas direções na rede bidimensional. A configuração de menor energia com $J > 0$ corresponde aos spins alinhados na mesma direção, ou seja, ferromagnética.

É conveniente reescrever o Hamiltoniano (5.1) em função dos operadores levantamento e abaixamento, respectivamente

$$\begin{aligned} S_i^+ &= S_{i,x} + iS_{i,y}, \\ S_i^- &= S_{i,x} - iS_{i,y}, \end{aligned} \quad (5.2)$$

assim o Hamiltoniano fica

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,\vec{\delta}} \left[\frac{1}{2} \left(S_i^+ S_{i+\vec{\delta}}^- + S_i^- S_{i+\vec{\delta}}^+ \right) + S_{i,z} S_{i+\vec{\delta},z} \right]. \quad (5.3)$$

Sabendo que $S_{i,z}|s_{i,z}\rangle = s_{i,z}|s_{i,z}\rangle$, onde $s_{i,z}$ são os autovalores e $|s_{i,z}\rangle$ são os correspondentes autoestados do spin na base z , e com o auxílio das expressões: (i) $S_i^2 = \frac{1}{2}(S_i^+ S_i^- + S_i^- S_i^+) + S_{i,z}^2$ e (ii) $[S_i^+, S_i^-] = 2\hbar S_{i,z}$, encontramos como os operadores levantamento e abaixamento alteram o estado $|s_{i,z}\rangle$

$$\begin{aligned} S_i^+ |s_{i,z}\rangle &= \hbar \sqrt{s(s+1) - s_{i,z}(s_{i,z}+1)} |s_{i,z}+1\rangle \\ S_i^- |s_{i,z}\rangle &= \hbar \sqrt{s(s+1) - s_{i,z}(s_{i,z}-1)} |s_{i,z}-1\rangle, \end{aligned} \quad (5.4)$$

onde s é o valor total do spin.

Agora, vamos reescrever os operadores S_i^+ e S_i^- na base $|n_i\rangle$, onde n_i é o número de spins que sofreram desvios. Dessa forma, se n_i aumenta uma unidade, isso reflete na diminuição de uma unidade em $s_{i,z}$. Assim, podemos introduzir os operadores criação e aniquilação similares aos do oscilador harmônico, que devem obedecer as propriedades

$$\begin{aligned} [a_i^-, a_j^+] &= \delta_{i,j}, \\ [a_i^\pm, a_j^\pm] &= 0. \end{aligned} \quad (5.5)$$

O estado $|n_i\rangle$ responde a cada operador da seguinte forma

$$\begin{aligned} a_i^+ |n_i\rangle &= \sqrt{n_i+1} |n_i+1\rangle \\ a_i^- |n_i\rangle &= \sqrt{n_i} |n_i-1\rangle \\ a_i^+ a_i^- |n_i\rangle &= n_i |n_i\rangle. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Uma vez ocorrendo um desvio do estado fundamental em algum spin, isso reduzirá o valor de $s_{i,z}$, de forma que podemos escrever

$$S_{i,z}|s_{i,z}\rangle = \hbar(s - n_i)|s_{i,z}\rangle \quad s_{i,z} = s - n_i. \quad (5.7)$$

Do ponto de vista da quasepartícula, os operadores a_i^\dagger e a_i (por convenção $a_i^+ = a_i^\dagger$ e $a_i^- = a_i$) são os operadores criação e aniquilação, respectivamente. E uma vez que não há restrições para mais de um desvio no spin em um sítio, é possível que vários magnons possam existir no mesmo local. Isso indica que os magnons comportam-se como bosons e, portanto, não obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, como apontado anteriormente.

Então, através das equações (5.4) e (5.7)

$$\begin{aligned}
 S_i^+ |n_i\rangle &= \hbar \sqrt{s(s+1) - (s-n_i)(s-n_i+1)} |n_i-1\rangle \\
 &= \hbar \sqrt{2sn_i - n_i(n_i-1)} |n_i-1\rangle \\
 &= \hbar \sqrt{2s - (n_i-1)} \sqrt{n_i} |n_i-1\rangle \\
 &= \hbar \sqrt{2s - (n_i-1)} a_i |n_i\rangle,
 \end{aligned} \tag{5.8}$$

e de forma semelhante

$$S_i^- |n_i\rangle = \hbar \sqrt{2s - (n_i)} a_i^\dagger |n_i\rangle.$$

Como

$$\begin{aligned}
 \hat{n}_i a_i |n\rangle &= \hat{n}_i \sqrt{n_i} |n_i-1\rangle \\
 &= (n_i-1) \sqrt{n_i} |n_i-1\rangle \\
 &= (n_i-1) a_i |n\rangle
 \end{aligned} \tag{5.9}$$

e

$$\begin{aligned}
 a_i^\dagger \hat{n}_i |n\rangle &= a_i^\dagger n |n_i\rangle \\
 &= n_i \sqrt{n_i+1} |n_i+1\rangle \\
 &= n_i a_i^\dagger |n\rangle,
 \end{aligned} \tag{5.10}$$

podemos afirmar, por indução, que para uma função qualquer $f(\hat{n}_i)$,

$$\begin{aligned}
 f(\hat{n}_i) a_i &= f(n_i-1) a_i \\
 a_i^\dagger f(\hat{n}_i) &= f(n_i) a_i^\dagger,
 \end{aligned} \tag{5.11}$$

onde $\hat{n}_i = a_i^\dagger a_i$ é o operador número e não deve ser confundido com o escalar n_i .

Substituindo as equações (5.11) nas (5.8) e (5.9), respectivamente, obtemos finalmente

$$\begin{aligned}
 S_i^+ &= \hbar \sqrt{2} \left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2s} \right)^{1/2} a_i \\
 S_i^- &= \hbar \sqrt{2s} a_i^\dagger \left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2s} \right)^{1/2} \\
 S_i^z &= s - a_i^\dagger a_i.
 \end{aligned} \tag{5.12}$$

Essas expressões para os operadores levantamento e abaixamento em função dos operadores bosônicos de criação e aniquilação são conhecidas como *transformação de Holstein-Primakoff* [71].

Devemos considerar a aproximação para baixas temperaturas, que consiste em considerar que o número de spins que sofrem desvios deve ser bem menor que o número total de spins na rede. Isso significa que podemos expandir a função na raiz quadrada em uma série de Taylor

$$\left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2s}\right)^{1/2} = 1 - \frac{1}{2} \frac{a_i^\dagger a_i}{2s} + \dots \quad (5.13)$$

Considerando apenas o primeiro termo da expansão excluimos a possibilidade de qualquer interação entre os magnons. Essa aproximação é chamada de *Ondas de Spin Linear*, com os operadores agora na forma

$$\begin{aligned} S_i^+ &= \hbar\sqrt{2s} a_i \\ S_i^- &= \hbar\sqrt{2s} a_i^\dagger \\ S_i^z &= s - a_i^\dagger a_i. \end{aligned} \quad (5.14)$$

É essa aproximação que usaremos no trabalho desenvolvido neste capítulo.

Feito isso, devemos reescrever o Hamiltoniano do sistema em termos dos operadores criação e aniquilação através das equações (5.14) e manter os termos até a segunda ordem dos novos operadores, assim

$$\mathcal{H} = -J s \sum_{i,\vec{\delta}} \left[s + (a_i^\dagger a_{i+\vec{\delta}} + a_i a_{i+\vec{\delta}}^\dagger) - (a_i^\dagger a_i + a_{i+\vec{\delta}}^\dagger a_{i+\vec{\delta}}) \right]. \quad (5.15)$$

Nesta forma o Hamiltoniano mostra apenas o acoplamento entre os spins vizinhos no espaço real. Precisamos então diagonalizá-lo na base das excitações coletivas. Para isso, introduzimos as *transformadas de Fourier* no espaço dos vetores de onda \vec{k} das excitações coletivas

$$\begin{aligned} a_{\vec{k}}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} a_i^\dagger \\ a_{\vec{k}} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} a_i \end{aligned} \quad (5.16)$$

e a transformada inversa fica

$$\begin{aligned} a_i^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} a_{\vec{k}}^\dagger \\ a_i &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} a_{\vec{k}}, \end{aligned} \quad (5.17)$$

onde \vec{r}_i é o vetor que localiza o spin na posição i na rede. Essa transformada preserva o comutador

$$[a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}^\dagger] = \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} [a_i, a_j^\dagger] \quad (5.18)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} \delta_{i,j} \quad (5.19)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_i e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}_i}$$

$$= \delta_{\vec{k},\vec{k}'}$$

Assim, o Hamiltoniano (5.15) fica

$$\mathcal{H} = -J s \sum_{\vec{k}} \left[s + z \gamma_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + z \gamma_{-\vec{k}} a_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger - 2z a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \right], \quad (5.20)$$

onde z é o número de coordenação e $\gamma_{\vec{k}}$ é chamado de fator de estrutura, que depende da topologia da rede e por definição

$$\gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\vec{\delta}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}}. \quad (5.21)$$

Uma vez que a rede cristalina possua um centro de simetria, temos $\gamma_{-\vec{k}} = \gamma_{\vec{k}}$. Utilizando também o comutador $a_k a_k^\dagger = 1 + a_k^\dagger a_k$ (5.18), obtemos

$$\mathcal{H} = -J s \sum_{\vec{k}} \left[s + 2z (\gamma_{\vec{k}} - 1) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \gamma_{\vec{k}} \right]. \quad (5.22)$$

Podemos reescrever o Hamiltoniano como $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_2$, onde \mathcal{H}_0 é a energia do estado fundamental e \mathcal{H}_2 é a energia do estado excitado com operadores até a segunda ordem

nos operadores $a_{\vec{k}}$, dados por

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_0 &= -Jzs^2 - Jzs \sum_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}} \\ \mathcal{H}_2 &= -2Jzs \sum_{\vec{k}} (\gamma_{\vec{k}} - 1) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}.\end{aligned}\quad (5.23)$$

De modo geral, podemos fazer $\mathcal{H}_2 = \sum_{\vec{k}} \hbar \omega_{\vec{k}} \hat{n}_{\vec{k}}$, onde $\hat{n}_{\vec{k}}$ é o operador número dos magnons com vetor de onda \vec{k} . Assim, definimos a quantidade $\omega_{\vec{k}}$ como a amplitude da energia do estado excitado (fizemos, $\hbar \equiv 1$).

$$\omega_{\vec{k}} = 2Jzs(1 - \gamma_{\vec{k}}). \quad (5.24)$$

Essa quantidade também é conhecida como relação de dispersão. Para concluir nosso exemplo, vamos calcular $\omega_{\vec{k}}$ considerando uma rede quadrada ($z = 4$)

$$\begin{aligned}\gamma_{\vec{k}} &= \frac{1}{z} \sum_{\vec{\delta}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}} \\ &= \frac{1}{4} (e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_y a}) \\ &= \frac{1}{2} (\cos k_x a + \cos k_y a).\end{aligned}\quad (5.25)$$

Acima, a é apenas o espaçamento de rede, portanto

$$\omega_{\vec{k}} = 8Js \left[1 - \frac{1}{2} (\cos k_x a + \cos k_y a) \right] \quad (5.26)$$

e, fazendo $\vec{k}_x = \vec{k}_y = \vec{k}$ pequeno, a relação de dispersão para uma rede quadrada ferromagnética torna-se aproximadamente

$$\omega_{\vec{k}} = 8Js (ka)^2. \quad (5.27)$$

Outra quantidade importante que devemos saber calcular é o parâmetro de ordem, no caso a magnetização, que é dada por

$$\langle S_i^z \rangle = s - \langle a_i^\dagger a_i \rangle. \quad (5.28)$$

Para mais detalhes sobre a teoria de ondas de spin consulte a referência [70]. Com isso, estamos prontos para aplicar o método de ondas de spin linear no modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético com anisotropias de troca. No entanto, diferente do

que acontece em uma rede ferromagnética, no sistema antiferromagnético precisamos ter cuidado ao definir duas subredes, o que chamamos de rede bipartida, como veremos na seção seguinte.

5.3 Teoria de Ondas de Spin no modelo $J_1 - J'_1 - J_2$

Nesta seção, vamos aplicar a teoria de ondas de spin linear ao modelo $J_1 - J'_1 - J_2$, cujo Hamiltoniano é dado pela Eq. (4.1) que, com o auxílio da Eq. (5.4), toma a forma

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & J_1 \sum_{\langle i,j \rangle_x} \left[\frac{(1-\Delta_1)}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right] + \\ & J'_1 \sum_{\langle i,j \rangle_y} \left[\frac{(1-\Delta_1)}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right] \\ & J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \left[\frac{(1-\Delta_2)}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right], \end{aligned} \quad (5.29)$$

onde as interações de troca (J_1, J'_1, J_2), e as anisotropias de troca (Δ_1, Δ_2) recebem as mesmas atribuições físicas do capítulo 3.

Agora, vamos aplicar a teoria de ondas de spin antiferromagnética [72, 73, 74]. Nessa abordagem, dividimos a rede de N sítios em duas subredes A e B, de modo que A corresponde aos spins para cima e B aos spins orientados para baixo. Assim, a transformação de Holteins-Primakoff na aproximação linear de ondas de spin da Eq. (5.14), definida para cada subrede fica

$$\begin{aligned} S_{i,A}^+ &= \sqrt{2s} a_i, & S_{i,B}^+ &= \sqrt{2s} b_i^\dagger, \\ S_{i,A}^- &= \sqrt{2s} a_i^\dagger, & S_{i,B}^- &= \sqrt{2s} b_i, \\ S_{i,A}^z &= s - a_i^\dagger a_i, & S_{i,B}^z &= -s + b_i^\dagger b_i, \end{aligned} \quad (5.30)$$

onde a_i^\dagger e a_i (b_i^\dagger e b_i) são os operadores de criação e aniquilação dos spins que sofrem desvios na subrede A (B). Como discutido no capítulo 3, no modelo considerado temos dois estados ordenados, para J_2 pequeno o estado de Néel (AF) e para J_2 grande o estado colinear antiferromagnético (CAF). O esquema de subredes para cada estado fica claro na figura 5.2.

Primeiramente, vamos considerar o estado de Néel e estudar como o método de ondas de spin linear é sensível as flutuações quânticas em torno do estado clássico em função da frustração e das anisotropias de troca adicionadas ao sistema.

Então, partindo do estado de Néel e obedecendo a estrutura de subrede para este

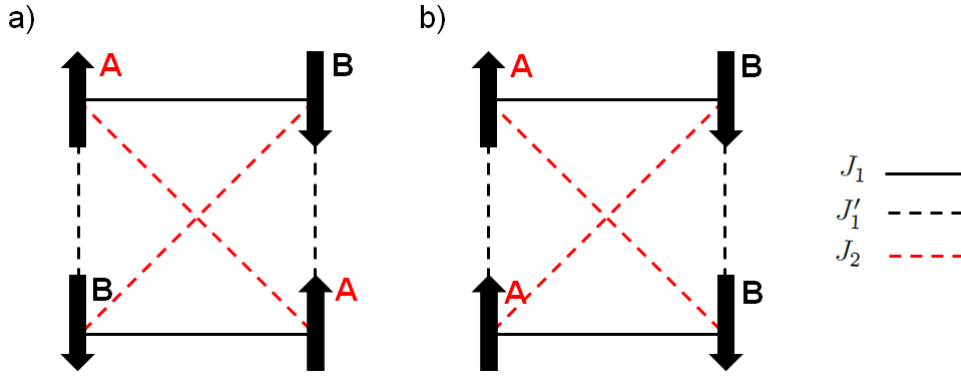


Figura 5.2. Esquema das subredes A e B no estado ordenado de Néel(a) e no colinear antiferromagnético(b).

caso [letra (a) da figura 5.2], o Hamiltoniano (5.29) torna-se

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}^{AF} = & J_1 \sum_{\langle i,j \rangle_x} \left[\frac{(1-\Delta_1)}{2} (S_{i,A}^+ S_{j,B}^- + S_{i,A}^- S_{j,B}^+) + S_{i,A}^z S_{j,B}^z \right] + \\
 & J'_1 \sum_{\langle i,j \rangle_y} \left[\frac{(1-\Delta_1)}{2} (S_{i,A}^+ S_{j,B}^- + S_{i,A}^- S_{j,B}^+) + S_{i,A}^z S_{j,B}^z \right] \\
 & \frac{J_2}{2} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \left[\frac{(1-\Delta_2)}{2} (S_{i,A}^+ S_{j,A}^- + S_{i,A}^- S_{j,A}^+) + S_{i,A}^z S_{j,A}^z + \right. \\
 & \quad \left. \frac{(1-\Delta_2)}{2} (S_{i,B}^+ S_{j,B}^- + S_{i,B}^- S_{j,B}^+) + S_{i,B}^z S_{j,B}^z \right].
 \end{aligned} \tag{5.31}$$

Substituindo as transformadas de Holstein-Primakoff com a aproximação linear (5.14) no Hamiltoniano acima, obtemos

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}^{AF} = & J_1 \sum_{\langle i,j \rangle_x} [-s^2 + s(1 - \Delta_1)(a_i^\dagger b_j^\dagger + a_i b_j) + s(a_i^\dagger a_i + b_j^\dagger b_j)] + \\
 & J'_1 \sum_{\langle i,j \rangle_y} [-s^2 + s(1 - \Delta_1)(a_i^\dagger b_j^\dagger + a_i b_j) + s(a_i^\dagger a_i + b_j^\dagger b_j)] + \\
 & \frac{J_2}{2} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} [2s^2 + 2s(1 - \Delta_2)(a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j) - s(a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j + b_i^\dagger b_i + b_j^\dagger b_j)].
 \end{aligned} \tag{5.32}$$

Podemos deixar esse Hamiltoniano na forma $\mathcal{H}^{AF} = \mathcal{H}_0^{AF} + \mathcal{H}_2^{AF}$, onde o primeiro termo é independente dos operadores criação e aniquilação e o último depende dos operadores até segunda ordem. Se o Hamiltoniano está diagonalizado, esses termos representam a energia do estado fundamental e excitado, respectivamente. Portanto, até aqui temos

$$\mathcal{H}_0^{AF} = -\frac{J_1 z_1 N s^2}{2} \left[(\lambda + 1) - \alpha \frac{z_2}{z_1} \right], \tag{5.33}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_2^{AF} = & J_1 s \left\{ \sum_{\langle i,j \rangle_x} [(1 - \Delta_1)(a_i^\dagger b_j^\dagger + a_i b_j) + (a_i^\dagger a_i + b_j^\dagger b_j)] + \right. \\
& \lambda \sum_{\langle i,j \rangle_y} [(1 - \Delta_1)(a_i^\dagger b_j^\dagger + a_i b_j) + (a_i^\dagger a_i + b_j^\dagger b_j)] + \\
& \left. \frac{\alpha}{2} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} [2(1 - \Delta_2)(a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j) + (a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j + b_i^\dagger b_i + b_j^\dagger b_j)] \right\}, \tag{5.34}
\end{aligned}$$

onde $\lambda = \frac{J'_1}{J_1}$, $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$, z_1 é o número de coordenação ao longo de x e y , e z_2 o número de coordenação ao longo da diagonal.

A transformação para o espaço das excitações coletivas é feito através da *transformada de Fourier* da eq. (5.16). Para as duas subredes, com $N/2$ sítios cada, temos que a transformada inversa é dada por

$$\begin{aligned}
a_i^\dagger &= \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_i e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} a_{\vec{k}}^\dagger, & a_i &= \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_i e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} a_{\vec{k}}, \\
b_i^\dagger &= \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_i e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} b_{\vec{k}}^\dagger, & b_i &= \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_i e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} b_{\vec{k}}.
\end{aligned} \tag{5.35}$$

Então, o Hamiltoniano \mathcal{H}_2^{AF} no espaço dos \vec{k} fica

$$\mathcal{H}_2^{AF} = \sum_{\vec{k}} \left[A_{0\vec{k}} (a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}}) + C_{0\vec{k}} (a_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}}^\dagger + a_{\vec{k}} b_{\vec{k}}) \right], \tag{5.36}$$

onde

$$\begin{aligned}
A_{0\vec{k}} &= J_1 s z_1 \left\{ (\lambda + 1) + \alpha \frac{z_2}{z_1} [(1 - \Delta_2) \gamma'_{\vec{k}} - 1] \right\}, \\
C_{0\vec{k}} &= J_1 s z_1 (1 - \Delta_1) \gamma_{\vec{k}},
\end{aligned} \tag{5.37}$$

com cada fator de estrutura dado por $\gamma_{\vec{k}} = \cos(k_x) + \lambda \cos(k_y)$ e $\gamma'_{\vec{k}} = \cos(k_x) \cos(k_y)$ [$k_{x(y)}$ é o vetor de onda na direção $x(y)$].

O Hamiltoniano acima não possui apenas termos de criação e aniquilação e, portanto, não está na sua forma diagonalizada. Para resolver este problema e diagonalizar o Hamiltoniano 5.37 devemos usar a transformação de Bogoliubov de forma apropriada, que definimos como

$$\begin{aligned}
a_{\vec{k}} &= U_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}} + V_{\vec{k}} \beta_{\vec{k}}^\dagger, & a_{\vec{k}}^\dagger &= U_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^\dagger + V_{\vec{k}} \beta_{\vec{k}}, \\
b_{\vec{k}} &= V_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^\dagger + U_{\vec{k}} \beta_{\vec{k}}, & b_{\vec{k}}^\dagger &= V_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}} + U_{\vec{k}} \beta_{\vec{k}}^\dagger.
\end{aligned} \tag{5.38}$$

As regras de comutação devem ser garantidas na nova base que diagonalizará o Hamil-

toniano, ou seja, $[\alpha_{\vec{k}}, \alpha_{\vec{k}}^\dagger] = 1$, $[\beta_{\vec{k}}, \beta_{\vec{k}}^\dagger] = 1$, $[\alpha_{\vec{k}}^\dagger, \beta_{\vec{k}}^\dagger] = 0$ e $[\alpha_{\vec{k}}, \beta_{\vec{k}}] = 0$ (não confundir α que representa a frustração com $\alpha_{\vec{k}}$ que é o operador da subrede A no espaço dos vetores de onda). As variáveis U_k e V_k são reais e devem determinar a transformação apropriada. Uma vez que todas as operações de comutação são obedecidas, a partir de $[a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}}^\dagger] = 1$ obtemos

$$U_k^2 - V_k^2 = 1. \quad (5.39)$$

Substituindo a transformação de Bogoliubov (5.38) no Hamiltoniano (5.37), obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_2^{AF} = \sum_k [A_{0k}(U_k^2 + V_k^2) + C_{0k}(2U_k V_k)] (\alpha_{\vec{k}}^\dagger \alpha_{\vec{k}} + \beta_{\vec{k}}^\dagger \beta_{\vec{k}}) + \\ [A_{0k}(2U_k V_k) + C_{0k}(U_k^2 + V_k^2)] (\alpha_{\vec{k}}^\dagger \beta_{\vec{k}}^\dagger + \alpha_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}) + 2(A_{0k} V_k^2 + C_{0k} U_k V_k). \end{aligned} \quad (5.40)$$

O coeficiente que acompanha o termo $(\alpha_{\vec{k}}^\dagger \beta_{\vec{k}}^\dagger + \alpha_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}})$ deve ser nulo no Hamiltoniano diagonalizado. Assim, com essa equação gerada no processo de diagonalização e a equação (5.39) é possível determinar U_k e V_k

$$\begin{aligned} U_k^2 &= \frac{1}{2} \left(\frac{A_{0k}}{\omega_k} + 1 \right), \\ V_k^2 &= \frac{1}{2} \left(\frac{A_{0k}}{\omega_k} - 1 \right), \end{aligned} \quad (5.41)$$

onde $\omega_k = \sqrt{A_{0k}^2 - C_{0k}^2}$ é a relação de dispersão.

O último termo no Hamiltoniano (5.40) é independente dos operadores e será adicionado à \mathcal{H}_0^{AF} . Uma vez conhecidos U_k e V_k , temos que esse termo independente deve ser reescrito como

$$2(A_{0k} V_k^2 + C_{0k} U_k V_k) = \omega_k - A_{0k}. \quad (5.42)$$

Assim, o Hamiltoniano diagonalizado é dado por

$$\mathcal{H}^{AF} = \mathcal{H}_0^{AF} + \sum_k \omega_k (\alpha_{\vec{k}}^\dagger \alpha_{\vec{k}} + \beta_{\vec{k}}^\dagger \beta_{\vec{k}}). \quad (5.43)$$

Estamos interessados no estudo do estado fundamental, portanto desprezaremos as excitações e trabalharemos apenas com a energia do estado fundamental \mathcal{H}_0^{AF}

$$\mathcal{H}_0^{AF} = -\frac{J_1 z_1 N s^2}{2} \left[(\lambda + 1) - \alpha \frac{z_2}{z_1} \right] + \sum_k (\omega_k - A_{0k}). \quad (5.44)$$

Com o auxílio das equações (5.37), a energia do estado fundamental da fase AF por

unidade de partícula e interação de troca J_1 pode ser escrita como

$$\frac{E_o^{AF}}{J_1 N} = -\frac{z_1}{2} s(s+1) \left[(\lambda+1) - \frac{z_2}{z_1} \alpha \right] + \frac{1}{2J_1} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} [\omega_k - J_1 \alpha s z_2 (1 - \Delta_2) \gamma'_k] \frac{d^2 k}{(2\pi)^2}, \quad (5.45)$$

onde cada integral é realizada na primeira zona de *Brillouin* da rede quadrada.

O cálculo da magnetização é dado a partir da média do operador $S_{i,A}^z$

$$\begin{aligned} m_{AF} &= \frac{2}{N} \sum_i \langle S_{i,A}^z \rangle \\ &= s - \frac{2}{N} \sum_k \langle a_k^\dagger a_{\bar{k}} \rangle \end{aligned} \quad (5.46)$$

com

$$\begin{aligned} \langle a_k^\dagger a_{\bar{k}} \rangle &= V_k^2 + (U_k^2 + V_k^2) (\langle \alpha_k^\dagger \alpha_{\bar{k}} \rangle + \langle \beta_k^\dagger \beta_{\bar{k}} \rangle) + U_k V_k (\langle \alpha_k^\dagger \beta_{\bar{k}}^\dagger \rangle + \langle \alpha_{\bar{k}} \beta_k \rangle) \\ &= V_k^2 + (U_k^2 + V_k^2) (n_A + n_B), \end{aligned} \quad (5.47)$$

onde n_A e n_B é o número de ocupação de bosons nas subredes A e B, respectivamente. De acordo com a estatística de Bose-Einstein temos

$$n_i = \frac{1}{e^{E_i/k_B T} - 1}. \quad (5.48)$$

Assim, uma vez que desejamos estudar o estado fundamental, ou seja em $T = 0$, temos que o número de ocupação para cada subrede deve ser nulo. Então a magnetização fica apenas

$$m_{AF} = s - \frac{2}{N} \sum_k V_k^2, \quad (5.49)$$

que, pelas equações (5.39) e (5.37), resulta em

$$m_{AF} = s - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{J_1 s \{ (\lambda+1) z_1 + \alpha z_2 [(1 - \Delta_2) \gamma'_k - 1] \}}{\omega_k} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2}. \quad (5.50)$$

Para obter a energia do estado fundamental do estado colinear antiferromagnético e a sua magnetização de subrede, podemos refazer todos os passos a partir do início desta seção considerando o ordenamento CAF [letra (b) da figura 5.2]. Outra forma é perceber que as interações de troca ao longo da vertical e da diagonal são trocadas

quando passamos da descrição de um estado para outro, de modo que

$$z_1 \lambda \longrightarrow z_2 \alpha \quad (5.51)$$

$$z_2 \alpha \longrightarrow z_1 \lambda \quad (5.52)$$

$$\lambda \cos k_y \longrightarrow \alpha \gamma'_k$$

$$\alpha \gamma'_k \longrightarrow \lambda \cos k_y$$

$$\lambda(1 - \Delta_1) \longrightarrow \alpha(1 - \Delta_2)$$

$$\alpha(1 - \Delta_2) \longrightarrow \lambda(1 - \Delta_1).$$

Os coeficientes da equação (5.37) para a fase colinear são dados por

$$\overline{A_{0k}} = J_1 s z_1 \left\{ \left(\alpha \frac{z_2}{z_1} + 1 \right) + \lambda [(1 - \Delta_1) \gamma'_k - 1] \right\}, \quad (5.53)$$

$$\overline{C_{0k}} = J_1 s z_1 \left\{ (1 - \Delta_1) \cos k_x + \alpha \frac{z_2}{z_1} (1 - \Delta_2) \gamma'_k \right\}.$$

Assim, a energia do estado fundamental e a magnetização de subrede da fase CAF são dadas por

$$\frac{E_o^{CAF}}{J_1 N} = -\frac{z_1}{2} s(s+1) \left[\frac{\alpha z_2}{z_1} - \lambda + 1 \right] + \frac{1}{2J_1} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} [\overline{\omega_k} - J_1 \lambda s z_1 (1 - \Delta_1) \cos k_y] \frac{d^2 k}{(2\pi)^2}, \quad (5.54)$$

$$m_{CAF} = s - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{J_1 s \{ (1 - \Delta_1) \cos k_x + \alpha z_2 (1 - \Delta_2) \gamma'_k \}}{\overline{\omega_k}} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2}, \quad (5.55)$$

onde $\overline{\omega_k} = \sqrt{\overline{A_{0k}}^2 - \overline{C_{0k}}^2}$.

Então, com a energia do estado fundamental e a magnetização de subrede definidas para cada estado AF e CAF podemos abordar os efeitos das anisotropias de troca Δ_1 e Δ_2 , e frustração no modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ do ponto de vista da teoria de ondas de spin linear.

5.4 Resultados

Apresentamos nossos resultados obtidos via ondas de spin linear, através de diagramas de fases e do comportamento da magnetização em função da frustração e para determinados valores das anisotropias Δ_1 e Δ_2 . Seguiremos a mesma proposta de valores para

as anisotropias realizada no capítulo 3, onde o mesmo modelo anisotrópico $J_1 - J'_1 - J_2$ foi abordado através de um método variacional.

Primeiramente, analisamos o caso simétrico com $\lambda = 1$ e anisotropias de troca iguais, ou seja $\Delta = \Delta_1 = \Delta_2$. Na figura 5.3, temos o comportamento da magnetização alternada para as fases antiferromagnética e colinear antiferromagnética em função da frustração para alguns valores de Δ no intervalo de 0 a 1. Para $\Delta = 0$, temos uma fase paramagnética quântica entre as fases ordenadas, com as magnetizações m_{AF} e m_{CAF} indo a zero de forma contínua, o que sinaliza transições de fases de segunda ordem entre a fase antiferromagnética e desordenada em $\alpha = 0.385$ e colinear antiferromagnética e desordenada em $\alpha = 0.508$, respectivamente. Com um pequeno aumento da anisotropia para $\Delta = 0.044$, observamos uma diminuição da região desordenada e que a transição entre as fases AF e PQ se mantém de segunda ordem, enquanto a transição entre as fases CAF e PQ se torna de primeira ordem. Através da última observação, chamamos atenção para o fato de não podermos determinar o ponto crítico da transição de fase de primeira ordem entre as fases colinear antiferromagnética e desordenada. Isso acontece porque, pela teoria ondas de spin somos incapazes de obter a energia da fase desordenada (como vimos na seção anterior, via ondas de spin partimos de uma determinada fase ordenada para obter sua energia e parâmetro de ordem, como fizemos para as fase antiferromagnética e colinear antiferromagnética, e não de uma fase desordenada). Assim, diferente da transição de segunda ordem entre uma fase ordenada e desordenada, onde o valor no qual o parâmetro de ordem vai à zero garante o ponto de transição, na transição de primeira ordem para a fase desordenada o ponto crítico depende do cruzamento das energias para ser determinado, o que não pode ser feito. Isso nos leva a acreditar que a transição entre as fase colinear antiferromagnética e desordenada para $\Delta = 0$, apesar da magnetização estar indo a zero de forma contínua, é na verdade de primeira ordem, e não de segunda ordem como aparenta, já que não foi classificada da forma correta devido a ausência da energia para fase desordenada. Continuando com o aumento da anisotropia, em $\Delta = 0.244$, a fase desordenada desaparece, e a partir deste ponto temos apenas transições de fases de primeira ordem entre as fases AF e CAF, indicadas através das linhas pontilhadas. Finalmente, no limite $\Delta = 1$ as magnetizações recebem o valor clássico de saturação $1/2$. O diagrama de fase correspondente é dado pela figura 5.4, no plano $\alpha - \Delta$ onde observamos a fase desordenada desaparecendo no ponto crítico terminal $(0.569, 0.244)$. A linha em vermelho é uma representação do comportamento físico da transição de primeira ordem entre a fase colinear antiferromagnética e desordenada. A partir daqui, toda transição de fase de primeira ordem com a fase desordenada será tratada de forma esquemática, uma vez que via teoria de ondas de spin somos incapazes de acessá-la.

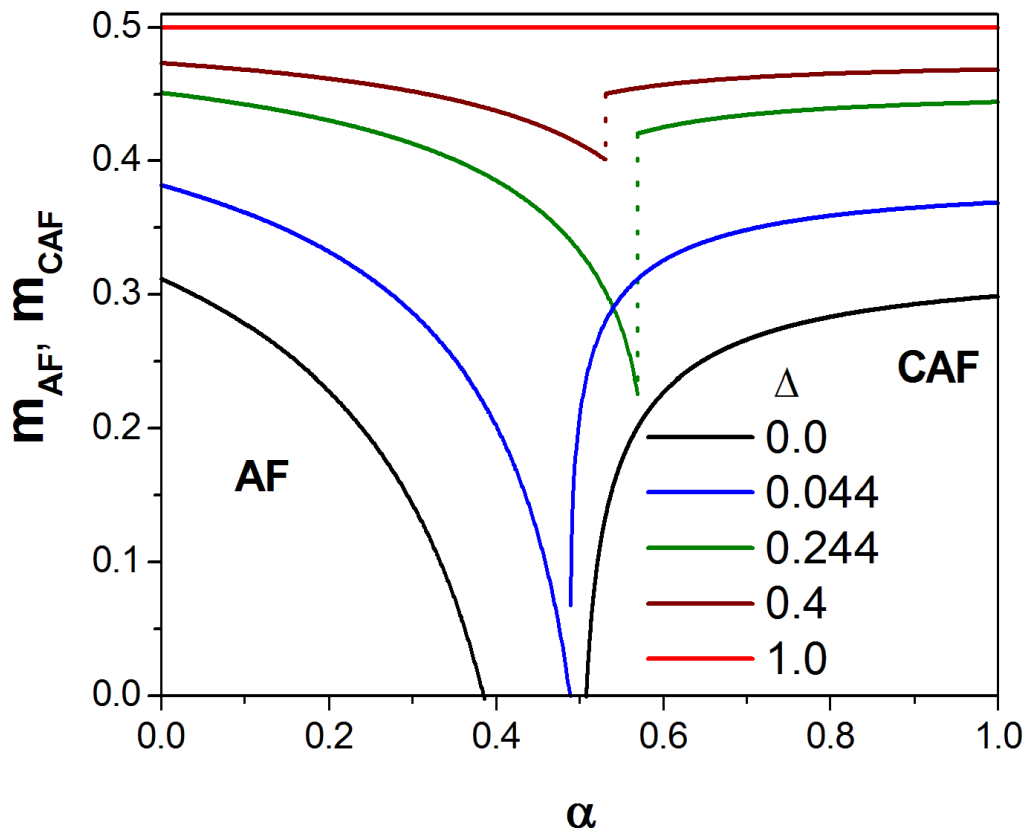


Figura 5.3. Magnetização alternada para as fases AF e CAF em função de α , para alguns valores de Δ , onde $\Delta = \Delta_1 = \Delta_2$. A fase desordenada é obtida entre as fases ordenadas e desaparece para $\Delta = 0.244$. Para $\Delta = 1$, linha vermelha, obtemos o comportamento clássico. As linhas pontilhadas indicam transições de primeira ordem entre as fases ordenadas.

Com relação a competição $\lambda = J'_1/J_1$, apresentamos na figura 5.5 o comportamento do diagrama de fase para vários valores de λ . A diminuição no valor de λ implica em uma gradativa diminuição da região desordenada, porém sem mudar o aspecto global do diagrama de fase. No limite unidimensional, $\lambda = 0$, temos apenas a fase colinear para qualquer valor de frustração α com ponto crítico terminal localizado na origem. Outra forma de analisar estes resultados é através do diagrama de fase no plano $\lambda - \alpha$, figura 5.6, que deixa muito claro como anisotropia de troca influencia a região da fase desordenada, sendo máxima para $\Delta = 0$ e desaparecendo completamente para $\Delta = 0.244$. Outro detalhe que se torna mais evidente nesse gráfico é o deslocamento do ponto crítico terminal para a origem conforme $\lambda \rightarrow 0$.

A partir daqui, passaremos a estudar os efeitos de considerar as anisotropias de

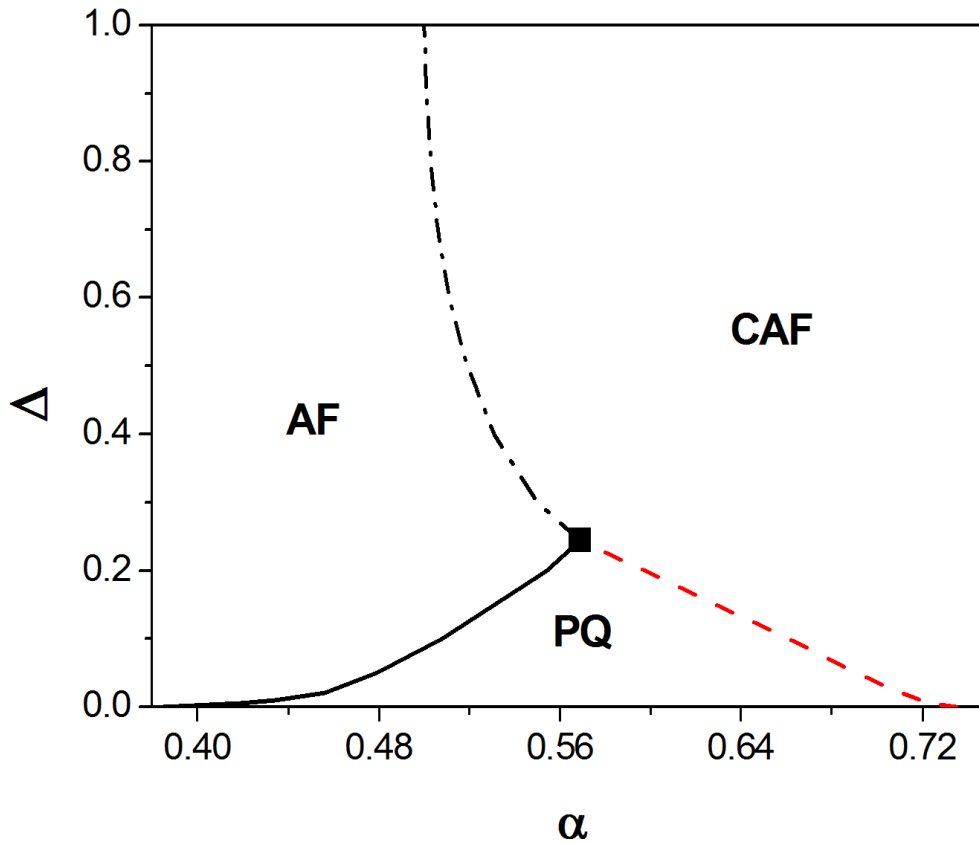


Figura 5.4. Diagrama de fase no plano $\alpha - \Delta$ para $\lambda = 1$. A linha sólida e as tracejada e traço-ponto representam transições de segunda e primeira ordem, respectivamente. O ponto em negrito corresponde ao ponto crítico terminal localizado em $(0.569, 0.244)$. A linha de transição CAF-PQ, em vermelho, é apenas uma representação esquemática, uma vez que via teoria de ondas de spin não obtemos a energia da fase desordenada.

troca Δ_1 e Δ_2 diferentes, do ponto de vista da teoria de ondas de spin. Uma vez que o valor de λ não influencia o comportamento qualitativo do sistema, exceto no limite $\lambda = 0$, usaremos o valor simétrico $\lambda = 1$ para desenvolvermos o estudo com anisotropias diferentes. Seguiremos da mesma forma anterior: fixaremos a anisotropia Δ_1 em 0 e em 1, variando Δ_2 , e depois o contrário.

Para $\Delta_1 = 0$, temos o comportamento das magnetizações alternadas em função da frustração e o correspondente diagrama de fase nas figuras 5.7 e 5.8, respectivamente. Analisando as magnetizações 5.7, observamos que um pequeno aumento da anisotropia Δ_2 diminui drasticamente o valor de transição de α da fase antiferromagnética para desordenada. Por exemplo, com um aumento da ordem de $\Delta_2 \sim 10^{-4}$ o valor de transição da frustração vai de $\alpha = 0.385 \rightarrow 0.184$, e a partir de $\Delta_2 \approx 0.1$ a magnetização

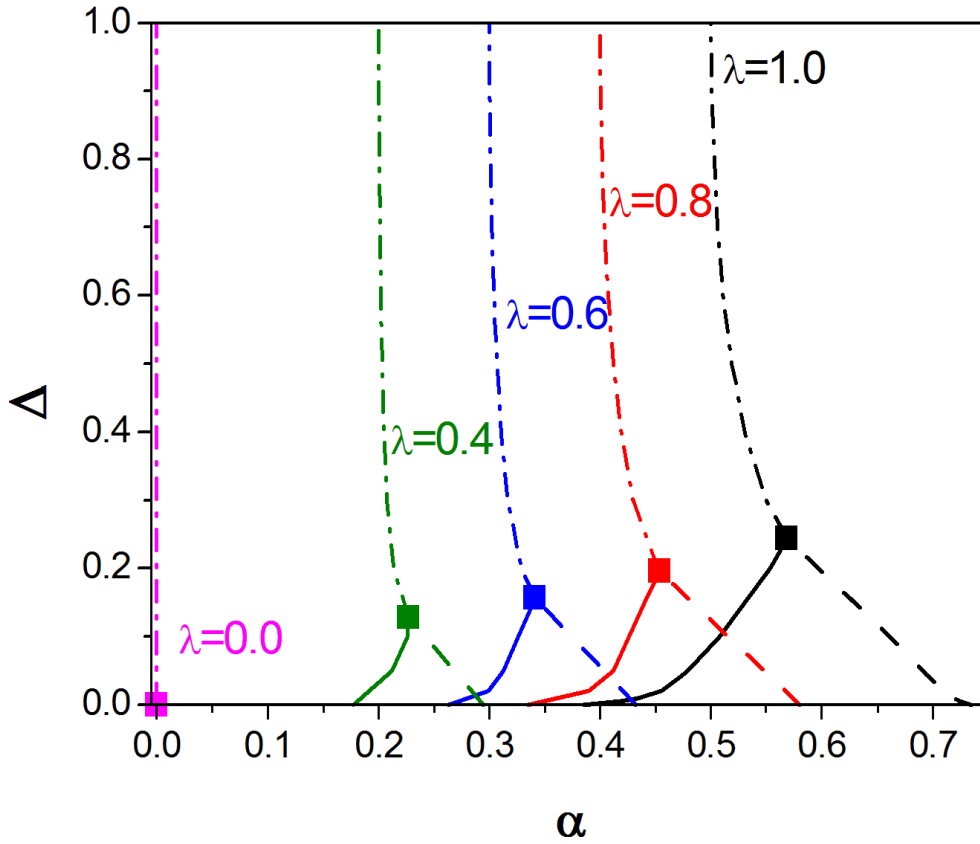


Figura 5.5. Comparação dos diagramas de fases no plano $\alpha - \Delta$ para diferentes valores de λ . A localização das fases AF, CAF e PQ é a mesma da figura 5.4 para cada λ de acordo com a cor, exceto para $\lambda = 0$ que possui apenas a fase colinear antiferromagnética. Os quadrados representam o ponto crítico terminal para cada valor de λ . Claramente, com $\lambda \rightarrow 0$ o ponto crítico terminal também vai à zero.

m_{AF} vai à zero rapidamente com valores infinitesimais de frustração α . Por outro lado, as magnetizações m_{CAF} mantem uma mudança gradativa com o aumento de Δ_2 , até $\Delta_2 = 1$, onde a magnetização também vai à zero rapidamente (os círculos no gráfico simbolizam a magnetização caindo bruscamente à zero). No respectivo diagrama de fase 5.8, podemos ver que a região da fase antiferromagnética é suprimida com o aumento de Δ_2 , sendo extremamente menor em comparação com o caso onde as anitropias são iguais. A linha de transição da fase AF-PQ permanece de segunda ordem e lembramos que a linha de transição da fase CAF-PQ é apenas esquemática.

Para $\Delta_1 = 1$, através da figura 5.9 temos que as magnetizações não sofrem influência alguma da frustração até o ponto de transição de primeira ordem entre as fases ordenadas para cada valor de Δ_2 , restabelecendo o comportamento clássico para

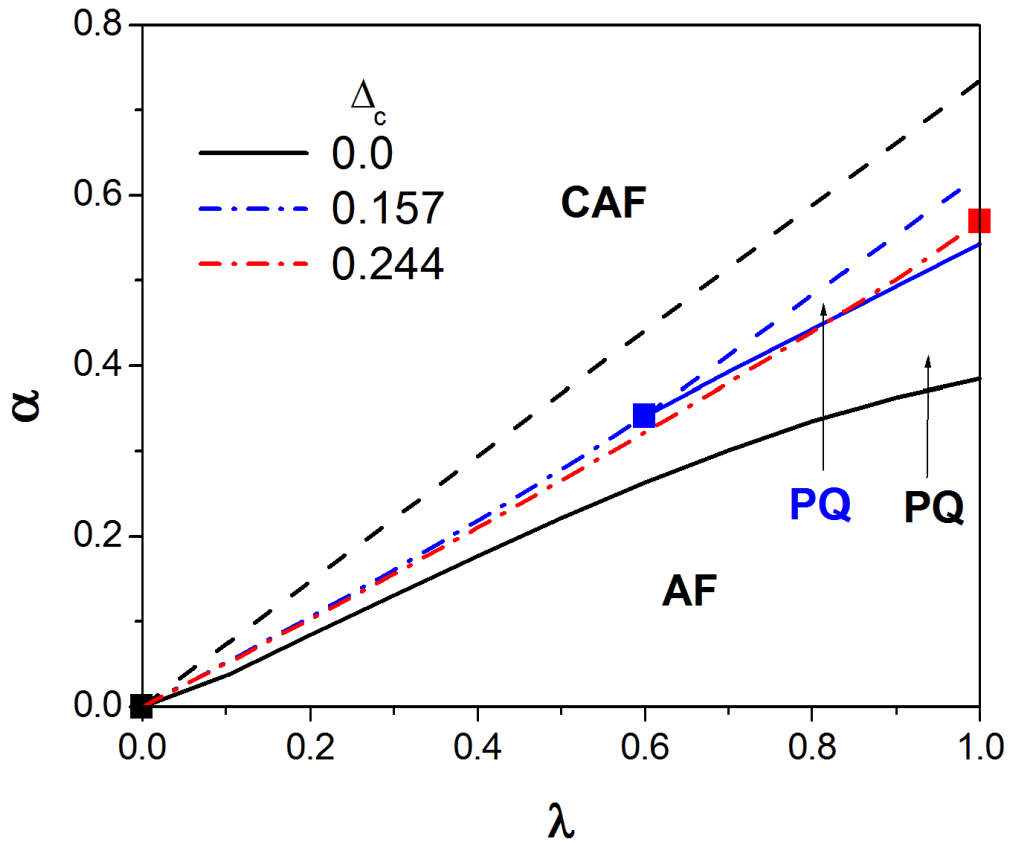


Figura 5.6. Diagrama de fase no plano $\lambda - \alpha$ para diferentes valores de Δ . As linhas tracejadas representam transições de primeira ordem e as linhas sólidas representam transições de segunda ordem. Os quadrados representam os pontos críticos terminais para cada valor de Δ . Em preto temos $\Delta = 0$, com o ponto crítico terminal na origem. Em azul $\Delta = 0.157$ com o ponto crítico terminal deslocado da origem na coordenada λ para $\lambda = 0.6$ e finalmente em vermelho $\Delta = 0.244$ como o ponto crítico terminal para $\lambda = 1$.

$\Delta_2 = 1$. Pelo diagrama de fase 5.10, verificamos que para $\Delta_1 = 1$ não temos a fase intermediária entre as fases ordenadas e apenas uma linha de transição de primeira ordem entre as fases Af e CAF é obtida.

Como para $\Delta_1 = 0$ temos uma fase desordenada para todo valor de frustração, e para $\Delta_1 = 1$ não observamos a fase desordenada, seria interessante analisar qual o comportamento para valores intermediários de campo cristalino. Verificamos que com o aumento do valor Δ_1 o sistema passa por três etapas. A primeira, figura 5.11, é caracterizada pela diminuição da região desordenada no eixo $\Delta_2 = 0$, até $\Delta_1 = 0.241$, onde temos nosso primeiro ponto crítico terminal, marcando o fim da fase desordenada. A segunda etapa, figura 5.12, podemos ver o ponto crítico terminal seguindo ao longo do

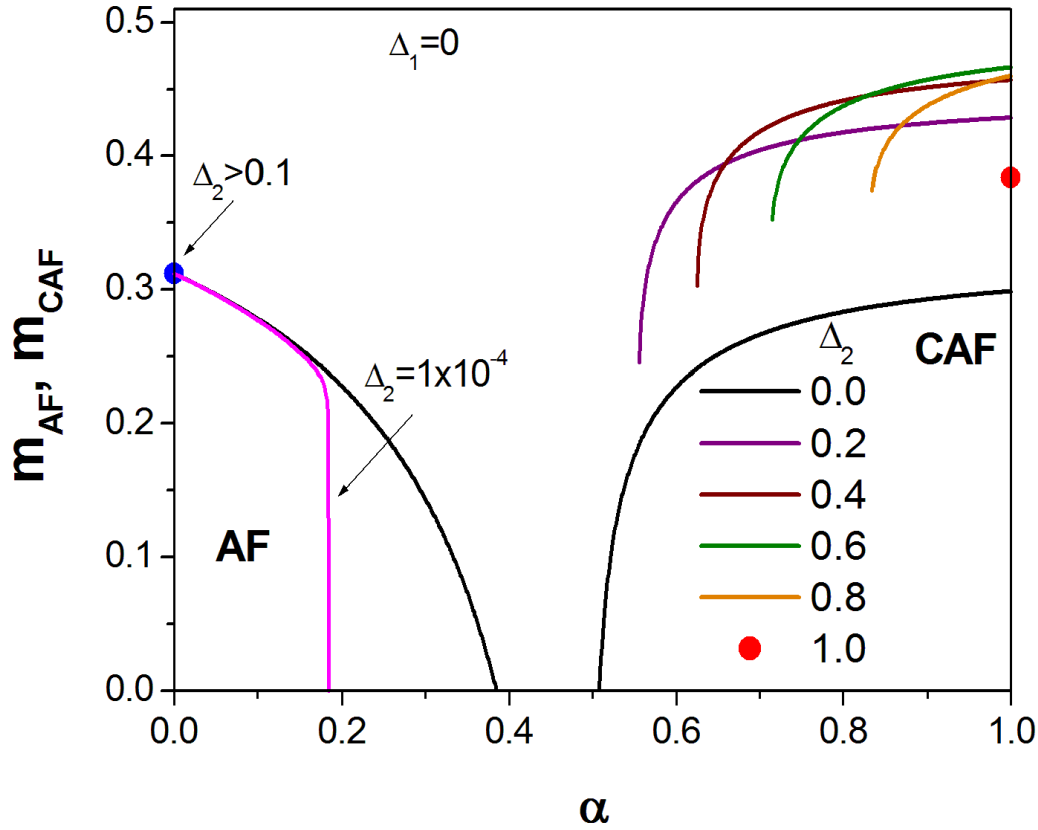


Figura 5.7. Magnetizações alternadas antiferromagnética m_{AF} , partindo de $\alpha = 0$, e colinear antiferromagnética m_{CAF} , partindo de $\alpha = 1$, em função da frustração para o valor fixo $\Delta_1 = 0$ e vários valores de $\Delta = \Delta_2$. Para $\Delta_2 = 10^{-4}$, temos $\alpha_c = 0.184$ e aproximadamente a partir de $\Delta_2 > 0.1$ a magnetização vai rapidamente à zero, o que sinalizamos através do círculo azul. As magnetizações m_{CAF} apresentam descontinuidades para valores de Δ_2 diferentes de zero, porém devido a ausência da energia da fase desordenada não podemos determinar o ponto onde a descontinuidade acontece com precisão e, por isso, não usamos linhas tracejadas para representá-las como na figura 3.13. O ponto em vermelho indica a magnetização colinear indo a zero rapidamente para $\Delta_2 = 1$.

eixo Δ_2 , onde abaixo dele temos transição de primeira ordem entre as fases ordenadas e acima a fase desordenada entre as fases ordenadas, e isso segue até $\Delta_1 = 0.544$, marcando o último ponto crítico terminal. A partir do valor fixo $\Delta_1 > 0.544$, temos a terceira etapa, com o comportamento sem presença de fase desordenada restabelecido até $\Delta_1 = 1$.

Agora, vamos fixar valores de Δ_2 . Para $\Delta_2 = 0$, figura 5.14, o comportamento das magnetizações é muito semelhante com o caso das anisotropias iguais 5.3, porém apenas a magnetização m_{AF} é capaz de restabelecer o valor clássico no limite $\Delta_1 = 1$.

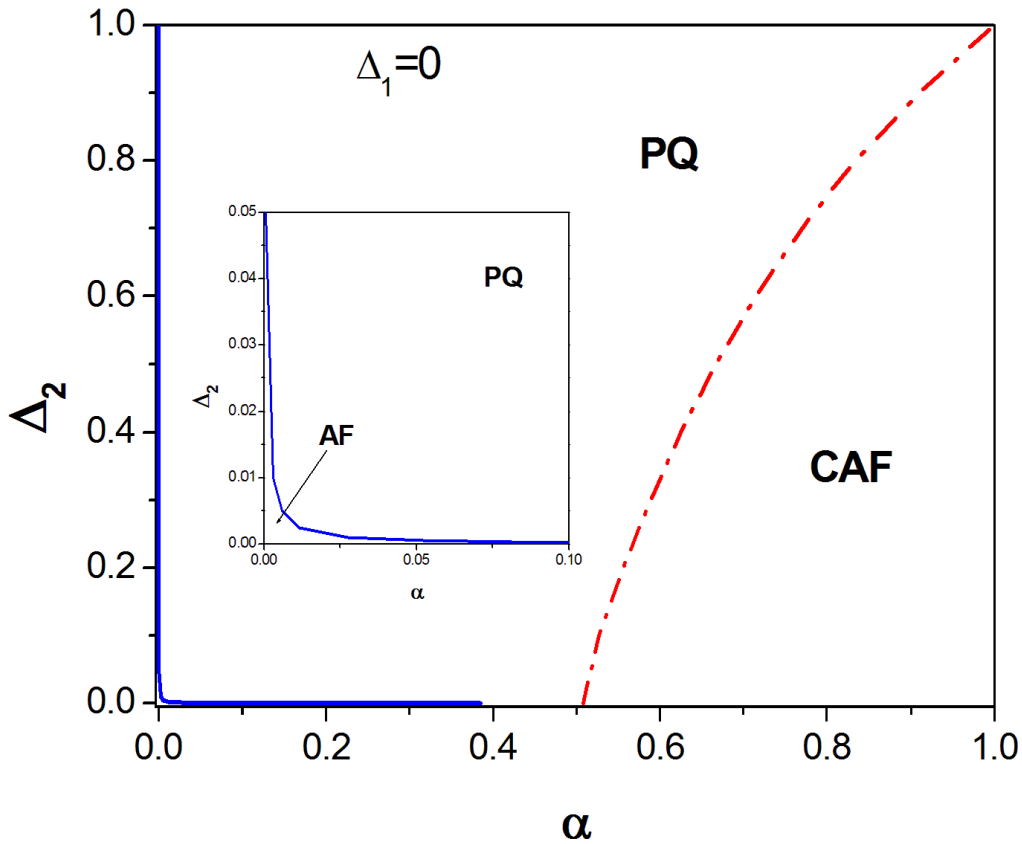


Figura 5.8. Diagrama de fase no plano $\alpha - \Delta$ para $\Delta_1 = 0$ e $\Delta = \Delta_2$. Como indicado pelo gráfico menor inserido, a fase AF possui uma região muito pequena, em comparação as fases PQ e CAF, e concentra-se próximo à origem. A linha de transição da fase PQ-CAF, em vermelho, segue a mesma descrição da respectiva transição na figura 5.4.

O diagrama de fase para este caso, figura 5.15, também não sofre mudanças do ponto de vista qualitativo, em comparação com o diagrama 5.4, com ponto crítico terminal localizado em $(0.501, 0.243)$.

Para $\Delta_2 = 1$, na figura 5.16, temos a magnetização em função da frustração com comportamento também sem mudanças qualitativas com relação ao caso onde as anisotropias são tomadas da mesma forma 5.3, com ambas as magnetizações m_{AF} e m_{CAF} caindo no valor clássico no limite $\Delta_1 = 1$, enquanto para $\Delta_2 = 0$ isso só acontece para m_{AF} , como esperado. Os círculos indicam onde a magnetização caiu rapidamente com variações infinitesimais na frustração, em torno de $\alpha = 0$ e $\alpha = 1$, para a m_{AF} e m_{CAF} , respectivamente. Na figura 5.17, obtemos o diagrama de fase para este caso, com ponto crítico terminal em $(0.543, 0.545)$. Apresentamos, também,

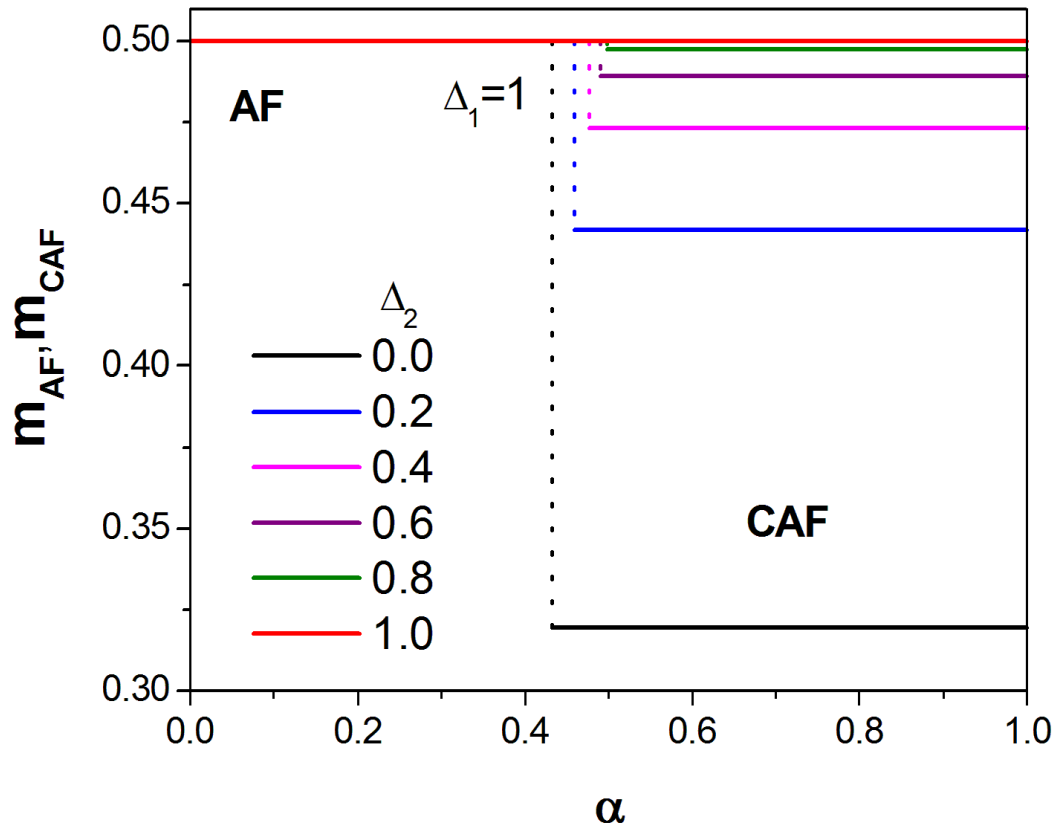


Figura 5.9. O mesmo da figura 5.7 para $\Delta_1 = 1$. Ambas as magnetizações m_{AF} e m_{CAF} mantêm-se constantes até o ponto de transição de primeira ordem entre as fases ordenadas, indicados pelas linhas tracejadas para cada valor de Δ_2 .

uma comparação entre os diagramas de fases para $\Delta_1 = \Delta_1$, $\Delta_2 = 0$ e $\Delta_2 = 1$, dado pela figura 5.18. Notamos que a região desordenada é maior para $\Delta_2 = 1$ do que para $\Delta_2 = 0$, com relação à região desordenada para as anisotropias iguais.

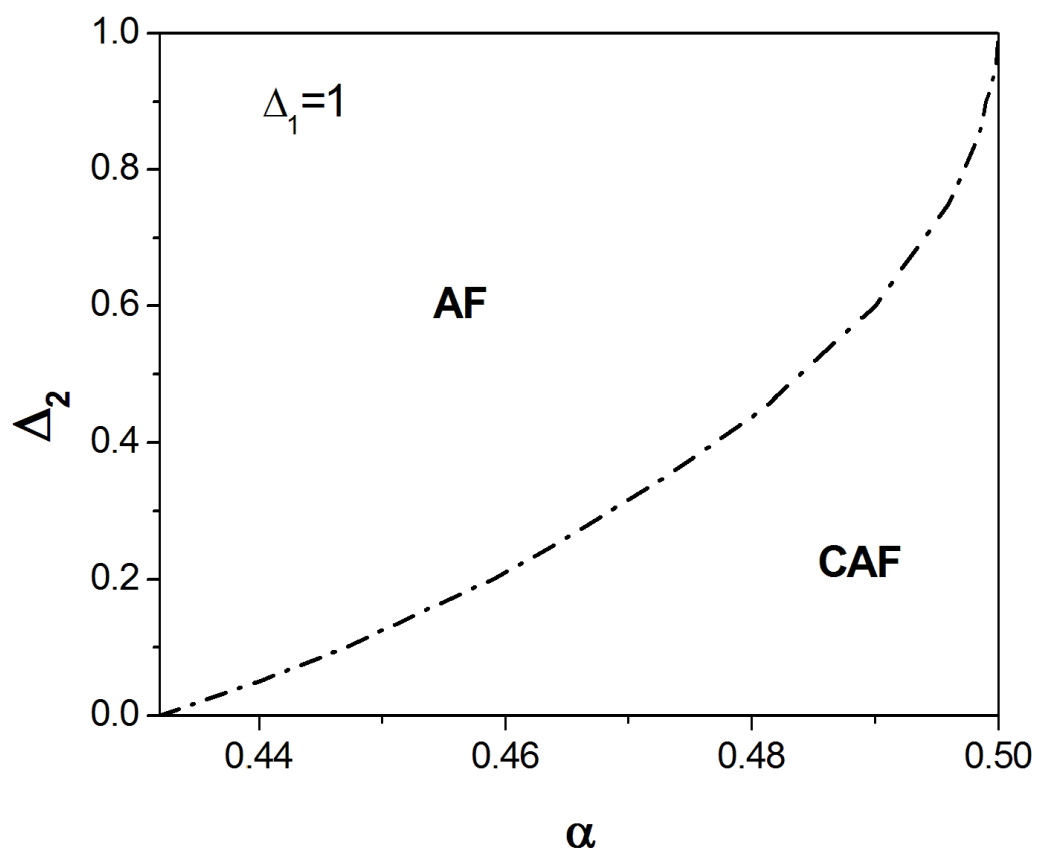


Figura 5.10. O mesmo da figura 5.8 para $\Delta_1 = 1$. Nesse caso, não observamos a presença da fase desordenada, apenas uma transição direta de primeira ordem entre as fases ordenadas.

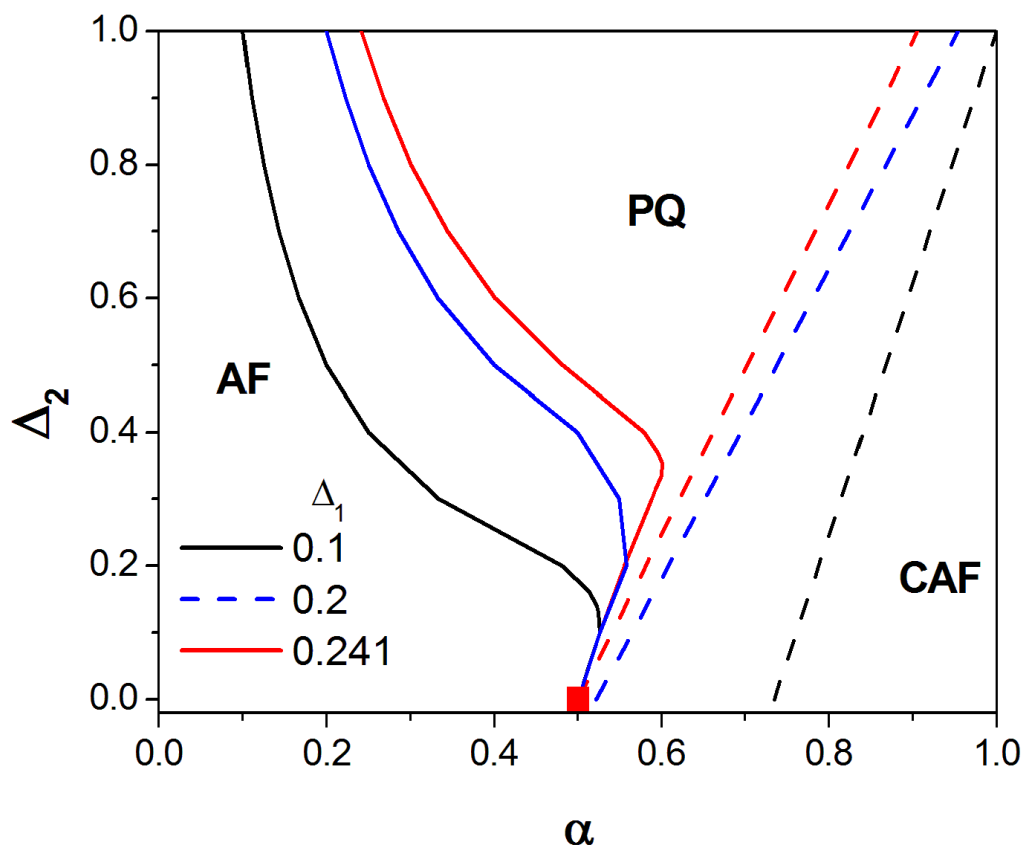


Figura 5.11. Diagrama de fase no plano $\alpha - \Delta_2$, para alguns valores de $\Delta_1 \leq 0.241$. O quadrado representa o ponto crítico terminal e marca o fim da fase desordenada no eixo $\Delta_2 = 0$.

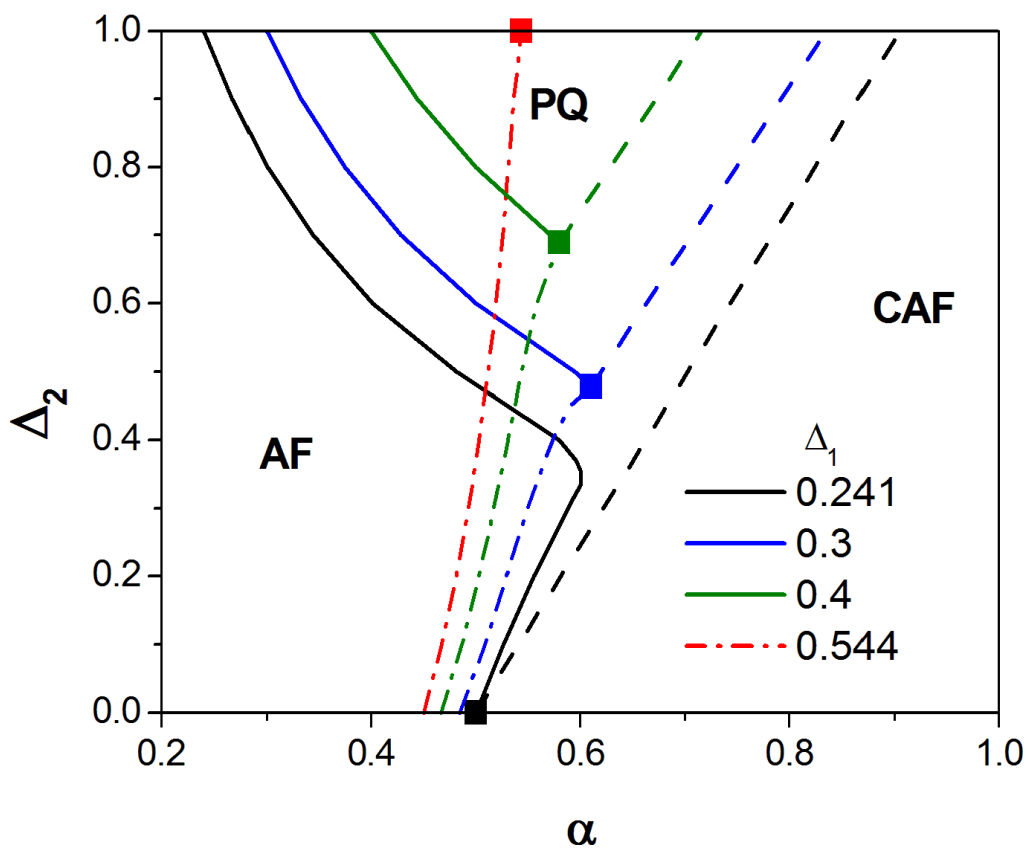


Figura 5.12. O mesmo da figura 5.11 para $0.241 \leq \Delta_1 \leq 0.544$. Com o aumento de Δ_1 dentro desta faixa de valores, observamos a diminuição da região desordenada, com o último ponto crítico terminal dado pelo quadrado em vermelho.

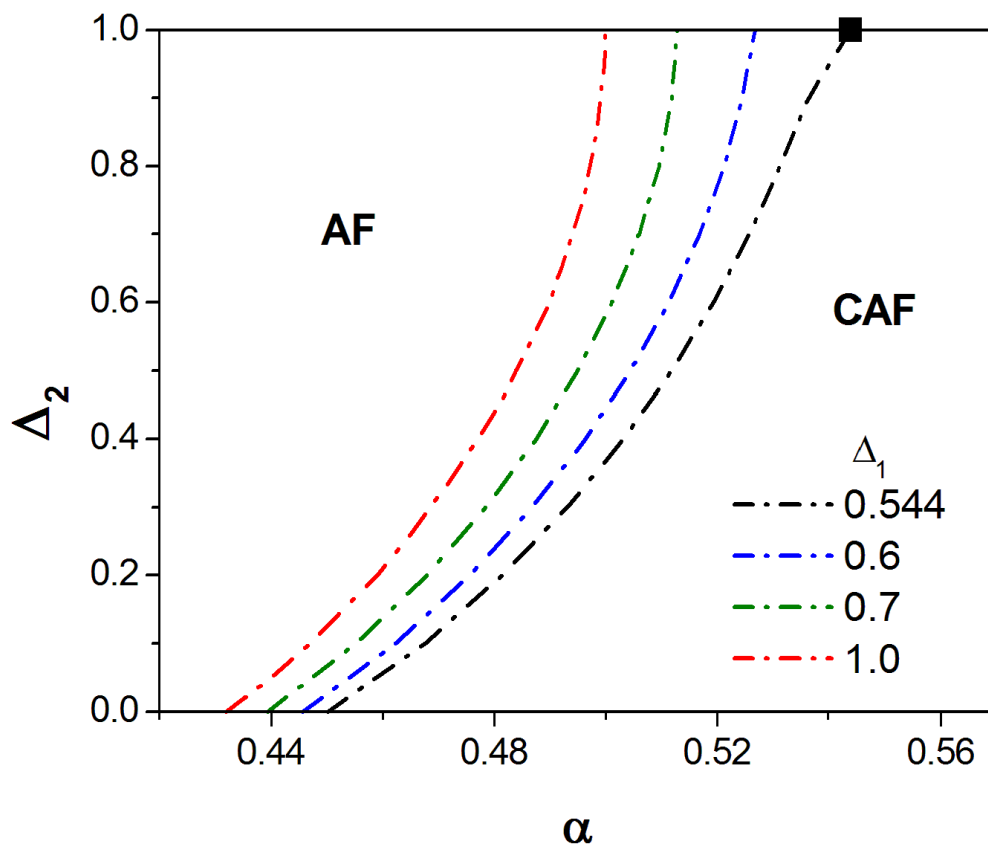


Figura 5.13. O mesmo da figura 5.11 para $0.544 \leq \Delta_1 \leq 1$. Neste intervalo não observamos mais a fase desordenada.

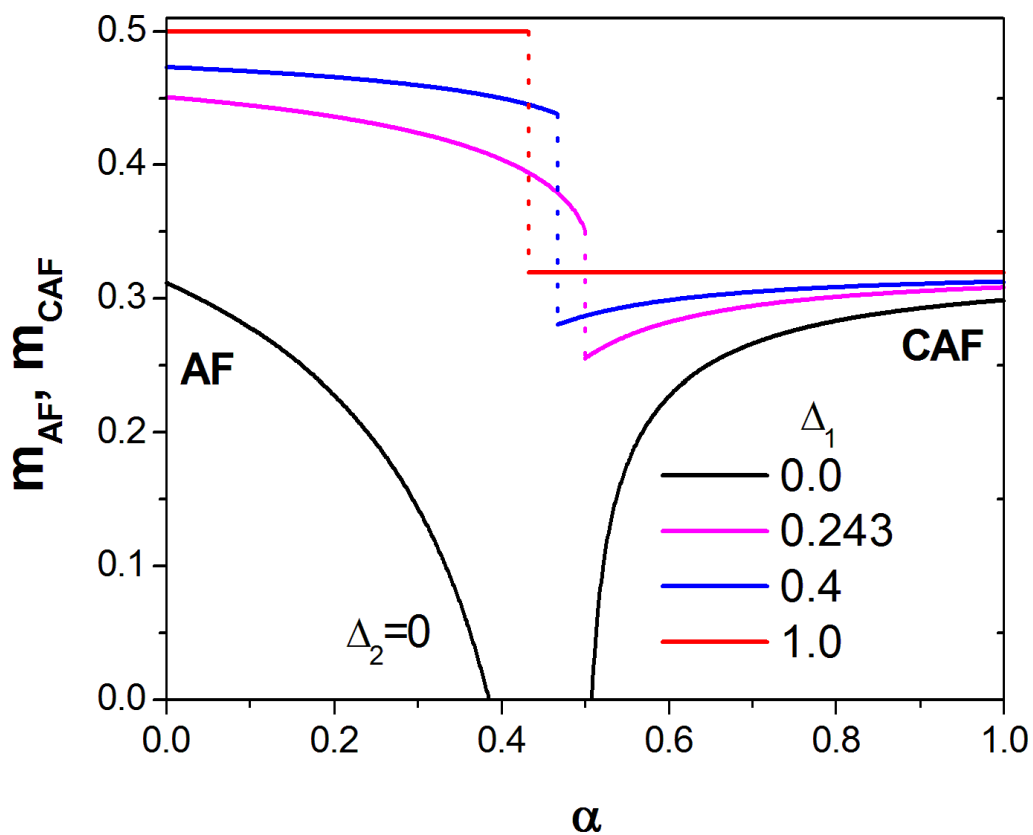


Figura 5.14. O mesmo da figura 5.3 para $\Delta_2 = 0$ e alguns valores de Δ_1 . As linhas tracejadas representam pontos de transição de primeira ordem entre as fases antiferromagnética e colinear antiferromagnética. Apenas a magnetização m_{AF} restabelece o valor clássico de 0.5 no limite $\Delta_1 = 1$.

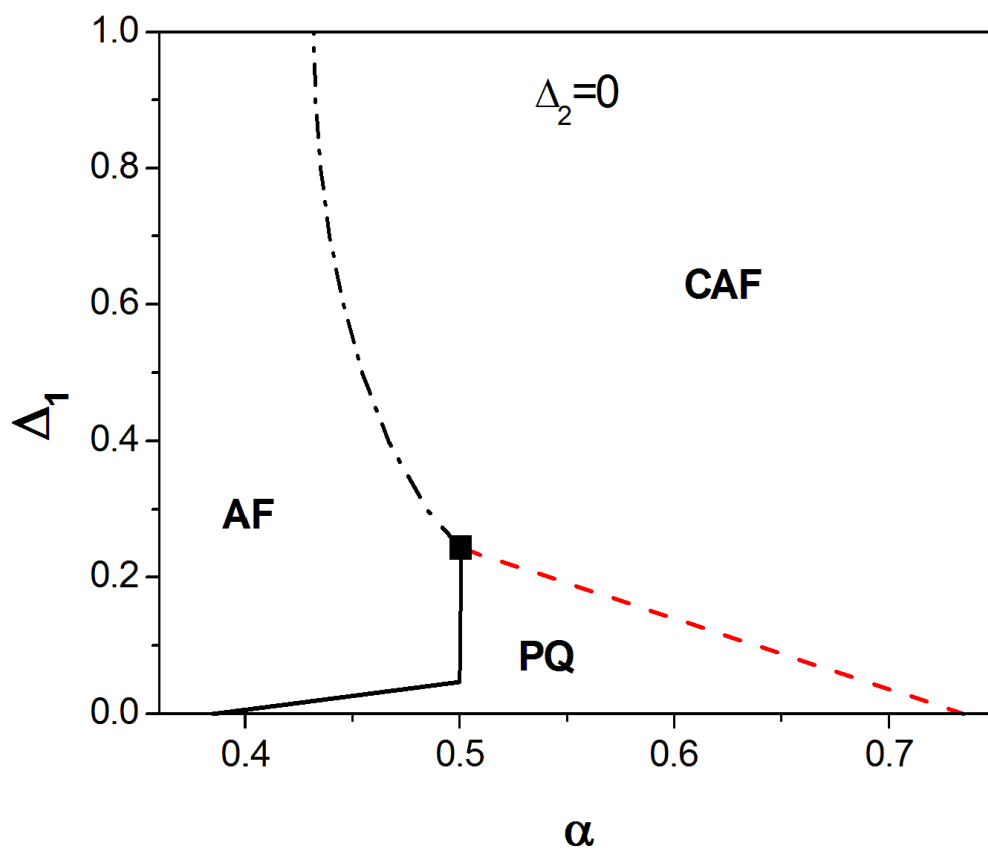


Figura 5.15. O mesmo da figura 5.4 para $\Delta_2 = 0$.

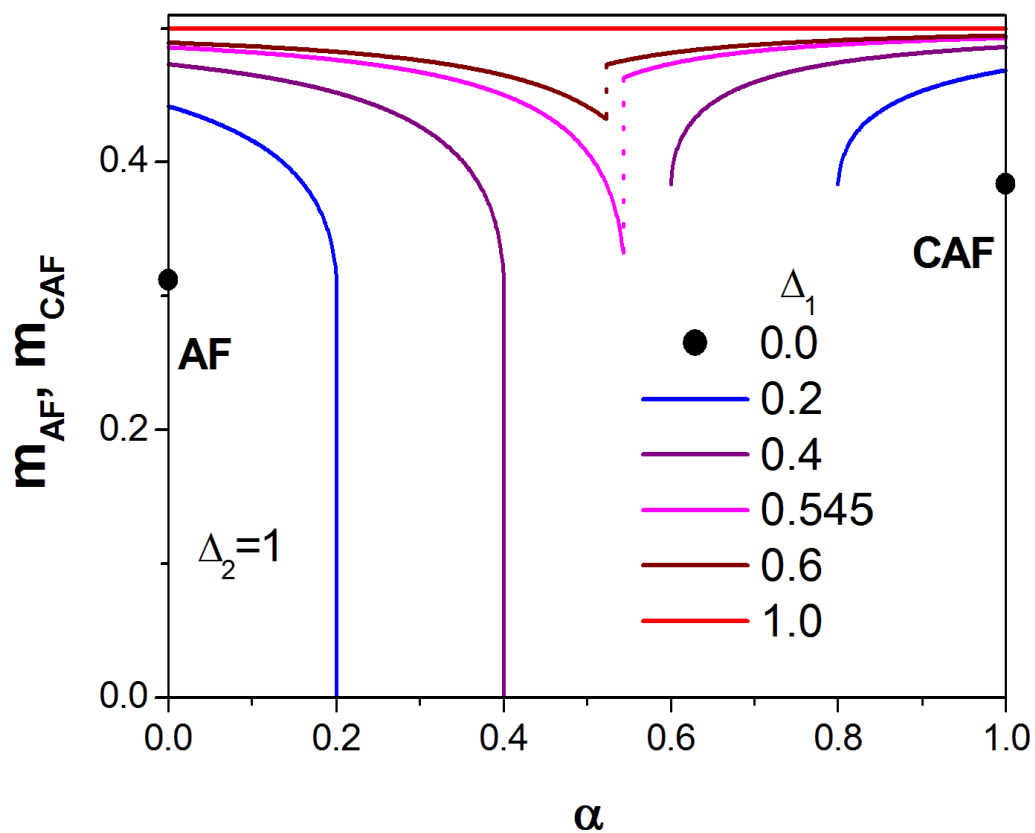


Figura 5.16. O mesmo da figura 5.3 para $\Delta_2 = 1$ e alguns valores de Δ_1 . Os círculos negros indicam que as magnetizações m_{AF} e m_{CAF} vão à zero rapidamente em função da frustração α quando $\Delta_1 = 0$. As linhas tracejadas representam transições de primeira ordem entre as fases ordenadas.

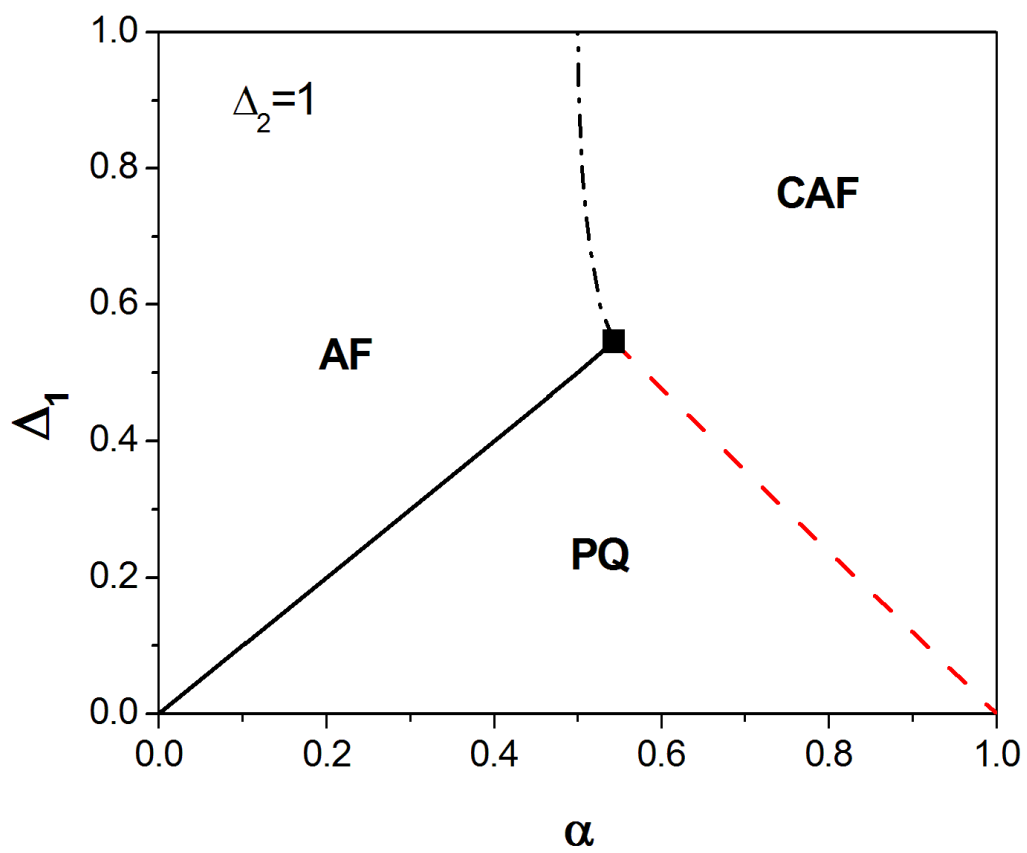


Figura 5.17. O mesmo da figura 5.4 para $\Delta_2 = 1$.

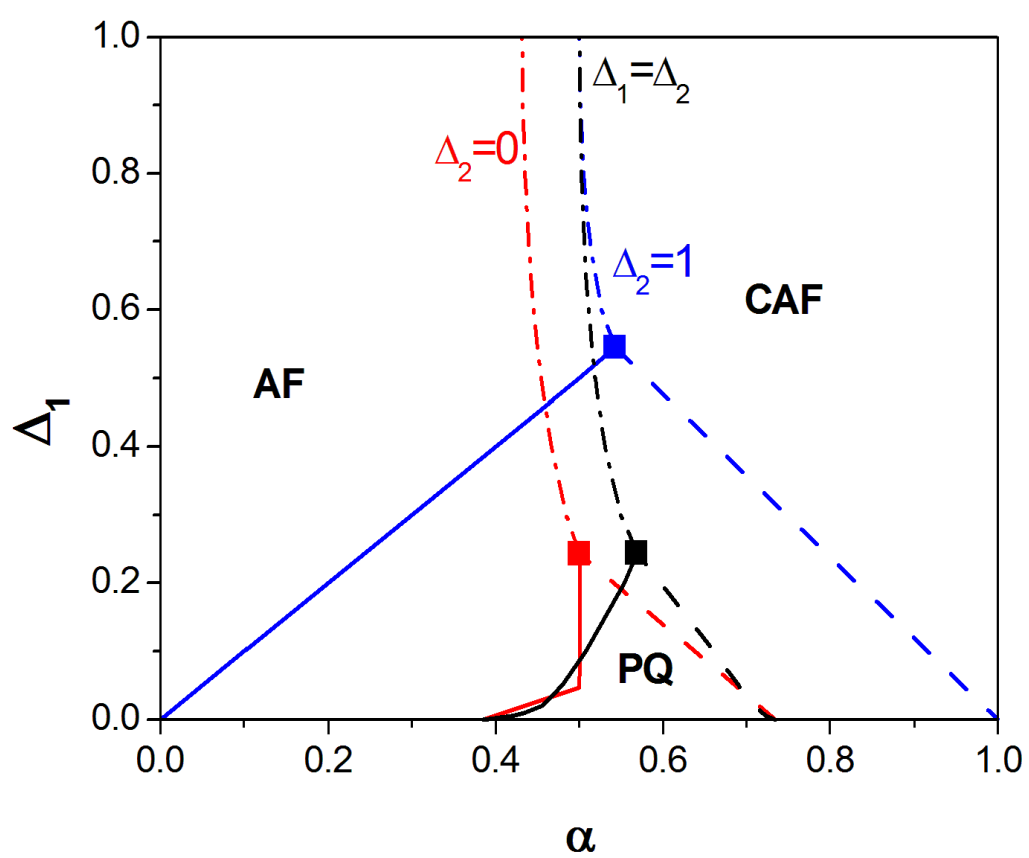


Figura 5.18. Comparação entre os diagramas de fase para $\Delta_1 = \Delta_2$, $\Delta_2 = 0$ e $\Delta_2 = 1$.

5.5 Comparação dos resultados obtidos para o modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ via método variacional e teoria de ondas de spin

O modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ foi estudado nesta tese através de dois métodos: método variacional, apresentado no capítulo 3, e teoria de ondas de spin, apresentado no presente capítulo. Aqui, vamos comparar e analisar, caso a caso, os resultados obtidos por ambas as técnicas. Para facilitar, apresentamos a tabela 5.1 que detalha de forma simples qual figura é referente a cada caso para ambos os métodos.

- **Anisotropias iguais**

O comportamento das magnetizações alternadas em função da frustração e o diagrama de fase dos dois métodos são semelhantes do ponto de vista qualitativo. Temos uma fase desordenada para $\Delta = 0$ que diminui sua extensão com o aumento da anisotropia de troca, desaparece em um determinado valor de Δ e recupera o caráter clássico do modelo em $\Delta = 1$. Pelo diagrama de fase, podemos identificar o ponto crítico terminal, sendo $(0.548, 0.432)$ e $(0.569, 0.244)$ para o método variacional e teoria de ondas de spin linear, respectivamente. Além disso, a região desordenada, prevista pelo método variacional, é notadamente maior que a obtida via ondas de spin linear. Apesar dos dois métodos concordarem quanto a ordem de todas as transições de fases, chamamos atenção para as linhas de transição de segunda ordem entre as fases antiferromagnética e desordenada, que apresentam uma suave curva no diagrama de fase via teoria de ondas de spin, enquanto pelo método variacional as respectivas linhas de transição mantem um padrão linear. Lembramos, também, que a linha de transição de primeira ordem entre as fases colinear antiferromagnética e desordenada, via teoria de ondas de spin, é apenas esquemática, enquanto com o método variacional esta linha de transição é verdadeiramente obtida sem problemas.

- **Limite unidimensional**

Analisando os diagramas de fases, notamos que o comportamento global é mantido, onde a região desordenada desaparece quando o limite unidimensional é atingido, com ponto crítico terminal na origem. No entanto, os métodos diferem na forma como o ponto crítico terminal vai à zero com $\lambda \rightarrow 0$. Por exemplo, a coordenada Δ_c do ponto crítico terminal está associado a uma função polinomial de segunda ordem e terceira ordem em λ , para o método variacional e teoria de ondas de spin linear, respectivamente.

Tabela 5.1. Guia para comparação dos resultados correspondentes obtidos pelo método variacional e teoria de ondas de spin. Designamos $m_{AF,CAF}$ para indicar os gráficos com o comportamento das magnetizações alternadas em função da frustração e DF sinaliza o diagrama de fase no plano indicado.

Caso		Método Variacional	Teoria de Ondas de Spin
$\Delta_1 = \Delta_2$	$m_{AF,CAF}$	Fig.3.6	Fig.5.3
	DF($\alpha - \Delta$)	Fig.3.7	Fig.5.4
$\lambda \rightarrow 0$	DF($\alpha - \Delta$)	Fig.3.11	Fig.5.5
	DF($\lambda - \alpha$)	Fig.3.12	Fig.5.6
$\Delta_1 = 0$	$m_{AF,CAF}$	Fig.3.13	Fig.5.7
	DF($\alpha - \Delta_2$)	Fig.3.14	Fig.5.8
$\Delta_1 = 1$	$m_{AF,CAF}$	Fig.3.15	Fig.5.9
	DF($\alpha - \Delta_2$)	Fig.3.16	Fig.5.10
$\Delta_1 = \{0, 1\}$		Fig.3.17	Fig.5.11
	DF($\alpha - \Delta_2$)	Fig.3.18	Fig.5.12
		Fig.3.19	Fig.5.13
$\Delta_2 = 0$	$m_{AF,CAF}$	Fig.3.20	Fig.5.14
	DF($\alpha - \Delta_1$)	Fig.3.21	Fig.5.15
$\Delta_2 = 1$	$m_{AF,CAF}$	Fig.3.22	Fig.5.16
	DF($\alpha - \Delta_1$)	Fig.3.23	Fig.5.17
$\Delta_2 = \{0, 1\}$	DF($\alpha - \Delta_1$)	Fig.3.24	Fig.5.18

• **Fixando Δ_1**

Para $\Delta_1 = 0$, temos o caso onde a fase desordenada aparece para todo par (α, Δ_2) , ou seja, seu diagrama de fase não possui um ponto crítico, e os dois métodos concordam quanto à isso. Entretanto, enquanto no método variacional a região antiferrmagnética diminui com o aumento de Δ_2 de forma gradativa até $\Delta_2 = 1$, via ondas de spin essa diminuição da região antiferromagnética é desproporcional para variações infinitesimais de Δ_2 , resultando em uma fase antiferromagnética completamente suprimida a partir de $\Delta_2 \geq 0.1$. Aqui, o comportamento, a princípio anômalo, da região desordenada aumentar com o aumento de Δ_2 é observado por pelas duas técnicas.

Adotando $\Delta_1 = 1$, com ambos os métodos não observamos fase desordenada, apenas uma transição de fase de primeira ordem entre as fases antiferromagnética e colinear antiferromagnética.

A questão que surge em seguida é com relação a essa mudança de comportamento quando fixamos Δ_1 nos valores limites 0 e 1. Investigando como esse processo se desenvolve, verificamos três comportamentos distintos no intervalo de valores $0 \leq \Delta_1 \leq 1$: (i) fase desordenada sem ponto crítico terminal, (ii) fase desordenada com ponto crítico terminal e (iii) finalmente sem fase desordenada. Essas três etapas foram verificadas pelas duas técnicas que usamos, e mostram claramente como o modelo reage com seus primeiros vizinhos transitando entre o limite quântico e clássico. Nas etapas (i) e (ii), observamos um aumento da fase desordenada com o aumento de Δ_2 , ou seja Δ_2 passa a se comportar em conjunto com a frustração e desordenar o sistema.

• **Fixando Δ_2**

Fazendo $\Delta_2 = 0$, analisamos o comportamento das magnetizações alternadas e observamos que apenas m_{AF} é capaz de retornar ao valor clássico no limite $\Delta_1 = 1$, enquanto isso acontece para m_{AF} e m_{CAF} no mesmo limite quando $\Delta_2 = 1$. Os dois casos são verificados pelo método variacional e teoria de ondas de spin.

Quando comparamos os diagramas de fases para esses valores fixos de Δ_2 com o caso de anisotropias iguais, chegamos ao mesmo cenário, onde a área desordenada é maior quando $\Delta_2 = 1$ do que $\Delta_2 = 0$, um resultado que, apesar de não ser esperado, é obtido pelos dois métodos e nos leva a encarar a anisotropia Δ_1 trabalhando como uma grandeza que favorece a desordem.

5.6 Conclusão

Nesse capítulo, estudamos o estado fundamental do modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ através da teoria de ondas de spin linear, onde trabalhamos seu caráter quase-unidimensional e a proposta de anisotropias de troca de forma diferenciada entre primeiros e segundos vizinhos. Com o objetivo de verificar os resultados obtidos via método variacional para este mesmo modelo, apresentados no capítulo 3, realizamos uma comparação detalhada para cada caso analisado.

Surpreendentemente, os resultados concordaram muito bem de forma qualitativa em todos os casos que estudamos. No entanto, cabe destacar que, apesar de tal concordância entre os métodos, a teoria de ondas de spin possui uma grande desvantagem em relação ao método variacional no que diz respeito ao tratamento direto da fase magneticamente desordenada. Embora isso tenha dificultado a comparação quando se tratava da região de transição de fase de primeira ordem entre as fases colinear antiferromagnética e desordenada, não afetou as transições de segunda ordem entre as fases antiferromagnética e desordenada e tão pouco a transição de primeira ordem entre as fases ordenadas. Com isso, pudemos obter o ponto crítico terminal, para determinadas condições de λ e anisotropias de troca, que nos permitiu ter uma noção esquemática de como posicionar a linha de transição entre as fases colinear antiferromagnética e desordenada, que de fato não podemos obter via teoria de ondas de spin, para seguirmos com a comparação entre os métodos.

Com os resultados obtidos através da teoria de ondas de spin, confirmamos todos os comportamentos previstos pelo método variacional. Quando as anisotropias são iguais, temos a fase desordenada acabando em um ponto crítico terminal e dando espaço à uma transição de primeira ordem entre as fases ordenadas, cuja física do processo fica muito clara, uma vez que a frustração tem o papel de destruir a ordem e as anisotropias de troca trabalham juntas deixando o sistema mais clássico seguindo no sentido $\Delta \rightarrow 1$. Exploramos o comportamento quase-unidimensional do sistema, onde o comportamento global do diagrama de fase obtido para o limite simétrico, $\lambda = 1$, desaparece completamente no limite unidimensional, resultado esse que está de acordo com o cenário físico esperado, ou seja, um sistema unidimensional não deve sustentar ordem nem mesmo em $T = 0$ [13]. Esses foram os resultados que saíram como o esperado, no entanto quando fixamos Δ_1 e Δ_2 , surgiram comportamentos que desencadearam certa dúvida. Por exemplo, para $\Delta_1 = 0$ temos a região desordenada aumentando quando $\Delta_2 \rightarrow 1$, quando esperamos que a região diminua uma vez que estamos caminhando para o cenário mais clássico do caso, e esse comportamento persiste até valores razoáveis de Δ_1 , sendo $\Delta_1 = 0.531$ e $\Delta_1 = 0.544$ para o método variacional e teoria de

ondas de spin linear, respectivamente. De forma semelhante, quando comparamos os diagramas de fases obtidos para $\Delta_2 = 0$ e $\Delta_2 = 1$ com o caso das anisotropias iguais, verificamos que a área desordenada do caso $\Delta_2 = 1$ é maior que $\Delta_2 = 0$, e mais uma vez nos deparamos com um comportamento que vai contra o que esperávamos. Uma vez que esses resultados foram obtidos via as duas técnicas que estudamos, podemos dizer que esses resultados sugerem que quando as anisotropias de troca Δ_1 e Δ_2 são tratadas de forma diferente, estas passam a atuar como ingredientes para desordem e deixam de ter o simples papel de restaurar o caráter clássico do modelo.

Portanto, o estudo do modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ via teoria de ondas de spin se mostrou uma ferramenta importante para na análise dos comportamentos que não eram esperados encontrados com o método variacional e que puderam ser confirmados neste capítulo, nos permitindo uma estudo detalhado do modelo e uma novo ponto de vista do papel desempenhado pelas anisotropias de trocas.

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas

O foco desta tese foi estudar transições de fase quânticas em sistemas de baixa dimensionalidade. Em suma, exploramos o modelo de Heisenberg anisotrópico e frustrado em uma rede quadrada, também conhecido como $J_1 - J'_1 - J_2$, pelo método variacional, proposto na referência [42] e via teoria de ondas de spin linear [68]. Algumas vertentes deste modelo foram estudadas, como o caso quase-unidimensional para spin-1/2 com e sem frustração, além da adição de anisotropias de exchange e o caso considerando spin inteiro $S=1$.

No capítulo 1, apresentamos uma breve introdução sobre transição de fase térmica e quântica, diferenciando-as, assim como conceitos básicos sobre sistemas de baixa dimensionalidade, frustração e a fase desordenada, que serviram de alicerce para o desenvolvimento desta tese.

No capítulo 2, mostramos os aspectos experimentais e teóricos do modelo de Heisenberg quase-unidimensional com spin-1/2 e destacamos o problema de determinar o valor crítico λ_c (com $\lambda = J'_1/J_1$), onde o sistema deve sofrer uma transição de fase do tipo ordem-desordem. Estudamos as fases antiferromagnética e colinear antiferromagnética, esta última obtida fazendo $\lambda < 0$. Neste capítulo, apresentamos ao leitor o método variacional de forma direta como uma aplicação neste modelo, desenvolvendo o estado fundamental baseado em um estado tentativa de forma variacional. Com isso, obtivemos o comportamento da magnetização alternada para cada fase em função da competição λ e encontramos $\lambda_c = 0$, que é um resultado mais plausível fisicamente, uma vez que o sistema de spin-1/2 em uma dimensão deve ser *gapless*[67]. Este resultado mostra certa superioridade do método variacional frente a teoria de ondas de spin, que encontra um valor crítico não nulo. Este trabalho deu origem a publicação [44], na revista *Physical Review E* com o título *Order-disorder quantum phase transition in the quase-one-dimensional spin-1/2 collinear antiferromagnetic Heisenberg model*.

No capítulo 3, com o método variacional, estudamos o modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ para spin-1/2 considerando todas as suas interações e adicionamos as anisotropias de troca Δ_1 e Δ_2 , onde os índices 1 e 2 referem-se a posição dessas anisotropias dentro do Hamiltoniano de primeiros e segundos vizinhos, respectivamente. Uma introdução do modelo frustrada foi apresentada, onde destacamos principalmente a questão em aberto sobre a existência ou não de uma fase desordenada neste modelo. Analisamos os magnetizações alternadas e as energias das fases antiferromagnética, colinear antiferromagnética e paramagnética quântica, ou fase desordenada. Inicialmente, isso foi feito considerando-se as anisotropias de troca iguais e um diagrama de fase foi gerado, mostrando que existe uma fase magneticamente desordenada entre as fases ordenadas apresentando um ponto crítico terminal que separa as três fases. Antes de diferenciarmos as anisotropias de troca investigamos o efeito de $\lambda = J'_1/J_1$ sobre o diagrama de fases. Encontramos que a forma global do diagrama de fase não é afetada quando diminuimos λ e caminhamos no sentido do caso unidimensional, ou seja, preservando as duas fases ordenadas, a fase desordenada e um ponto crítico terminal que vai à zero quando o limite unidimensional é atingido $\lambda = 0$. Assim, conseguimos descrever o comportamento físico correto neste limite, pois não temos ordem de longo alcance nem mesmo em $T = 0$. Com base nesse resultado, partimos para o estudo com as anisotropias de troca diferenciadas analisando apenas o caso simétrico $\lambda = 1$. E para todos os casos onde consideramos as anisotropias de troca diferentes, nos deparamos com resultados que não eram esperados fisicamente. Por exemplo, fixando $\Delta_1 = 0$ temos a uma fase desordenada sem um ponto crítico terminal, ou seja sem fim, o que é compreensível uma vez que a anisotropia de troca de primeiros vizinhos está no seu limite quântico. O que não é esperado é o comportamento da região desordenada aumentar com o aumento da anisotropia Δ_2 , quando na verdade esperamos que por mais que o aumento de Δ_2 não seja capaz de eliminar a fase desordenada, deve pelo menos diminuir sua região, o que demonstraria uma tendência do modelo em restaurar o comportamento clássico (o que não foi verificado). Notamos que esse comportamento se estende para todo valor fixo de Δ_1 . Fixando Δ_2 , temos diagramas de fases semelhantes ao caso onde as anisotropias são iguais, ou seja, com as fases ordenadas, a desordenada e o ponto crítico terminal. Porém, quando comparamos estes diagramas nos deparamos com mais um comportamento não esperado. Observamos que, para $\Delta_2 = 0$ ($\Delta_2 = 1$) a região desordenada é menor (maior) em comparação com caso $\Delta_1 = \Delta_2$. Quando esperamos o contrário, pois $\Delta_2 = 0$ em tese deixa o sistema mais quântico do que quando as anisotropias são iguais e, portanto, deveria ter uma fase desordenada maior e não menor. A mesma lógica se aplica quando $\Delta_2 = 1$, que deveria deixar o sistema mais próximo do comportamento clássico. É claro, precisamos de um outro método para verificar ou não esses compor-

tamentos anômalos. Se verificados, estes resultados apontam para uma anisotropia de troca que, quando considerada diferente para primeiros e segundos vizinhos, deixa de funcionar como um ajuste do Hamiltoniano entre Heisenberg isotrópico e Ising, e passa a ser ingrediente de desordem, assim como a frustração. Verificamos que o método variacional é capaz de nos fornecer, pelo cálculo das correlações, o grau de dimerização em cada fase, inclusive na fase desordenada, mostrando que a fase desordenada possui um grau de dimerização maior, ou seja, maior formação de dímeros em comparação com as fases ordenadas, como deve ser[58]. Obtivemos o comportamento da dimerização em função da anisotropia de troca e esse resultado corresponde a uma extensão dos obtidos por Oliveira na referência base deste trabalho[42]. Por fim, obtivemos a generalização dos resultados obtidos no capítulo 2, ou seja sem frustração, que mostra o comportamento clássico sendo restabelecido em função do aumento da anisotropia de troca. Este trabalho encontra-se submetido na revista *Physical Review E* com o título: *On the phase diagram of the spin-1/2 $J_1 - J'_1 - J_2$ frustrated anisotropic exchange Heisenberg antiferromagnetic model*

No capítulo 4, temos a primeira aplicação do método variacional em um sistema de spin inteiro. O modelo é o mesmo estudado no capítulo 3, porém sem as anisotropias de troca. Uma breve introdução sobre esse modelo com spin-1 é realizada, evidenciando a questão da existência da fase desordenada para o presente caso. Analisamos as magnetizações alternadas e as energias das fases ordenadas e desordenada. Como resultado obtemos um diagrama de fases sem a fase desordenada e com uma transição de fase de primeira ordem entre as fases antiferromagnética e colinear antiferromagnética. Nossos resultados concordam com os obtidos via método do aglomerado acoplado (CCM-*Coupled Cluster Method*), deixando claro que o método variacional também funciona muito bem para sistemas de spin inteiro. O trabalho desenvolvido neste capítulo para spin-1 encontra-se finalizado e em processo de redação e consequente submissão.

No capítulo 5, apresentamos alguns aspectos básicos sobre a teoria de ondas de spin e desenvolvemos todo o mecanismos da teoria para aplicá-la no modelo $J_1 - J'_1 - J_2$, no mesmo molde do capítulo 3, com o objetivo de investigar os comportamentos anômalos obtidos com o método variacional. O que encontramos foi um cenário que concorda qualitativamente em todos os pontos estudados com o método variacional, com relação a existência da fase desordenada, com a variação de λ , com a ordem das transições e inclusive com os resultados não esperados de antes, quando tratamos as anisotropias de troca de forma diferente para primeiros e segundos vizinhos. Com isso, confirmamos o que o método variacional previu: as anisotropias de troca, quando diferenciadas entre primeiros e segundos vizinhos, funcionam como um agente que favorece a desordem. Assim, o sistema perde a ordem de longo alcance para valores

cada vez menores de frustração, no caso da transição entre as fases antiferromagnética e desordenada, e valores cada vez maiores de frustração, quando a transição acontece entre as fases colinear antiferromagnética e desordenada.

Os problemas abordados nesta tese não são triviais e, de modo geral, podemos dizer que o método variacional mostrou-se robusto o suficiente para tratar sistemas frustrados com spins semi-inteiros e inteiros. O ponto fraco é que qualquer tentativa de melhorar a precisão quantitativa implica em aumentar o número de spins por plaqueta, o que consequentemente aumenta o trabalho analítico e numérico de forma significativa. Portanto, com o método variacional apresentamos resultados novos e interessantes, que concordam com métodos conhecidos como a teoria de ondas de spin linear-LSWT e o método de aglomerado acoplado-CCM, apontando para o cenário mais realístico dos modelos tratados, estabelecendo-se então como uma técnica alternativa para estudar transições de fase quânticas.

Por fim, apresentamos algumas propostas para trabalhos futuros.

- Uma forma de dar continuidade ao capítulo 3 é efetuar o estudo do modelo de Heisenberg antiferromagnético frustrado adicionando campo magnético ao sistema, e analisar os valores de saturação do campo em função da frustração.
- Como discutino no capítulo 4, estudamos apenas a região de interações de troca intensas devido ao foco do trabalho que era procurar a fase desordenada. Então, faltou uma análise quase-unidimensional para o caso com spin-1. Este com certeza é mais um desafio para o método variacional que deverá descrever uma fase desordenada magneticamente mais complexa, a fase de Haldane, o estado fundamental no limite unidimensional deste modelo para spin-1. Adicionar anisotropias de troca e íon-único também configuram como trabalhos futuros para completar a descrição para o spin-1.
- Nos capítulos 3 e 4, tratamos as fases ordenadas com spins inteiros e semi-inteiros. Isso indica que um trabalho viável é investigar o ordenamento ferrimagnético, ou seja, considerando spins diferentes no mesmo modelo.
- Um modelo muito interessante, que pode ser tratado através de ondas de spin, é $J_1 - J'_1 - J_2$ porém com J_2 ao longo da cadeia ao invés da diagonal, como tratado no capítulo 5. Não vamos trabalhar esse modelo com o método variacional, pois, como verificamos, o número de estados possíveis para montar a energia do estado fundamental variacional o torna intratável.
- O método aproximação de pares foi outra técnica com o qual trabalhamos[75]. Dois trabalhos foram estudados. O primeiro consiste em usar pares correlaciona-

dos ao longo de todas as interações de troca consideradas no modelo $J_1 - J'_1 - J_2$. O segundo propunha usar o número limite de pares com a expansão em altas temperaturas do modelo de Heisenberg, ao invés do modelo de Ising. Fica como proposta retornar à esses estudos a fim de entender se são viáveis ou não.

Referências Bibliográficas

- [1] S. Sachdev, “Quantum phase transitions,” *Cambridge, Univ. Press, New Yourk*, 1999.
- [2] Hosono, H., Tanabe, K., Takayama-Muromachi, E., Kageyama, H., Yamanaka, S., Kumakura, H., Nohara, M., Hiramatsu, H. and S. Fujitsu, “Exploration of new superconductors and functional materials, and fabrication of superconducting tapes and wires of iron pnictides,” *Science and Technology of Advanced Materials*, vol. **16**, no. 3, p. 033503, 2015.
- [3] H. v. Lönghnysen, “Non-Fermi-liquid behaviour in the heavy-fermion system $\text{CeCu}_{6-x}\text{Au}_x$,” *J. Phys. Condens. Matter*, vol. **8**, pp. 9689–9706, 1996.
- [4] M. A. Continentino, “Quantum Scaling in Many-Body Systems,” *Ed. World Scientific*, 2001.
- [5] M. E. Fisher, “Critical Phenomena,” *Editora Springer-Verlag*, 1982.
- [6] J. Cardy *et al*, “Scaling and Renormalization in Statistical Physics (Cambridge Lecture Notes in Physics),” *Cambridge University Press*, 1996.
- [7] B.-J. Yang, “ Quantum criticality of topological phase transitions in three-dimensional interacting electronic systems,” *Nature Physics*, vol. **8**, pp. 1745–2473, 2014.
- [8] L. J. M. P. Papon, P., “The Physics of Phase Transitions: Concepts and Applications,” *Springer*, 2006.
- [9] H. E. Stanley, “Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena,” *Oxford University Press*, 1971.
- [10] H. T. Diep, “Frustrated Spin systems,” *World Scientific*, 2004.

- [11] A. Auerbach, “Interacting Electrons and Quantum Magnetism (Graduate Texts in Contemporary Physics),” *Springer-Verlag*, 1994.
- [12] F. Mila, “Quantum spin liquids,” *Eur. J. Phys.*, vol. **21**, pp. 499–510, 2000.
- [13] N. D. Mermin and H. Wagner, “Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic heisenberg models,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **17**, pp. 1133–1136, 1966.
- [14] E. Dagotto, “Correlated electrons in high-temperature superconductors,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. **66**, p. 763, 1994.
- [15] S. Sachdev, “Quantum Criticality: competing ground states in low dimensions,” *Science*, vol. **288**, p. 475, 2000.
- [16] I. Bose, “Low-dimensional quantum spin systems,” *eprint arXiv:cond-mat/0011262*, 2000.
- [17] A. Katanin and V. Irkhin, “Magnetic order and spin fluctuations in low-dimensional insulating systems,” *Physics-Uspekhi*, vol. **50**, no. 6, pp. 613–635, 2007.
- [18] W. Heisenberg, “Zur theorie des ferromagnetismus,” *Zeitschrift für Physik*, vol. **49**, no. 9-10, pp. 619–636, 1928.
- [19] H. Bethe, “Zur theorie der metalle,” *Zeitschrift für Physik*, vol. **71**, no. 3-4, pp. 205–226, 1931.
- [20] R. Chaudhury and S. K. Paul, “Topological excitations in quantum spin systems,” *Advances in Condensed Matter Physics*, pp. 1 – 8, 2013.
- [21] T. Jolicoeur and J. C. Le Guillou, “Spin-wave results for the triangular heisenberg antiferromagnet,” *Phys. Rev. B*, vol. **40**, no. 4, p. 2727, 1989.
- [22] C. Zeng and V. Elser, “Quantum dimer calculation on the spin- $\frac{1}{2}$ kagomé heisenberg antiferromagnet,” *Phys. Rev. B*, vol. **51**, no. 13, p. 8318, 1995.
- [23] P. W. Anderson, “Resonating valence bonds: A new kind of insulator?,” *Mater. Res. Bull.*, vol. **8**, no. 2, 1973.
- [24] P. Bailleul, S., Svoronos, D. and Tomas, A. C. R. Acad.Sci. Paris Sér. II, vol. **313**, p. 1149, 1991.

- [25] Carlin, R. L., Burriel, R., Palacio, F., Carlin, R. A., Keij, S. F. and Carnegie, D. W., “Linear chain antiferromagnetic interactions in Cs_2CuCl_4 ,” *J. Appl. Phys.*, vol. **57**, no. 8, p. 3351, 1985.
- [26] Oleg, A. Starykh, Hosho Katsura and L. Balents, “Extreme sensitivity of a frustrated quantum magnet: Cs_2CuCl_4 ,” *Phys. Rev. B*, vol. **82**, no. 1, p. 014421, 2010.
- [27] Foyevtsova, K., Opahle, I., Zhang, Y. Z., Jeschke, H. O. and R. Valenti, “Determination of effective microscopic models for the frustrated antiferromagnets Cs_2CuCl_4 and Cs_2CuBr_4 by density functional methods,” *Phys. Rev. B*, vol. **83**, no. 12, p. 125126, 2011.
- [28] T. Sakai and M. Takahashi, “The ground state of quasi-one-dimensional heisenberg antiferromagnets,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. **58**, no. 9, pp. 3131–3142, 1989.
- [29] D. Ihle, C. Schindelin, A. Weiße, and H. Fehske, “Magnetic order-disorder transition in the two-dimensional spatially anisotropic heisenberg model at zero temperature,” *Phys. Rev. B*, vol. 60, pp. 9240–9243, 1999.
- [30] A. W. Sandvik, “Multichain mean-field theory of quasi-one-dimensional quantum spin systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **83**, pp. 3069–3072, 1999.
- [31] H. Rosner, H. Eschrig, R. Hayn, S.-L. Drechsler, and J. Málek, “Electronic structure and magnetic properties of the linear chain cuprates p. bailleul, s., svoronos, d. and tomas Sr_2CuO_3 and Ca_2CuO_3 ,” *Phys. Rev. B*, vol. **56**, pp. 3402–3412, 1997.
- [32] I. Affeck, M. P. Gelfand, and R. R. P. Singh, “A plane of weakly coupled heisenberg chains: theoretical arguments and numerical calculations,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. **27**, no. 22, p. 7313, 1994.
- [33] B. Xi, S. Hu, J. Zhao, G. Su, B. Normand, and X. Wang, “Low-energy properties of anisotropic two-dimensional spin- $\frac{1}{2}$ heisenberg models in staggered magnetic fields,” *Phys. Rev. B*, vol. **84**, p. 134407, 2011.
- [34] H. J. Schulz, “Dynamics of coupled quantum spin chains,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **77**, pp. 2790–2793, 1996.
- [35] E. Manousakis, “The spin- $\frac{1}{2}$ heisenberg antiferromagnet on a square lattice and its application to the cuprous oxides,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. **63**, pp. 1–62, 1991.

- [36] L. Faddeev and L. Takhtajan, “What is the spin of a spin wave?,” *Physics Letters A*, vol. **85**, pp. 375–377, 1981.
- [37] Castro Neto, A. H. and Hone, D., “Doped planar quantum antiferromagnets with striped phases,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **76**, p. 2165, 1996.
- [38] Parola, A., Sorella, S. and Zhong, Q. F., “Realization of a spin liquid in a two dimensional quantum antiferromagnet,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **71**, p. 4393, 1993.
- [39] M. Azzouz, “Interchain-coupling effect on the one-dimensional spin- $\frac{1}{2}$ antiferromagnetic heisenberg model,” *Phys. Rev. B*, vol. **48**, pp. 6136–6140, 1993.
- [40] R. Zinke, J. Schulenburg, and J. Richter, “Ground-state long-range order in quasi-one-dimensional heisenberg quantum antiferromagnets: high-order coupled-cluster calculations,” *The European Physical Journal B*, vol. **61**, pp. 147–152, 2008.
- [41] M. Grover, “Renormalization group for spatial anisotropy,” *Physics Letters A*, vol. **44**, p. 253, 1973.
- [42] M. J. de Oliveira, “Phase diagram of the spin- $\frac{1}{2}$ heisenberg antiferromagnet on a square lattice with nearest- and next-nearest-neighbor couplings,” *Phys. Rev. B*, vol. **43**, no. 7, pp. 6181–6183, 1991.
- [43] D. Dmitriev and V. Krivnov, “Quasi-one-dimensional anisotropic heisenberg model in a transverse magnetic field,” *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, vol. **80**, pp. 303–307, 2004.
- [44] Rufo, S., Griffith, M., Plascak, J. and de Sousa, R., “Order-disorder quantum phase transition in the quasi-one-dimensional spin- $\frac{1}{2}$ collinear antiferromagnetic heisenberg model,” *Phys. Rev. E*, vol. **88**, p. 34101, 2013.
- [45] Schollwöck, U., Richter, J., Farnell, D. J. J. and Bishop, R. F., “Quantum magnetism,” *Lecture Notes in Physics*, vol. **61**, no. 645, 2004.
- [46] J. B. Parkinson and D. J. J. Farnell, *An Introduction to Quantum Spin Systems*, vol. **61**. Springer-Verlag, Berlin, 2010.
- [47] J. D. Reger and A. P. Young, “Monte carlo simulations of the spin- $\frac{1}{2}$ heisenberg antiferromagnetic on a square lattice,” *Phys. Rev. B*, vol. **37**, no. 5978, 1988.
- [48] P. Chandra and B. Doucot, “Possible spin-liquid state at large s for the frustrated square heisenberg lattice,” *Phys. Rev. B*, vol. **38**, no. 9335, 1988.

- [49] A. V. Dotsenko and O. P. Sushkov, “Quantum phase transition in the frustrated heisenberg antiferromagnet,” *Phys.Rev.B*, vol. **50**, no. 13821, 1994.
- [50] Darradi, R., Derzhko, O., Zinke, R., Schulenburg, J., Krüger, S. E. and Richter, J., “Ground state phases of the spin- $\frac{1}{2}$ j1-j2 heisenberg antiferromagnet on the square lattice: A high-order coupled cluster treatment,” *Phys.Rev.B*, vol. **78**, p. 214415, 2008.
- [51] O. G. Isaev, L. and J. Dukelsky, “Hierarchical mean-field approach to the j1-j2 heisenberg model on a square lattice,” *Phys.Rev.B*, vol. **79**, p. 024409, 2009.
- [52] Schulz, H. J., Ziman, T. A. L. and Poilblanc, D., “Magnetic order and disorder in the frustrated quantum heisenberg antiferromagnet in two dimensions,” *J. Phys. I*, vol. **6**, p. 675, 1996.
- [53] O. J. Sushkov, O. P. and Z. Weihong, “Quantum phase transitions in the two-dimensional J_1 - J_2 model,” *Phys. Rev. B*, vol. **63**, p. 104420, 2001.
- [54] E. Dagotto and A. Moreo, “Phase diagram of the frustrated spin- $\frac{1}{2}$ heisenberg antiferromagnet in two dimensions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **63**, p. 2148, 1989.
- [55] Dai, J., Si, Q., Zhu, J. X. and Abrahams, E., “Iron pnictides as a new setting for quantum criticality,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, vol. **106**, p. 4118, 2009.
- [56] Sirker, J., Weihong, Z., Sushkov, O. P. and Oitmaa, J., “ J_1 - j_2 model: First-order phase transition versus deconfinement of spinons,” *Phys. Rev. B*, vol. **73**, p. 184420, 2006.
- [57] Singh, R. R. P., Weihong, Z., Hamer, C. J. and Oitmaa, J., “Dimer order with striped correlations in the J_1 - J_2 heisenberg model,” *Phys. Rev. B*, vol. **60**, p. 7278, 1999.
- [58] Gelfand, M. P., Singh, R. R. P. and Huse, D. A., “Zero-temperature ordering in two-dimensional frustrated quantum heisenberg antiferromagnets,” *Phys. Rev. B*, vol. **40**, p. 10801, 1989.
- [59] Darradi, R., Richter, J. and Krüger, S. E., “Influence of ising-anisotropy on the zero-temperature phase transition in the square lattice spin- $\frac{1}{2}$ J - J' model,” *J. Phys.: Condens. Matter*, vol. **16**, p. 2681, 2004.
- [60] Darradi, R., Richter, J. and Farnell, D. J. J., “Influence of the spin quantum number s on the zero-temperature phase transition in the square-lattice J - J' model,” *J. Phys.: Condens. Matter*, vol. **17**, p. 341, 2004.

- [61] Bishop, R. F. and Li, P. H. Y., “A frustrated quantum spin- s model on the union jack lattice with spins $s > \frac{1}{2}$,” *Eur. Phys. J. B*, vol. **81**, pp. 37–48, 2011.
- [62] Kamihara, Y., Watabe, T., Hirano, M. and Hosono, H., “Iron-based layered superconductor $\text{LaO}_{(1-x)}\text{F}_{(x)}\text{FeAs}$,” *J. Am. Chem. Soc.*, vol. **130**, p. 3296, 2008.
- [63] Ma, F., Lu, Z-Y. and Xiang, T., “Arsenic-bridged antiferromagnetic superexchange interactions in lafeaso,” *Phys. Rev. B*, vol. **78**, p. 224517, 2008.
- [64] Si, Q. and Abrahams, E., “Strong correlations and magnetic frustration in the high t_c iron pnictides,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **101**, p. 076401, 2008.
- [65] Jiang, H. C., Krüger, F., Moore, J. E., Sheng, D. N., Zaanen, J. and Weng, Z. Y., “Phase diagram of the frustrated spatially-anisotropic $S=1$ antiferromagnet on a square lattice,” *Phys. Rev. B*, vol. **79**, p. 174409, 2009.
- [66] Bishop, R. F., Li, P.H.Y., Darradi, R., Richter, J. and Campbell, C.E., “The effect of anisotropy on the ground-state magnetic ordering of the spin-1 quantum model $J_1^{XXZ}-J_2^{XXZ}$ on the square lattice,” *J. Phys.: Condens. Matter*, vol. **20**, p. 415213, 2008.
- [67] Haldane, F. D. M., “Nonlinear field theory of large-spin heisenberg antiferromagnets: Semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis nól state,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **50**, p. 1153, 1983.
- [68] Bloch, F., “Zur theorie des ferromagnetismus,” *Z. Physik*, vol. **61**, p. 206, 1930.
- [69] R. F. Sena Filho, “Teoria Microscópica de ondas de spin em Nanofios magnéticos,” *Dissertação de mestrado pela Universidade Federal do Ceará - UFC*, 2007.
- [70] Daniel, D. Stanciland Anil, Prabhakar, “Spin-Waves, Theory and Applications,” *Springer Science, Business Media-New York*, 2009.
- [71] Holstein, T. and Primakoff, H., “Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet,” *Phys. Rev.*, vol. **58**, p. 1098, 1940.
- [72] Anderson, P. W., “An approximate quantum theory of the antiferromagnetic ground state,” *Phys. Rev.*, vol. **86**, p. 694, 1952.
- [73] Kubo, R., “The spin-wave theory of antiferromagnetics,” *Phys. Rev.*, vol. **87**, p. 568, 1952.

- [74] A. Benyoussef, A., (Boubekri and Ez-Zahraouy, H., “Odd number of coupled antiferromagnetic anisotropic heisenberg planes: A linear spin wave theory,” Phys. Lett. A, vol. **238**, p. 398, 1998.
- [75] Ferreira, L. G., Salinas, S. R. and Oliveira, M. J., “On a variational procedure for obtaining the thermodynamic properties of statistical models,” Phys. Stat. Sol. B, vol. **83**, no. 13, p. 229, 1977.

Apêndice A

Equações de apoio para o capítulo 4

Conjunto de equações não lineares a partir da minimização do funcional $\delta\mathcal{F} = 0$ para a energia Eq.(4.8), referente ao modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ antiferromagnético spin $S = 1$ desenvolvido via método variacional no capítulo 4, que são dadas por

$$\frac{\sqrt{2}}{2}[\alpha(z_1 + z_2) + \lambda(y_1 + y_2) + (x_1 + x_2)] = 2\eta x_0$$

$$(\gamma_1 + 4\xi_1 u^2)x + 2\xi_1(x_1 u_1 - x_2 u_2 + y_1 v_1 - y_2 v_2)u + \frac{\lambda}{2}(y_1 + y_2) + \frac{1}{2}(x_1 + x_2) = 2\eta x$$

$$(\gamma_3 + 4\xi_3 v^2)y + 2\xi_3(y_1 v_1 + y_2 v_2 + z_1 w_1 + z_2 w_2)v + \frac{\alpha}{2}(z_1 + z_2) + \frac{\lambda}{2}(y_1 + y_2) = 2\eta y$$

$$(\gamma_2 + 4\xi_2 w^2)z + 2\xi_2(-x_1 u_1 - x_2 u_2 - z_1 w_1 + z_2 w_2)w + \frac{\alpha}{2}(z_1 + z_2) + \frac{1}{2}(x_1 + x_2) = 2\eta z$$

$$-\left(\frac{1}{2} + 2u_1^2\right)x_1 + [2(\xi_1 x u - \xi_2 z w + \beta_1 x_2 u_2) + \xi_1(y_1 v_1 - y_2 v_2) + \xi_2(z_1 w_1 - z_2 w_2)]u_1 + \frac{1}{2}[\alpha(y_1 + y_2) + \lambda(z_1 + z_2) + (x + z)] + \frac{\sqrt{2}}{2}x_0 = 2\eta x_1$$

$$-\left(\frac{1}{2} + 2u_2^2\right)x_2 + [2(-\xi_1 x u - \xi_2 z w + \beta_1 x_1 u_1) + \xi_1(y_2 v_2 + y_1 v_1) + \xi_2(z_1 w_1 - z_2 w_2)]u_2 + \frac{1}{2}[\alpha(y_1 + y_2) + \lambda(z_1 + z_2) + (x + z)] + \frac{\sqrt{2}}{2}x_0 = 2\eta x_2$$

$$-\lambda\left(\frac{1}{2} + 2v_1^2\right)y_1 + [2(\xi_1 x u - \xi_3 y v + \beta_2 y_2 v_2) + \xi_1(x_1 u_1 - x_2 u_2) + \xi_3(z_1 w_1 + z_2 w_2)]v_1 + \frac{1}{2}[\alpha(x_1 + x_2) + \lambda(x + y) + (z_1 + z_2)] + \frac{\lambda\sqrt{2}}{2}x_0 = 2\eta y_1$$

$$-\lambda\left(\frac{1}{2} + 2v_2^2\right)y_2 + [2(-\xi_1 x u + \xi_3 y v + \beta_2 y_1 v_1) + \xi_1(x_2 u_2 - x_1 u_1) + \xi_3(z_1 w_1 + z_2 w_2)]v_2 + \frac{1}{2}[\alpha(x_1 + x_2) + \lambda(x + y) + (z_1 + z_2)] + \frac{\lambda\sqrt{2}}{2}x_0 = 2\eta y_2$$

$$\begin{aligned}
& -\alpha\left(\frac{1}{2} + 2w_1^2\right)z_1 + [2(\xi_3yv - \xi_2zw + \beta_3z_2w_2) + \xi_2(x_1u_1 + x_2u_2) + \xi_3(y_1v_1 + y_2v_2)]w_1 + \\
& \quad \frac{1}{2}[\alpha(y + z) + \lambda(x_1 + x_2) + (y_1 + y_2)] + \frac{\alpha\sqrt{2}}{2}x_0 = 2\eta z_1 \\
& -\alpha\left(\frac{1}{2} + 2w_2^2\right)z_2 + [2(\xi_3yv + \xi_2zw + \beta_3z_1w_1) - \xi_2(x_1u_1 + x_2u_2) + \xi_3(y_1v_1 + y_2v_2)]w_2 + \\
& \quad \frac{1}{2}[\alpha(y + z) + \lambda(x_1 + x_2) + (y_1 + y_2)] + \frac{\alpha\sqrt{2}}{2}x_0 = 2\eta z_2 \\
& (\gamma_1 + 4\xi_1x^2)u + 2\xi_1(x_1u_1 - x_2u_2 + y_1v_1 - y_2v_2)x + \frac{\lambda}{2}(v_1 - v_2) + \frac{1}{2}(u_1 - u_2) = 2\eta u \\
& (\gamma_3 + 4\xi_3y^2)v + 2\xi_3(y_1v_1 + y_2v_2 + z_1w_1 + z_2w_2)y + \frac{\alpha}{2}(w_1 + w_2) + \frac{\lambda}{2}(v_1 + v_2) = 2\eta v \\
& (\gamma_2 + 4\xi_2z^2)w + 2\xi_2(-x_1u_1 - x_2u_2 - z_1w_1 + z_2w_2)z + \frac{\alpha}{2}(w_2 - w_1) - \frac{1}{2}(u_1 + u_2) = 2\eta w \\
& -\left(\frac{1}{2} + 2x_1^2\right)u_1 + [2(\xi_1xu - \xi_2zw + \beta_1x_2u_2) + \xi_1(y_1v_1 - y_2v_2) + \xi_2(z_1w_1 - z_2w_2)]x_1 + \\
& \quad \frac{1}{2}[\alpha(v_1 - v_2) + \lambda(w_1 - w_2) - (u + w)] + = 2\eta u_1 \\
& -\left(\frac{1}{2} + 2x_2^2\right)u_2 + [2(-\xi_1xu - \xi_2zw + \beta_1x_1u_1) + \xi_1(y_2v_2 + y_1v_1) + \xi_2(z_1w_1 - z_2w_2)]x_2 + \\
& \quad \frac{1}{2}[\alpha(v_2 - v_1) + \lambda(w_1 - w_2) - (u + w)] + = 2\eta u_2 \\
& -\lambda\left(\frac{1}{2} + 2y_1^2\right)v_1 + [2(\xi_1xu - \xi_3yv + \beta_2y_2v_2) + \xi_1(x_1u_1 - x_2u_2) + \xi_3(z_1w_1 + z_2w_2)]y_1 + \\
& \quad \frac{1}{2}[\alpha(u_1 - u_2) + \lambda(u + v) + (w_1 + w_2)] + = 2\eta v_1 \\
& -\lambda\left(\frac{1}{2} + 2y_2^2\right)v_2 + [2(-\xi_1xu + \xi_3yv + \beta_2y_1v_1) + \xi_1(x_2u_2 - x_1u_1) + \xi_3(z_1w_1 + z_2w_2)]y_2 + \\
& \quad \frac{1}{2}[\alpha(u_2 - u_1) + \lambda(v - u) + (w_1 + w_2)] + = 2\eta v_2 \\
& -\alpha\left(\frac{1}{2} + 2z_1^2\right)w_1 + [2(\xi_3yv - \xi_2zw + \beta_3z_2w_2) + \xi_2(x_1u_1 + x_2u_2) + \xi_3(y_1v_1 + y_2v_2)]z_1 + \\
& \quad \frac{1}{2}[\alpha(v - w) + \lambda(u_1 + u_2) + (v_1 + v_2)] + = 2\eta w_1 \\
& -\alpha\left(\frac{1}{2} + 2z_2^2\right)w_2 + [2(\xi_3yv + \xi_2zw + \beta_3z_1w_1) - \xi_2(x_1u_1 + x_2u_2) + \xi_3(y_1v_1 + y_2v_2)]z_2 + \\
& \quad \frac{1}{2}[\alpha(v + w) - \lambda(u_1 + u_2) + (v_1 + v_2)] + = 2\eta w_2
\end{aligned} \tag{A.1}$$

onde η é o multiplicador de Lagrange e

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi_1 = 3\alpha - \lambda - 1 \\ \xi_2 = -3\alpha + \lambda - 1 \\ \xi_3 = -3\alpha - \lambda + 1 \end{array} \right. , \quad \left\{ \begin{array}{l} \gamma_1 = \alpha - \lambda - 1 \\ \gamma_2 = -\alpha + \lambda - 1 \\ \gamma_3 = -\alpha - \lambda + 1 \end{array} \right. , \quad \left\{ \begin{array}{l} \xi_1 = -3\alpha + \lambda \\ \xi_2 = -3\alpha + 1 \\ \xi_3 = -\lambda + 1 \end{array} \right. , \tag{A.2}$$