

Sistemas Antiferromagnéticos Unidimensionais de Spin-1

Mariana Malard Sales

Mariana Malard Sales

Orientador: Prof. Antônio Sérgio Teixeira Pires

Sistemas Antiferromagnéticos Unidimensionais de Spin-1

Tese apresentada ao Curso de Doutorado em Física da
Universidade Federal de Minas Gerais como requisito
parcial para obtenção do grau de Doutor em Física.

Belo Horizonte
Departamento de Física da UFMG
Junho de 2007

Agradecimentos

- Ao Prof. Antônio Sérgio pela orientação liberal que conduziu este doutorado sem imposições, respeitando meus métodos de trabalho. Obrigada por me ensinar Física e pela amizade.
- À Profa. Maria Elizabeth Gouvêa pelas úteis discussões. Em particular, pela orientação no desenvolvimento da parte numérica do Modelo de Heisenberg acoplado com fônons e por ter nos cedido alguns de seus próprios resultados numéricos para utilização naquele trabalho;
- Aos Profs. Ronald Dickman e Maria Carolina Nemes pela colaboração e confiança no trabalho sobre o Modelo Sigma não Linear acoplado com um ruído;
- Ao Prof. Marcos Donizeti Sampaio pela ajuda na parte numérica do mesmo trabalho;
- Ao Prof. Ricardo Schor pela sua importância na minha formação acadêmica;
- Aos colegas e amigos do DF-UFMG pelas valiosas discussões acerca de temas relativos a este trabalho e muito mais;
- Ao Bruno pelo carinho e companheirismo, principalmente na fase final deste doutorado;
- Aos meus pais, Antônio e Maríla, por apoiarem minhas escolhas;
- Às minhas irmãs, Clarissa e Lígia, e ao pequeno Gabriel;
- A todos os meus amigos que, felizmente sendo muitos, não podem ser enumerados neste espaço.

Este trabalho foi parcialmente financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

RESUMO

Sistemas Antiferromagnéticos Unidimensionais de Spin-1

Seguindo uma tendência atual da pesquisa em magnetismo quântico, o objeto de estudo desta tese compreende sistemas antiferromagnéticos (AFM) unidimensionais de spin-1. Analisamos estes sistemas em dois cenários físicos diferentes: o Modelo Sigma não Linear (MSNL) 1D com $S = 1$ acoplado com um ruído e o Modelo de Heisenberg AFM 1D com $S = 1$ acoplado com fônons. No primeiro trabalho, apresentamos um método de obtenção da termodinâmica do MSNL baseado no acoplamento do campo sigma com uma fonte externa de ruído. Este recurso é capaz de revelar o comportamento térmico da cadeia AFM de spin-1 quando submetida a um campo cristalino com determinadas propriedades estocásticas. Trata-se de um método efetivo para a abordagem de temperatura finita no MSNL, motivado por razões fenomenológicas e justificado pela comparação com a experiência. O *gap* e a largura de linha das excitações do modelo são obtidos a partir do cálculo perturbativo das funções de Green. O segundo trabalho aborda a interação entre graus de liberdade elásticos e magnéticos, o chamado acoplamento mágnon-fônon, que desempenha um importante papel em magnetismo. A partir de um modelo de interação, tratado via transformações de Holstein-Primakoff dentro do contexto da teoria de ondas de spin modificada, obtém-se a função de Green de fônons através de um método diagramático perturbativo. Os resultados emergentes desta análise - função relaxação, energia e largura de linha de fônons - descrevem a dinâmica destas excitações sob a interação com os mágnons na cadeia AFM de spin-1.

ABSTRACT

One-dimensional Spin-1 Antiferromagnetic Systems

Attending to the current tendency of research in quantum magnetism, our object of study comprises one-dimensional spin-1 antiferromagnetic (AFM) systems. They are analysed for two different physical pictures: a noise-driven 1D Nonlinear Sigma Model (NLSM) for $S = 1$ and the 1D AFM Heisenberg Model for $S = 1$ coupled to phonons. In the first work, we present a method of extracting the NLSM thermodynamics based on the coupling between the sigma field and an external noise source. This approach succeeds in capturing the thermal behavior of the spin-1 AFM chain subjected to a crystalline field enjoying certain stochastic properties. This is an effective method for the NLSM at finite temperature, moved by a phenomenological reasoning which is justified by comparison with experiment. The model excitations gap and line-width are derived from a perturbative calculation for the Green's function. The second work accounts for the interplay between vibrational and magnetic degrees of freedom, the so-called magnon-phonon coupling, which plays an important role in magnetism. The diagrammatic Green's function perturbative method is used to investigate the phonon dynamics for the spin-1 1D antiferromagnet within the framework of an interaction Heisenberg model. This is treated via the Holstein-Primakoff transformations in the context of a modified spin wave theory. The so-obtained phonon relaxation function provides a measure of the effect of magnon-phonon coupling on phonon energy and life-time.

SUMÁRIO

1. <i>Introdução</i>	1
2. <i>Teoria Básica</i>	5
2.1 Método das Funções de Green	5
2.2 Modelo de Heisenberg	16
2.3 Modelo Sigma não Linear	23
3. <i>Modelo Sigma não Linear Acoplado com um Ruído</i>	31
3.1 Apresentação e Motivação	31
3.2 O Modelo	32
3.3 Gap	34
3.4 Largura de linha	37
3.5 Conclusão	44
4. <i>Modelo de Heisenberg Antiferromagnético Acoplado com Fônons</i> .	47
4.1 Apresentação e Motivação	47
4.2 O Modelo	49
4.2.1 Hamiltonianos Antiferromagnéticos	50
4.3 Cálculo do Hamiltoniano de Interação	53
4.4 Funções de Green	57
4.5 Funções Relaxação	61
4.5.1 Fônons Acústicos	64
4.5.2 Fônons Óticos	71
4.6 Conclusão	72
5. <i>Conclusões</i>	74
 <i>Apêndice</i>	 77
A. <i>Integração numérica de funções com denominadores que se anulam</i>	78
B. <i>Obtenção numérica dos zeros de uma função</i>	81

LISTA DE FIGURAS

2.1	Diagramas de Feynman elementares	13
3.1	Massa reduzida <i>versus</i> temperatura reduzida do MSNL acoplado com um ruído. A curva concorda satisfatoriamente com os dados experimentais para Y_2BaNiO_5 [52] quando $\gamma = 1.36$. A linha tracejada é a predição de Boltzmann para a massa reduzida do MSNL puro, dada pela Eq. (2.88).	36
3.2	Largura de linha <i>versus</i> temperatura reduzida do MSNL acoplado com um ruído para $\Gamma = 3.84 \times 10^{-2}$. Os dados experimentais correspondem ao composto Y_2BaNiO_5 [52].	42
3.3	Largura de linha térmica e largura de linha total <i>versus</i> temperatura reduzida do MSNL acoplado com um ruído. Próximo a temperatura nula, a influência das flutuações térmicas sobre os efeitos de tempo de vida é pequena, se comparada com a contribuição advinda das interações entre mágnons.	44
4.1	Diagramas de Feynman elementares para a interação mágnon-fônon.	59
4.2	Diagrama conexo para a contribuição de segunda ordem da interação mágnon-fônon para as funções de Green de fônons.	59
4.3	Funções relaxação de fônons acústicos <i>versus</i> frequência para $q = \pi/16$, $T = 0.1$ e três valores de constante de acoplamento: $\alpha = 0.1, 0.5, 0.99$	66
4.4	Frequência ao quadrado (esquerda) e largura de linha (direita) de fônons acústicos <i>versus</i> constante de acoplamento para $q = \pi/16$ e $T = 0.1$	66
4.5	Funções relaxação de fônons acústicos <i>versus</i> frequência para $q = \pi/16$, $\alpha = 0.1$ e três valores de temperatura: $T = 0.1, 0.145, 0.195$	68

4.6	Frequência ao quadrado (esquerda) e largura de linha (direita) de fônons acústicos <i>versus</i> temperatura para $q = \pi/16$ e $\alpha = 0.1$	68
4.7	Funções relaxação de fônons acústicos <i>versus</i> frequência para $\alpha = 0.1$, $T = 0.1$ e três valores de vetor de onda $q = 1.1755, \pi/2, 1.9661$	70
4.8	Frequência ao quadrado (esquerda), frequência ao quadrado na vizinhança do centro primeira zona de Brillouin (centro) e largura de linha (direita) de fônons acústicos <i>versus</i> vetor de onda para $\alpha = 0.1$ e $T = 0.1$	70
4.9	Frequências ao quadrado de fônons acústicos e óticos na vizinhança do centro da primeira zona de Brillouin (esquerda) e largura de linha de fônons acústicos (direita) <i>versus</i> vetor de onda para $\alpha = 0.1$ e $T = 0.1$	72
B.1	Representação de $\Omega(q_i, k)$ e dos zeros consecutivos de $D(q_i, k; \omega_j)$ mais próximos entre si.	83

1. INTRODUÇÃO

Sistemas magnéticos de baixa dimensionalidade são objeto de grande interesse para inúmeras áreas da física da matéria condensada. Recentemente, a pesquisa na área ganhou um novo fôlego com a descoberta, e conseqüente perspectiva de aplicação tecnológica, dos cupratos supercondutores de alta temperatura de transição, isolantes de Mott, nanoestruturas magnéticas e demais compostos relacionados com o magnetismo em baixas dimensões. Estes materiais compõem o palco da nova física de transições de fase quânticas que comporta fenômenos como o efeito Hall quântico fracionário, a proliferação de excitações topológicas em sistemas, a fracionalização de graus de liberdade, dentre outros comportamentos “inusitados” da matéria.

Dentro deste cenário atual, sistemas antiferromagnéticos (AFM) ocupam posição de destaque. Na verdade, o interesse pelo antiferromagnetismo emerge ainda nos primórdios da Mecânica Quântica, tendo como marco inicial a solução de Bethe [1], de 1931, para o hamiltoniano de Heisenberg AFM 1D com $S = 1/2$. Neste trabalho, o estado fundamental do sistema foi obtido exatamente a partir do famoso *ansatz de Bethe*. A energia do estado fundamental foi resolvida em 1938, por Hulthén [2]. A conclusão destes trabalhos era bastante surpreendente: não existência de ordem de longo alcance coexistindo com um estado fundamental de *gap* nulo.

O maior problema em se lidar com hamiltonianos de Heisenberg é que apenas casos muito simplificados, em geral não muito representativos de sistemas reais, podem ser resolvidos exatamente. Normalmente, mesmo com a redução do número de dimensões, faz-se necessário lançar mão de métodos aproximados e/ou numéricos. Esta situação inspirou o desenvolvimento, paralelo às pesquisas iniciadas por Bethe, de uma abordagem alternativa para operadores de spin, a chamada *teoria de ondas de spin*.

A idéia de ondas de spin bosônicas (mágnons) é encontrada originalmente no trabalho de Bloch [3], de 1932, sendo formalmente justificada por Holstein e Primakoff [4] somente em 1940. As ondas de spin representaram um grande avanço do ponto de vista analítico ao substituírem

operadores de spin, com suas relações de comutação não triviais, por operadores de bósons. Isto motivou a adaptação deste formalismo para o estudo do “excêntrico” antiferromagnetismo de spin-1/2. As ondas de spin-1/2 de Anderson [5] e Kubo [6], ambas de 1952, previam ordem de longo alcance e mágnons com *gap* nulo para sistemas AFM em dimensões superiores a 1. A partir daí, seguiram-se diversas teorias de bosonização para o magnetismo, como a representação de bósons de Schwinger [7], as transformações de Dyson-Maléev [8, 9] e as de Villain [10].

É justo mencionar aqui, no contexto das teorias de ondas de spin bosônicas, que aproximações de operadores de férmions foram utilizadas antes mesmo do marco tradicional, atribuído a Bethe, para o início da pesquisa moderna em magnetismo. Isto nos remete ao histórico artigo de Jordan e Wigner [11], de 1928, no qual operadores de férmions anti-comutativos são explicitamente construídos a partir das matrizes de Pauli para o spin-1/2.

O interesse em explorar as particularidades da física emergente do *background* AFM 1D de spin-1/2 se traduziu em uma série de trabalhos onde este sistema foi submetido às mais diversas situações - campos externos, anisotropias, segundos vizinhos, dimerização, etc. Com o tempo, o eminente esgotamento das variações possíveis na investigação da cadeia AFM de spin semi-inteiro orientou a atenção dos físicos para o caso do spin inteiro, até então pouco explorado. O mapeamento de Haldane [12, 13], de 1983, para o hamiltoniano de Heisenberg AFM no Modelo Sigma não Linear (MSNL) representa um ponto de inflexão no estudo do antiferromagnetismo 1D de spin inteiro. Através de argumentos topológicos, mostrou-se que cadeias AFM de spin inteiro devem apresentar um *gap* finito e, conseqüentemente, estado fundamental desordenado.

A existência de um *gap* e um comprimento de correlação finito para cadeias AFM de spin inteiro é hoje bem estabelecida teórica, numérica e experimentalmente. Como aconteceu para o caso do spin-1/2, inúmeras variantes destes sistemas foram abordadas na literatura. Porém, mais de 20 anos depois da *conjectura de Haldane*, a ausência de ordem de longo alcance para o estado fundamental dos antiferromagnetos unidimensionais é ainda um problema de grande interesse. A pesquisa nesta área do magnetismo quântico têm contribuído para a compreensão de outros fenômenos em sistemas fortemente correlacionados, conectados com a ocorrência de transições de fase quânticas.

Tendo em vista o cenário atual da pesquisa na área, o foco deste doutorado foi o estudo de sistemas AFM 1D de spin inteiro ($S = 1$). Os modelos tratados, escolhidos de acordo com sua adequação a cada cenário físico abordado, foram: o MSNL 1D com $S = 1$ acoplado com um ruído e o modelo de Heisenberg AFM 1D com $S = 1$ acoplado com fônons.

Observamos que o modelo de Heisenberg e o MSNL não foram originalmente propostos visando problemas em magnetismo. Todavia, ao longo dos anos, ambos têm revelado sua utilidade para descrever fenômenos magnéticos em sistemas cristalinos. O hamiltoniano de Heisenberg, tendo se mostrado extremamente profícuo devido às inúmeras variações que permite - acoplamento com diversos tipos de campo externo, anisotropias, interações de alcance superior a primeiros vizinhos, distinção entre ferro e antiferromagnetismo - sagrou-se efetivamente o hamiltoniano padrão no estudo de redes de spins. O MSNL, oriundo de teoria de campos e aplicado em vários problemas de física de partículas, obteve, após o mapeamento de Haldane, status de limite contínuo do hamiltoniano de Heisenberg AFM.

No Capítulo 2, apresentamos um resumo da teoria básica presente neste trabalho. Na primeira seção do capítulo, desenvolvemos o método das funções de Green, ferramenta comum ao tratamento dos modelos aqui abordados. As duas seções seguintes referem-se, respectivamente, ao modelo de Heisenberg e ao MSNL. O capítulo é de caráter informativo e introdutório do formalismo geral a ser empregado nos problemas específicos, tratados nos capítulos subsequentes. Assim, serão omitidas as demonstrações matemáticas extensas. Procuraremos indicar as referências mais importantes ao longo do texto.

No Capítulo 3, estudamos o MSNL 1D com $S = 1$ sob a ação de um ruído. Tal modelo revela a dinâmica da cadeia AFM de spin inteiro quando submetida a um campo cristalino com determinadas propriedades estocásticas. Trata-se de um modelo efetivo para o comportamento térmico do MSNL 1D motivado por razões fenomenológicas e justificado pela comparação com dados experimentais. O *gap* e a largura de linha das excitações do modelo são obtidos a partir de um cálculo perturbativo para as funções de Green.

No Capítulo 4, apresentamos o modelo de Heisenberg AFM 1D com $S = 1$ acoplado com fônons. A interação da cadeia AFM de spin inteiro com os fônons do sistema ainda não foi suficientemente explorada na literatura, apesar de sua importância para a dinâmica do sistema. Aqui, empregamos a teoria de ondas de spin modificada via transformações de Holstein-Primakoff, mais conveniente para tratar a interação magnon-fônon do que um modelo efetivo de campos. A dinâmica de fônons é obtida através de um método perturbativo para as funções de Green que gera a função relaxação, a energia e a largura de linha daqueles graus de liberdade.

No Capítulo 5, dedicado a Conclusão deste trabalho, nossos resultados serão discutidos e avaliada a adequação de cada um deles ao sistema físico em questão.

2. TEORIA BÁSICA

2.1 Método das Funções de Green

O método das funções de Green é a ferramenta de uma teoria de muitos corpos usada para tratar hamiltonianos que não possuem solução exata. Normalmente, estes hamiltonianos são aqueles que levam em consideração as interações entre as partículas. O formalismo aqui desenvolvido para a função de Green em $T = 0$ segue basicamente aquele apresentado na referência [14]. A função de Green em T finita é apresentada seguindo a referência [15].

Escrevemos o hamiltoniano genericamente como

$$H = H_0 + V \quad (2.1)$$

onde H_0 é um hamiltoniano cuja solução é conhecida e V é um potencial que não pode ser resolvido exatamente. O hamiltoniano total H pode ser tratado, através de um método perturbativo, quando é possível tomar o *hamiltoniano não perturbado* H_0 tal que a contribuição da *perturbação* V seja pequena. Neste caso, supomos que o estado do sistema não muda devido à introdução da perturbação. Isto nos permite calcular a correção para energia daquele estado devido à introdução do potencial V .

O procedimento perturbativo obviamente só é necessário se $[H_0, V] \neq 0$; caso contrário, H comuta com H_0 e, portanto, estes operadores compartilham um conjunto completo de auto-estados. Usando os auto-estados conhecidos de H_0 , calcula-se os auto-valores de H sem a necessidade de aproximações.

Seja um sistema de N partículas idênticas. O hamiltoniano H_0 pode ser escrito genericamente como a soma dos hamiltonianos das partículas individuais:

$$H_0 = \sum_{i=1}^N H_{0_i} = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + U(\vec{r}_i) \quad (2.2)$$

A interação entre as partículas é dada por um potencial V escrito como:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N V(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (2.3)$$

★ *Segunda Quantização*

A função de onda do sistema de partículas definido por H_0 é a sobreposição das funções de onda das partículas individuais:

$$\Psi(\vec{r}_1, t_1; \dots; \vec{r}_N, t_N) = \prod_{i=1}^N \Psi(\vec{r}_i, t_i) \quad (2.4)$$

Sejam $\varphi_\alpha(\vec{r}_i)$ as auto-funções de H_{0_i} com auto-valores ε_α . A função de onda $\Psi(\vec{r}_i, t_i)$ pode ser escrita como combinação linear das auto-funções de H_{0_i}

$$\Psi(\vec{r}_i, t_i) = \sum_{\alpha} a_{\alpha}(t_i) \varphi_{\alpha}(\vec{r}_i) \quad (2.5)$$

onde

$$a_{\alpha}(t) = e^{-i\varepsilon_{\alpha}t/\hbar} a_{\alpha} \quad (2.6)$$

O postulado da simetrização implica em $\Psi(\vec{r}_1, t_1; \dots; \vec{r}_N, t_N)$ simétrica ou anti-simétrica em relação a permutação das partículas, caso estas sejam bósons ou férmions, respectivamente. A (anti-)simetria das funções de onda é contemplada pelas seguintes relações de (anti-)comutação:

- Bósons

$$[\Psi(\vec{r}_1, t_1; \dots; \vec{r}_N, t_N), \Psi^*(\vec{r}'_1, t_1; \dots; \vec{r}'_N, t_N)] = \prod_{i=1}^N \delta(\vec{r}_i - \vec{r}'_i) \quad (2.7)$$

$$[\Psi(\vec{r}_1, t_1; \dots; \vec{r}_N, t_N), \Psi(\vec{r}'_1, t_1; \dots; \vec{r}'_N, t_N)] = 0 \quad (2.8)$$

- Férmions

$$\{\Psi(\vec{r}_1, t_1; \dots; \vec{r}_N, t_N), \Psi^*(\vec{r}'_1, t_1; \dots; \vec{r}'_N, t_N)\} = \prod_{i=1}^N \delta(\vec{r}_i - \vec{r}'_i) \quad (2.9)$$

$$\{\Psi(\vec{r}_1, t_1; \dots; \vec{r}_N, t_N), \Psi(\vec{r}'_1, t_1; \dots; \vec{r}'_N, t_N)\} = 0 \quad (2.10)$$

As relações anteriores são satisfeitas se os coeficientes a_α e a_α^\dagger forem tomados como *operadores* com as seguintes relações de (anti-)comutação:

- Bósons

$$[a_\alpha, a_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha,\beta} \quad (2.11)$$

$$[a_\alpha, a_\beta] = [a_\alpha^\dagger, a_\beta^\dagger] = 0 \quad (2.12)$$

- Férmions

$$\{a_\alpha, a_\beta^\dagger\} = \delta_{\alpha,\beta} \quad (2.13)$$

$$\{a_\alpha, a_\beta\} = \{a_\alpha^\dagger, a_\beta^\dagger\} = 0 \quad (2.14)$$

O valor esperado do hamiltoniano não perturbado H_0 no estado $\Psi(\vec{r}_1, t_1; \dots; \vec{r}_N, t_N)$, dado pelas Eqs. (2.4)-(2.6), é:

$$\langle H_0 \rangle = N \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} \quad (2.15)$$

O efeito da perturbação V sobre $\Psi(\vec{r}_1, t_1; \dots; \vec{r}_N, t_N)$ é dado por

$$\langle V \rangle = \frac{N^2}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\gamma} a_{\delta} \quad (2.16)$$

onde

$$V_{\alpha\beta\gamma\delta} = \int d^3r d^3r' \varphi_{\alpha}^*(\vec{r}) \varphi_{\beta}^*(\vec{r}') V(\vec{r} - \vec{r}') \varphi_{\gamma}(\vec{r}) \varphi_{\delta}(\vec{r}') \quad (2.17)$$

O desenvolvimento acima é a base do processo de *segunda quantização* da Mecânica Quântica.

★ Representação de Interação e Matriz de Espalhamento

A representação de interação da Mecânica Quântica, equivalente às de Schrodinger ou Heisenberg, oferece o cenário mais favorável ao tratamento de um gás de partículas interagentes. A dinâmica do problema é compartilhada entre a função de onda $\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$ e os operadores $\hat{O}(\vec{r}, t)$ de acordo com as equações

$$\hat{\Psi}(\vec{r}, t) = e^{iH_0t/\hbar} e^{-iHt/\hbar} \hat{\Psi}(\vec{r}, 0) \quad (2.18)$$

$$\hat{O}(t) = e^{iH_0t/\hbar} \hat{O}(0) e^{-iH_0t/\hbar} \quad (2.19)$$

onde o circunflexo sobre a função de onda e os operadores indica que estes objetos estão na representação de interação.

Notemos que, na Eq. (2.18), não podemos fazer $e^{iH_0t/\hbar}e^{-iHt/\hbar} = e^{-iVt/\hbar}$ porque $e^A e^B = e^{A+B}$ se, e somente se, $[A, B] = 0$.

A equivalência entre as representações é alcançada quando fazemos

$$\hat{\Psi}(\vec{r}, 0) = \Psi_S(\vec{r}, 0) = \Psi_H(\vec{r}) = \Psi(\vec{r}) \quad (2.20)$$

$$\hat{O}(0) = O_S = O_H(0) = O \quad (2.21)$$

onde os índices S e H indicam as representações de Schrodinger e Heisenberg, respectivamente.

Definimos o operador:

$$U(t) = e^{iH_0t/\hbar}e^{-iHt/\hbar} \quad (2.22)$$

Logo:

$$\hat{\Psi}(\vec{r}, t) = U(t)\hat{\Psi}(\vec{r}, 0) \quad (2.23)$$

A matriz de espalhamento S é definida como o operador que leva $\hat{\Psi}(\vec{r}, t')$ em $\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$:

$$\hat{\Psi}(\vec{r}, t) = S(t, t')\hat{\Psi}(\vec{r}, t') \quad (2.24)$$

Assim:

$$S(t, t') = U(t)U^\dagger(t') \quad (2.25)$$

A partir das Eqs. (2.19) e (2.22), vemos que a matriz de espalhamento obedece à seguinte equação diferencial:

$$\frac{\partial S(t, t')}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{V}(t)S(t, t') \quad (2.26)$$

Integrando ambos os lados da Eq. (2.26) em relação ao tempo e procedendo iterativamente, chegamos à seguinte expansão para a matriz S

$$S(t, t') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i/\hbar)^n}{n!} \int_{t'}^t dt_1 \dots \int_{t'}^t dt_n T \hat{V}(t_1) \dots \hat{V}(t_n) \quad (2.27)$$

onde T é o operador de ordenamento no tempo; ele age sobre um grupo de operadores dependentes do tempo arranjando-os cronologicamente a partir do instante mais remoto:

$$T O(t_m) \dots O(t_n) = O(t_1) O(t_2) \dots O(t_k) \quad \text{se } t_1 > t_2 > \dots > t_k \quad (2.28)$$

★ *Função de Green em $T = 0$*

Cálculos em $T = 0$ são parte fundamental de uma teoria de muitos corpos. Em particular, em $T = 0$, um sistema interagente encontra-se em seu estado fundamental. A função de Green em $T = 0$ é definida, na representação de Heisenberg, como

$$G(\lambda; t, t') = -\frac{i}{\hbar} \langle |T a_\lambda(t) a_\lambda^\dagger(t')| \rangle \quad (2.29)$$

onde $| \rangle$ é o estado fundamental de H .

Gostaríamos de transferir a definição anterior para a mais conveniente representação de interação. Assim, seja $| \rangle_0$ o estado fundamental de H_0 . Existe uma relação entre os estados fundamentais de H e H_0 , tal como estabelecida por Gell-Mann e Low, que diz:

$$| \rangle = S(0, -\infty) | \rangle_0 \quad (2.30)$$

Mostra-se ainda que:

$$S(\infty, -\infty) | \rangle_0 = {}_0 \langle | S(\infty, -\infty) | \rangle_0 | \rangle_0 \quad (2.31)$$

Após escrever os operadores $a_\lambda(t)$ na representação de interação,

$$\begin{aligned} a_\lambda(t) &= e^{iHt/\hbar} a_\lambda e^{-iHt/\hbar} = \\ &= e^{iHt/\hbar} e^{-iH_0t/\hbar} \hat{a}_\lambda(t) e^{iH_0t/\hbar} e^{-iHt/\hbar} = \\ &= S(0, t) \hat{a}_\lambda(t) S(t, 0) \end{aligned} \quad (2.32)$$

utilizamos as Eqs. (2.30) e (2.31) para obtermos $G(\lambda; t, t')$ como

$$G(\lambda; t, t') = -\frac{i}{\hbar} \frac{{}_0 \langle |T \hat{a}_\lambda(t) \hat{a}_\lambda^\dagger(t') S(\infty, -\infty) | \rangle_0}{{}_0 \langle | S(\infty, -\infty) | \rangle_0} \quad (2.33)$$

que é o resultado desejado.

★ *Função de Green não perturbada em $T = 0$*

A *função de Green não perturbada* é obtida da Eq. (2.33) quando $V = 0$, i.e., $S = 1$:

$$G_0(\lambda; t, t') = -\frac{i}{\hbar} {}_0 \langle |T \hat{a}_\lambda(t) \hat{a}_\lambda^\dagger(t')| \rangle_0 \quad (2.34)$$

Esta função pode ser calculada a partir do conhecimento do estado fundamental do sistema de partículas não interagentes. Bósons estarão todos aglomerados no auto-estado fundamental $|\varepsilon_0\rangle$ de seus hamiltonianos individuais H_{0_i} . Já os férmions estarão distribuídos, um a um, nos estados de menor energia, até que o último férmion ocupe o estado $|\varepsilon_F\rangle$, o chamado *nível de Fermi*.

Na representação de número de ocupação:

- Bósons

$$|\rangle_0 = |N_{\varepsilon_0} 0 0 \dots\rangle \quad (2.35)$$

- Férmions

$$|\rangle_0 = |1_{\varepsilon_0} \dots 1_{\varepsilon_F} 0 0 \dots\rangle \quad (2.36)$$

O operador número $a_\lambda^\dagger a_\lambda$ avaliado no estado fundamental é:

- Bósons

$${}_0\langle |a_\lambda^\dagger a_\lambda| \rangle_0 = N\delta_{\lambda, \varepsilon_0} \quad (2.37)$$

- Férmions

$${}_0\langle |a_\lambda^\dagger a_\lambda| \rangle_0 = \Theta(-\xi_\lambda) \quad (2.38)$$

onde $\xi_\lambda = \varepsilon_\lambda - \varepsilon_F$ é o desvio da energia do estado $|\lambda\rangle$ em relação ao nível de Fermi.

Logo:

- Bósons

$$\begin{aligned} G_0(\lambda; t, t') &= G_0(\lambda; t - t') = \\ &= -\frac{i}{\hbar} e^{-i\varepsilon_\lambda(t-t')/\hbar} [\Theta(t-t')(1+N\delta_{\lambda, \varepsilon_0}) + \Theta(t'-t)N\delta_{\lambda, \varepsilon_0}] \end{aligned} \quad (2.39)$$

- Férmions

$$\begin{aligned} G_0(\lambda; t, t') &= G_0(\lambda; t - t') = \\ &= -\frac{i}{\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_\lambda(t-t')/\hbar} [\Theta(t-t')\Theta(\xi_\lambda) - \Theta(t'-t)\Theta(-\xi_\lambda)] \end{aligned} \quad (2.40)$$

Como G_0 é função apenas da diferença $t-t'$, definimos sua transformada de Fourier como

$$G_0(\lambda; t - t') = \int \frac{d\omega}{\sqrt{2\pi}} G_0(\lambda; \omega) e^{-i\omega(t-t')} \quad (2.41)$$

com

$$G_0(\lambda; \omega) = \int \frac{d(t-t')}{\sqrt{2\pi}} G_0(\lambda; t-t') e^{i\omega(t-t')} \quad (2.42)$$

As funções de Green não perturbadas em função da frequência são

- Bósons

$$G_0(\lambda; \omega) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\omega - \omega_\lambda + i\delta} \quad (2.43)$$

- Férmions

$$G_0(\lambda; \omega) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left[\frac{\Theta(\xi_\lambda)}{\omega - \omega_\lambda + i\delta} + \frac{\Theta(-\xi_\lambda)}{\omega - \omega_\lambda - i\delta} \right] \quad (2.44)$$

onde $\omega_\lambda = \varepsilon_\lambda/\hbar$ e o fator $i\delta$ é introduzido para assegurar a convergência das integrais.

★ *Teorema de Wick e Diagramas de Feynman*

Substituindo a expansão (2.27) da matriz S na Eq. (2.33), obtemos:

$$G(\lambda; t, t') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i/\hbar)^{n+1}}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \frac{{}_0\langle |T \hat{a}_\lambda(t) \hat{a}_\lambda^\dagger(t') \hat{V}(t_1) \dots \hat{V}(t_n) | \rangle_0}{{}_0\langle |S(\infty, -\infty) | \rangle_0} \quad (2.45)$$

A interação V é dada em termos de operadores criação e destruição segundo a Eq. (2.16). Na representação de interação, escrevemos:

$$\hat{V}(t) = \frac{N^2}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{a}_\alpha^\dagger(t) \hat{a}_\beta^\dagger(t) \hat{a}_\gamma(t) \hat{a}_\delta(t) \quad (2.46)$$

A substituição desta equação na expansão de $G(\lambda; t, t')$ leva ao cálculo do valor esperado, no estado fundamental de H_0 , de uma extensa sequência de operadores $\hat{a}_\alpha^\dagger(t_i)$ e $\hat{a}_\beta(t_j)$, já em $n = 1$. Felizmente, a seguinte constatação simplifica o problema: a sequência de p operadores criação e q operadores destruição, avaliada no mesmo estado do sistema ($| \rangle_0$ no caso), só não se anula se (i) $p = q$ e (ii) para cada partícula criada no estado α no instante t_i , uma partícula for destruída no estado β no instante t_j , tal que $\alpha = \beta$.

Isto gera o pareamento entre os operadores $\hat{a}_\alpha^\dagger(t_i)$ e $\hat{a}_\beta(t_j)$ dentro dos *brackets* do tipo:

$${}_0\langle |T \hat{a}_\lambda(t) \hat{a}_\lambda^\dagger(t') \hat{V}(t_1) \dots \hat{V}(t_n) | \rangle_0 \quad (2.47)$$

A respeito dos inúmeros pareamentos possíveis entre os operadores criação e destruição em *brackets* (2.47) temos:

Teorema de Wick

Feitos todos os pareamentos possíveis, o *bracket* estará ordenado temporalmente se cada par de operadores assim estiver.

Este teorema permite decompor cada *bracket* (2.47) em uma soma dos produtos dos possíveis pareamentos ordenados no tempo. Temos que *brackets* com p operadores de cada tipo possuem $p!$ pareamentos possíveis, ou seja, se decompõem em uma soma de $p!$ termos.

Cada par, então, pode ser identificado com um dos elementos básicos: o valor esperado do operador número no estado fundamental de H_0 ou a função de Green não perturbada. Senão vejamos:

Para pares de operadores em tempos iguais

$${}_0\langle |T \hat{a}_\alpha^\dagger(t) \hat{a}_\alpha(t)| \rangle_0 = {}_0\langle |a_\alpha^\dagger a_\alpha| \rangle_0 = n_\alpha^t \quad (2.48)$$

$${}_0\langle |T \hat{a}_\alpha(t) \hat{a}_\alpha^\dagger(t)| \rangle_0 = {}_0\langle |a_\alpha a_\alpha^\dagger| \rangle_0 = 1 \pm n_\alpha^t \quad (2.49)$$

onde o sinal positivo é válido para bósons e o sinal negativo para férmions, n_α^t é dado pela Eq. (2.37) para o caso de bósons e pela Eq. (2.38) para férmions. Apesar da independência do resultado em relação ao tempo, incluímos o índice t a fim de indicar que o *bracket* original é calculado no instante t . Esta menção explícita ao instante de tempo é útil na formulação em termos de diagramas, como veremos a seguir.

Em tempos diferentes, os operadores sempre (anti-)comutam e

$${}_0\langle |T \hat{a}_\alpha(t_1) \hat{a}_\alpha^\dagger(t_2)| \rangle_0 = \pm {}_0\langle |T \hat{a}_\alpha^\dagger(t_2) \hat{a}_\alpha(t_1)| \rangle_0 = i\hbar G_0(\alpha; t_1 - t_2) \quad (2.50)$$

onde usamos a Eq. (2.34) e o fato de que $G_0(\alpha; t_1, t_2) = G_0(\alpha; t_1 - t_2)$.

Introduzindo-se os diagramas elementares de Feynman

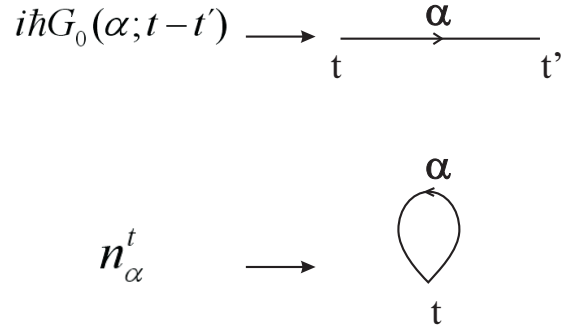
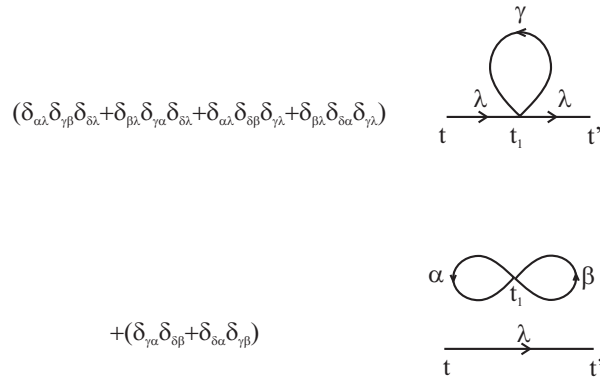


Fig. 2.1: Diagramas de Feynman elementares

cada *bracket* (2.47) se decompõe em uma soma de diagramas de Feynman construídos a partir destes elementos básicos. Por exemplo, o *bracket*

$${}_0\langle |T \hat{a}_\lambda(t) \hat{a}_\lambda^\dagger(t') \hat{a}_\alpha^\dagger(t_1) \hat{a}_\beta^\dagger(t_1) \hat{a}_\gamma(t_1) \hat{a}_\delta(t_1) | \rangle_0 =$$



se decompõe em uma soma de $3! = 6$ digramas de Feynman. (Deltas de Kronecker diferentes correspondem a diagramas diferentes.)

Definimos:

Diagramas Conexos: possuem todas as partes conectadas entre si.

Diagramas Desconexos: possuem partes desconectadas entre si.

O cálculo dos diagramas desconexos de $G(\lambda; t, t')$ mostra que eles são formados por uma parte conexa, função de λ, t e t' , multiplicada por uma função das variáveis de integração que gera, portanto, uma constante. Cada

parte conexas $C^{(n)}(\lambda; t, t')$ aparece em todas as ordens da expansão (2.45), a partir da primeira aparição (individual) na ordem n . Em cada ordem $m \geq n$, $C^{(n)}$ é multiplicada por uma constante $F^{(m-n)}$ ($F^{(0)} = 1$).

Quando fatoramos $C^{(n)}$, ela fica multiplicada pela série das constantes, formando o termo:

$$C^{(n)}(\lambda; t, t') \sum_{m=n}^{\infty} F^{(m-n)} = C^{(n)}(\lambda; t, t') \sum_{m=0}^{\infty} F^{(m)} \quad (2.51)$$

A expansão (2.45) é a soma de todos $C^{(n)}$ possíveis multiplicados pela série das constantes

$$\begin{aligned} G(\lambda; t, t') &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} (1/n!) \sum_{m=0}^{\infty} F^{(m)} C^{(n)}(\lambda; t, t')}{{}_0\langle |S(\infty, -\infty)| \rangle_0} = \\ &= \frac{\sum_{m=0}^{\infty} F^{(m)}}{{}_0\langle |S(\infty, -\infty)| \rangle_0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{C^{(n)}(\lambda; t, t')}{n!} \end{aligned} \quad (2.52)$$

onde o termo $(-i/\hbar)^{n+1}$ foi incorporado nos $C^{(n)}$.

O cálculo de ${}_0\langle |S(\infty, -\infty)| \rangle_0$ retorna exatamente a série $\sum_{m=0}^{\infty} F^{(m)}$. Assim, estes termos se cancelam na Eq. (2.52). Isto quer dizer que, na decomposição do bracket (2.47) em uma soma de $p!$ diagramas diferentes, só precisamos reter os diagramas conexos. O cancelamento das constantes desconexas, mais do que simplificar o problema, garante a convergência da expansão (2.45) uma vez que, cada um dos termos $F^{(m)}$ da série é, na verdade, infinito (com exceção de $F^{(0)} = 1$). Os diagramas correspondentes são os chamados *diagramas de polarização do vácuo*.

Finalmente, mostra-se que cada diagrama conexo se repete exatamente $n!$ na ordem n da expansão. Podemos eliminar o termo $n!$ da Eq. (2.52) se, na ordem n , considerarmos apenas os diagramas diferentes entre si. Tudo isto em mente, esta equação pode ser reescrita como

$$G(\lambda; t, t') = \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{n+1} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n {}_0\langle |T \hat{a}_\lambda(t) \hat{a}_\lambda^\dagger(t') \hat{V}(t_1) \dots \hat{V}(t_n)| \rangle_0^{CD} \quad (2.53)$$

onde o índice CD significa que só precisamos considerar os diagramas conexos e diferentes entre si.

★ *Equação de Dyson*

A resolução de (2.53) em termos de $G_0(\lambda; t - t')$ e n_α^t (independentes do tempo!), mostra que $G(\lambda; t, t') = G(\lambda; t - t')$. Definimos a transformada de Fourier $G(\lambda; \omega)$ analogamente às Eqs. (2.41) e (2.42).

Definindo a *auto-energia* $\Sigma(\lambda; \omega)$ como a série dos termos que multiplicam as potências de $G_0(\lambda; \omega)$ na expansão de $G(\lambda; \omega)$, escreve-se:

$$G(\lambda; \omega) = \frac{G_0(\lambda; \omega)}{1 - G_0(\lambda; \omega)\Sigma(\lambda, \omega)} \quad (2.54)$$

Esta é a equação de Dyson; sua relevância é fornecer uma “receita” simples para se calcular a função de Green a partir do conhecimento da auto-energia do sistema. Este método só é útil se pudermos aproximar a série infinita da auto-energia por seus termos de ordem mais baixa. Se o resultado assim obtido não se mostrar satisfatório, deve-se tentar resolver o problema por algum outro método. Em outras palavras, a hipótese de acoplamento fraco, inerente ao método perturbativo e justificativa para o cálculo apenas dos primeiros termos da série da auto-energia, não é adequada. Por outro lado, se este cálculo for satisfatório, a equação de Dyson nos diz que alcançamos a objeto central de nosso interesse: a função de Green, a partir da qual são calculadas grandezas fisicamente relevantes.

★ *Função de Green em temperatura finita*

O formalismo de uma teoria de muitos corpos em temperatura finita foi introduzido por Matsubara (1955). Sua função de Green é definida a partir de uma média termodinâmica sobre todas as configurações possíveis do sistema. Uma transformação para tempos imaginários $t = -i\tau$, a chamada *rotação de Wick*, identifica a temperatura com o comprimento do intervalo $[0, \tau_f]$ através da equação $\tau_f \hbar^{-1} = \beta = (K_B T)^{-1}$. Esta identificação pode ser entendida pictoricamente como uma substituição das flutuações quânticas da energia, medidas em termos de \hbar , por flutuações térmicas, medidas em termos de T .

O formalismo em $T \neq 0$ se desenvolve de forma semelhante àquele em $T = 0$, gerando a seguinte expansão para $G(\lambda; \tau)$:

$$G(\lambda; \tau) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\beta} d\tau_n \langle T_{\tau} \hat{a}_{\lambda}(\tau) \hat{a}_{\lambda}^{\dagger}(0) \hat{V}(\tau_1) \dots \hat{V}(\tau_n) \rangle^{CD} \quad (2.55)$$

Como a variável τ varia dentro do intervalo finito $[0, \beta]$ (tomamos $\hbar = 1$), a função $G(\lambda; \tau)$ admite uma série de Fourier em lugar de uma transformada ¹

$$G(\lambda; \tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_n G(\lambda; \omega_n) e^{i\omega_n \tau} \quad (2.56)$$

onde

$$G(\lambda; \omega_n) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \int_0^{\beta} d\tau G(\lambda; \tau) e^{-i\omega_n \tau} \quad (2.57)$$

e

$$\omega_n = \frac{2\pi n}{\beta} \quad (2.58)$$

são as *frequências de Matsubara*.

A equação de Dyson é análoga à Eq. (2.54) para $T = 0$ apenas com ω substituído por ω_n .

2.2 Modelo de Heisenberg

O hamiltoniano de Heisenberg, embora utilizado nos dias de hoje como protótipo no estudo de sistemas magnéticos, foi originalmente concebido para descrever um problema de natureza eletrostática.

Em um sistema de férmions carregados, a degenerescência dos estados é levantada pela introdução da interação eletrostática entre as partículas. O mecanismo pelo qual isso ocorre é basicamente o seguinte: o princípio de exclusão de Pauli exige que a função de onda total de férmions seja anti-simétrica; assim, uma função de onda de spin simétrica corresponde a uma função de onda orbital anti-simétrica, e vice-versa. A interação eletrostática entre os férmions será mais ou menos intensa dependendo se a parte orbital da função de onda é simétrica ou anti-simétrica uma vez que, no primeiro caso, as partículas estão mais próximas do que no segundo. A separação entre os níveis de energia dos estados de um sistema de férmions, correspondentes a suas diferentes configurações orbitais, é a

¹ A rigor, a série de Fourier é definida para extensão periódica de $G(\lambda; \tau)$ para todo eixo real.

base do fenômeno conhecido como *interação de troca*. A diferença entre as energias dos estados é a chamada *integral de troca* J . O cálculo de J é geralmente bastante complicado para que possa ser tratado diretamente.

Mostra-se que um hamiltoniano efetivo do tipo

$$H = \sum_{(i,j)} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.59)$$

é capaz de simular a perturbação introduzida pela interação eletrostática entre os férmions [16]. A soma é feita sobre todos os pares de partículas (i, j) e os vetores \vec{S}_i e \vec{S}_j denotam os momentos angulares de spin das partículas do par interagente. O *parâmetro de troca*, ou *constante de acoplamento*, J_{ij} cai rapidamente com a distância, comportamento herdado de J , que depende da sobreposição de funções de onda. A Eq. (2.59) fornece o conhecido hamiltoniano de Heisenberg e sua vantagem é ser muito mais simples do que a fórmula exata para J .

Não obstante a motivação original de hamiltonianos efetivos tipo Heisenberg ter sido a resolução do problema de férmions interagentes, verificou-se mais tarde que eles também poderiam ser úteis em outros sistemas físicos, como por exemplo, em redes cristalinas magnéticas. Em particular, o estado ordenado de ferromagnetos na ausência de campo externo poderia finalmente ser explicado. A primeira tentativa óbvia do ponto de vista físico - explicar este ordenamento por meio de um modelo de spins localizados com interações do tipo dipolo-dipolo - havia falhado. As interações de dipolo magnético não são intensas o suficiente para manter um estado ordenado até temperaturas razoavelmente altas, como observado para inúmeros cristais ferromagnéticos. A natureza eletrostática por trás do hamiltoniano de Heisenberg trouxe um mecanismo suficientemente forte, capaz de prever um estado ferromagneticamente ordenado, mesmo a temperaturas mais elevadas ².

O fato de que o parâmetro de troca J_{ij} é apreciável apenas entre sítios próximos explica porque a maioria dos trabalhos com o hamiltoniano de Heisenberg envolve apenas interação entre os primeiros vizinhos. Ainda, J_{ij} pode ser anisotrópico, i.e., variar nas direções x , y e z do acoplamento $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$. O caso isotrópico corresponde a J_{ij} independente das direções.

² Normalmente, as contribuições de dipolo magnético, quando levadas em consideração no hamiltoniano do sistema, são tratadas como uma perturbação.

O hamiltoniano de Heisenberg é resolvido analiticamente para poucos casos particulares. A simplificação mais básica corresponde ao modelo de Ising [17, 18]. O próximo na hierarquia é o modelo XY [19]. Sua generalização, o hamiltoniano isotrópico de Heisenberg AFM 1D de spin-1/2, foi resolvida por Bethe [1] alguns anos antes. Casos ligeiramente mais complicados exigem tratamento via aproximações. Por exemplo, a universalidade das propriedades da cadeia AFM de spin-1/2 para valores maiores de spin semi-inteiro só pôde ser verificada numericamente [20].

A dificuldade com hamiltonianos de aparência inocente como (2.59) reside no fato de que spins não são bósons nem férmions. De fato, as relações de comutação dos operadores de spin não correspondem às relações de operadores daquelas partículas. Assim, as bem estabelecidas estatísticas de bósons e férmions não podem ser usadas diretamente no hamiltoniano de Heisenberg.

As aproximações conhecidas pelo nome comum de *ondas de spin* se baseiam em promover sucessivas transformações consistentes que levam os operadores de spin em operadores de bósons. O leitor interessado pode encontrar uma revisão geral sobre as teorias de ondas de spin - teoria de Bloch, transformações de Holstein-Primakoff, bósons de Schwinger, etc. - no excelente livro sobre magnetismo de Mattis [21]. O artigo de revisão de Kranendonk e VanVleck [22] apresenta o desenvolvimento formal da teoria de ondas de spin sob o ponto de vista de Holstein-Primakoff. Para demais referências, ver artigos originais citados na Introdução.

A idéia básica de uma onda de spin é associar a rede de spins interagentes com uma rede de osciladores harmônicos acoplados. Os modos normais, equivalentes aos fônons da rede de osciladores quantizada, são chamados mágnons. O método supõe conhecido o estado fundamental do sistema. Para o ferromagneto, é possível obter exatamente os auto-estados excitados de um e dois mágnons, a partir do conhecimento do seu estado fundamental ordenado.

No caso do antiferromagnetismo 1D, suas não linearidades intrínsecas impedem a estabilidade de um estado fundamental ordenado. O chamado *estado de Néel*, correspondente a um alinhamento anti-paralelo dos spins, só é obtido com a introdução de uma anisotropia na forma de um campo externo efetivo. Entretanto, considerando o caso isotrópico como um limite do caso anisotrópico para valores pequenos do campo externo, espera-se que o estado fundamental não se afaste substancialmente do estado ordenado.

Este argumento é utilizado para que o estado de Nèel seja tomado como ponto de partida de uma aproximação de onda de spin para o antiferromagneto 1D. Para o caso das cadeias AFM de spin inteiro, esta premissa é aproximadamente válida já que o estado fundamental destes sistemas, embora não apresente correlações de longo alcance, conserva uma ordem local. Já para o caso do spin-1/2, o estado fundamental não pode ser conectado com uma ordem de Nèel através de nenhuma aproximação razoável.

Mesmo assim, teorias de ondas de spin foram empregadas por vários autores a fim de investigar certas propriedades da cadeia AFM de spin-1/2 [23, 24]. Entretanto, após a descoberta do *efeito spin-Peierls* [25], em 1974, a inaplicabilidade das teorias padrão de ondas de spin para os sistemas anteriores tornou-se um fato praticamente aceito na comunidade científica. A partir da dimerização da cadeia AFM de spin-1/2 devido ao seu acoplamento com fônons, o efeito spin-Peierls define as excitações elementares dos dímeros de spin não como mágnons, mas entidades fundamentalmente diferentes, denominadas *spinons*.

No final da década de 80, proliferaram as teorias de ondas de spin desenvolvidas especialmente para contemplar a simetria do estado fundamental das cadeias AFM. São dessa época a *teoria de ondas de spin modificada* de Takahashi [26], a teoria invariante rotacional de Arovas e Auerbach [27] e o método de Hirsch e Tang [28]. Somente mais de 60 anos depois do aparecimento da abordagem de ondas de spin, um método de bosonização coerente com o estado fundamental da cadeia AFM de spin-1/2 foi desenvolvido, por Affleck [29], em 1998.

O estudo do antiferromagnetismo de spin inteiro se diversificou em relação às abordagens de ondas de spin somente em 1983, com o mapeamento de Haldane [12, 13] do modelo de Heisenberg AFM no Modelo Sigma não Linear (MSNL). No âmbito do MSNL, tornou-se evidente uma diferença qualitativa entre a massiva cadeia AFM de spin inteiro e sua parente sem massa de spin-1/2. De fato, a discrepância nesta característica do estado fundamental de tais sistemas indica que spins inteiros e semi-inteiros residem em classes fenomenológicas distintas. O MSNL é o assunto da próxima seção, onde o arcabouço matemático básico e os resultados centrais do modelo serão apresentados.

Em duas dimensões, o cenário antiferromagnético também é rico em diversidade. Hamiltonianos de Heisenberg AFM bidimensionais com interação entre primeiros vizinhos quebram a simetria rotacional da rede no

estado fundamental, apresentando ordenamento de Nèel. Suas excitações de menor energia correspondem a ondas de spin, ou mágnons, sem *gap* em $T = 0$, como previsto originalmente por Anderson [5] e Kubo [6] para o caso do spin-1/2. O sistema AFM bidimensional pode ser mapeado na fase ordenada do MSNL para qualquer valor de spin [30]. O modelo AFM 2D pode restaurar a invariância rotacional do estado fundamental através da introdução de outras interações, como segundos vizinhos ou um campo externo.

Para interações entre primeiros e segundos vizinhos dadas respectivamente por J_1 e J_2 , cálculos numéricos [30] mostram que existe um valor crítico $g_c \approx 0.4$ tal que, para $J_2/J_1 < g_c$ temos ordem de Nèel e para $J_2/J_1 > g_c$ o estado fundamental apresenta invariância rotacional. No entanto, este estado fundamental mantém uma ordem tipo spin-Peierls, que quebra a invariância translacional da rede. Este ordenamento não é suficiente para manter uma magnetização no sistema e o estado fundamental é um um paramagneto quântico. Para spins inteiros pares, a fase $J_2/J_1 > g_c$ recupera toda simetria da rede e o estado fundamental é totalmente desordenado. No âmbito do MSNL, a ordem spin-Peierls é obtida da ordem de Nèel quando J_2/J_1 excede g_c através da proliferação de excitações topológicas tipo “hedgehogs” (porco-espinho) [30]. Uma outra forma de tratar estes estados dimerizados tipo spin-Peierls é através do modelo do *sólido de ligação de valência* (VBS) [31, 32]. Ressonâncias entre estas ligações de valência, quando ocorrem, levam ao “derretimento” do VBS e ao aparecimento de um novo estado da matéria: um líquido sem ordenamento translacional. Temos o *líquido de ligação de valência ressonante* (RVB) [33]. Sistemas magnéticos que não quebram nenhuma simetria em $T = 0$ são chamados genericamente de *líquidos de spin*.

Estados RVB não se enquadram no paradigma de Ginzburg-Landau-Wilson. A abordagem dos líquidos de spin requer a fracionalização do parâmetro de ordem. Este fenômeno tem sido considerado uma assinatura da ocorrência de uma transição de fase quântica, tema pertencente à fronteira atual do conhecimento em física. Assim, o entendimento dos líquidos de spin se tornou a chave para a solução de muitos outros problemas de sistemas fortemente correlacionados ligados à criticalidade quântica, em particular a super-condutividade de alta temperatura de transição [34, 35, 36].

Em três dimensões, a teoria clássica ainda é a melhor opção de abordagem para o magnetismo. As grandezas termodinâmicas dos magnetos 3D, como calor específico e magnetização, podem ser obtidas a partir da energia livre de Landau em boa concordância com a experiência. Fenômenos quânticos não parecem se manifestar com intensidade nos magnetos 3D para que se faça necessária a utilização de novas ferramentas teóricas na análise destes sistemas. Visto deste ângulo, o magnetismo tridimensional não representa uma fonte atual de problemas de fronteira em física da matéria condensada.

★ *Simetria de translação em sistemas cristalinos*

As simetrias presentes em sistemas cristalinos são muito utilizadas na manipulação de hamiltonianos tipo Heisenberg definidos em sítios de uma rede. Vamos estudar o caso unidimensional correspondente a nosso sistema de interesse. O caso geral D-dimensional é absolutamente análogo.

Uma cadeia infinita apresenta simetria translacional, i.e., deslocamentos de um número inteiro de parâmetros de rede \vec{a} ao longo da cadeia reproduzem o mesmo sistema. Seja $\{\eta_l, l \in \mathbb{Z}\}$, um conjunto de variáveis dinâmicas da cadeia, definidas para o sítio l . O hamiltoniano do sistema tem a estrutura geral

$$H = \sum_l f(\eta_l) + \sum_{(l,l')} g(\eta_l, \eta_{l'}) \quad (2.60)$$

onde f contempla a energia de cada sítio isoladamente e g é a energia de interação entre um par (l, l') .

O hamiltoniano H é invariante sob translações de um número inteiro m de parâmetros de rede

$$\sum_{l+m} f(\eta_{l+m}) + \sum_{(l+m, l'+m)} g(\eta_{l+m}, \eta_{l'+m}) = \sum_{\bar{l}} f(\eta_{\bar{l}}) + \sum_{(\bar{l}, \bar{l}')} g(\eta_{\bar{l}}, \eta_{\bar{l}'}) = H \quad (2.61)$$

já que o sítio $l + m$ pertence à cadeia infinita $\forall l$ e $m \in \mathbb{Z}$.

A invariância de H sob translações permite escrever as variáveis dinâmicas em termos de coordenadas normais e H em termos de operadores criação e destruição.

No caso físico de uma cadeia finita com N sítios, a simetria de translação só é aproximadamente válida. Um deslocamento de $m\vec{a}$, a partir do sítio l , irá ultrapassar os limites da cadeia se $m \leq -l$ ou $m > N - l$. Dizemos que

a cadeia tem simetria de translação fraca. Para descrevermos o problema em termos de coordenadas normais, é necessário impor alguma condição na cadeia finita a fim de gerar um sistema com simetria de translação forte.

O artifício é unir as extremidades da cadeia formando um anel. Esta geometria apresenta simetria de translação forte já que podemos percorrer o anel indefinidamente: todo sítio $l + nN$, com $n \in Z$, corresponde, na verdade, ao sítio l , para $l = 1, 2, \dots, N$. Do ponto de vista físico, o anel preserva as propriedades relevantes da cadeia original, quais sejam, o número de sítios e as interações entre eles.

É fácil mostrar que o hamiltoniano (2.60) para a cadeia finita, i.e., com as somas definidas para l e l' entre 1 e N , apresenta invariância translacional (2.61) quando definido no anel.

No anel, as variáveis dinâmicas dos sítios equivalentes $l + mN$ e l devem ser iguais:

$$\eta_{l+mN} = \eta_l \quad \forall m \in Z \quad (2.62)$$

O anel com a propriedade (2.62) equivale a uma cadeia infinita com periodicidade N . Isto permite definir a série de Fourier das variáveis dinâmicas η_l como

$$\eta_l = \sum_{q=\frac{2\pi}{Na}}^{\frac{2\pi}{a}} \frac{\eta_q}{\sqrt{N}} e^{-iqla} \quad (2.63)$$

onde

$$\eta_q = \sum_{l=1}^N \frac{\eta_l}{\sqrt{N}} e^{iqla} \quad (2.64)$$

são as coordenadas normais do sistema e

$$q = \frac{2\pi n}{Na} \quad n \in Z \quad (2.65)$$

As variáveis η_q tem periodicidade $2\pi/a$:

$$\eta_{q+2\pi n/a} = \eta_q \quad \forall n \in Z \quad (2.66)$$

2.3 Modelo Sigma não Linear

O Modelo Sigma não Linear (MSNL) é um modelo de teoria de campos cuja importância central é servir de laboratório, ou *toy-model*, para modelos de física de partículas mais complicados. Por exemplo, o MSNL em $D = 2+1$ compartilha com as teorias de calibre não abelianas em $D = 3+1$ as propriedades de liberdade assintótica e geração espontânea de massa [37]. Em matéria condensada, área de nosso interesse de pesquisa, o modelo representa, via mapeamento de Haldane [12, 13], o limite contínuo e semi-clássico do modelo de Heisenberg antiferromagnético. O mapeamento só é válido em baixas temperaturas, i.e., próximo ao estado fundamental do sistema original. Um resumo da abordagem de estados coerentes desenvolvida por Fradkin [38] para o mapeamento pode ser encontrado na dissertação de mestrado [39].

Seja a seguinte densidade lagrangeana para um campo vetorial $\vec{\varphi}(t, \vec{x})$ com N componentes $\varphi^i(t, \vec{x})$

$$L[\partial_\mu \vec{\varphi}, \partial_t \vec{\varphi}] = \alpha_i^\mu (\partial_\mu \varphi^i)^2 - \frac{1}{\nu_i^2} (\partial_t \varphi^i)^2 \quad (2.67)$$

onde o índice μ é somado nas coordenadas do vetor posição $\vec{x} = (x_1, \dots, x_M)$, com M igual à dimensão do espaço, enquanto i é somado em $i = 1, 2, \dots, N$, de acordo com a dimensão N do espaço interno do campo. Ainda, α_i^μ e ν_i são parâmetros específicos da teoria onde o modelo será aplicado.

No caso isotrópico, onde $\alpha_i^\mu = \alpha$ e $\nu_i = \nu$, ajusta-se as constantes de modo a escrevermos a densidade lagrangeana de forma mais simplificada como

$$L[\partial_\mu \vec{\varphi}] = \frac{1}{2g} (\partial_\mu \varphi^i) (\partial^\mu \varphi^i) \quad (2.68)$$

onde agora μ é somado sobre as coordenadas do vetor espaço-tempo $x = (x_0 = ct, \vec{x})$ e a notação covariante da derivada indica que as derivadas espaciais têm o sinal negativo. A constante c representa uma velocidade típica do modelo.

O MSNL consiste na quebra da linearidade das equações de Euler-Lagrange, resultantes de (2.68), devida ao vínculo $\vec{\varphi}^2 = 1$ no módulo do campo. O vínculo é introduzido via multiplicadores de Lagrange na densidade lagrangeana, que fica

$$L[\partial_\mu \vec{\varphi}, \vec{\varphi}, \lambda] = \frac{1}{2g} (\partial_\mu \varphi^i) (\partial^\mu \varphi^i) + \lambda (\vec{\varphi}^2 - 1) \quad (2.69)$$

onde $\lambda(x)$ é o campo escalar multiplicador de Lagrange.

Assumindo as seguintes condições assintóticas no campo $\vec{\varphi}$ e suas derivadas

$$\vec{\varphi}(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0 \quad (2.70)$$

$$\partial_\mu \vec{\varphi}(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0 \quad (2.71)$$

o comportamento do modelo é obtido levando sua densidade lagrangeana Eq. (2.69) no funcional integral de caminho, definido como

$$Z = \int \int D\vec{\varphi} D\lambda \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[\vec{\varphi}, \lambda]\right\} \quad (2.72)$$

onde

$$S[\vec{\varphi}, \lambda] = \int L[\partial_\mu \vec{\varphi}, \vec{\varphi}, \lambda] dx \quad (2.73)$$

é a ação do modelo.

Definimos

$$G(x, x') = -g(-\partial^2 + 2g\lambda(x))^{-1} \delta(x - x') \quad (2.74)$$

onde $\partial^2 = \partial_\mu \partial^\mu = \partial_0^2 - \vec{\nabla}^2$ é o laplaciano covariante.

Em teoria de campos, a função de Green (ou propagador) é obtida introduzindo-se um acoplamento com um campo fictício $\vec{J}(x)$ através da adição do termo $\vec{J} \cdot \vec{\varphi}$ na densidade lagrangeana da teoria (no caso do MSNL, Eq. (2.69)). A função de Green é então dada pela equação

$$G(x, x') = \frac{i\hbar}{Z[\vec{J}]} \frac{\delta^2 Z[\vec{J}]}{\delta \vec{J}(x) \delta \vec{J}(x')} \Big|_{\vec{J}=0} \quad (2.75)$$

onde $\vec{J}(x)$ é tomado igual a zero no final do cálculo. Com isso, obtém-se que a função definida pela Eq. (2.74) é a função de Green do MSNL.

Mostra-se, através de uma integração por partes, que a exponencial da Eq. (2.72) é quadrática no campo $\vec{\varphi}$. A rotação para tempo imaginário $t = -i\tau$ transforma esta exponencial imaginária oscilatória em uma exponencial real decrescente. A gaussiana no campo $\vec{\varphi}$ assim obtida pode ser integrada exatamente ³.

³ O campo vetorial quadrático $\vec{\varphi}$ é integrado através de um processo limite que leva a malha contínua do espaço-tempo em uma rede hiper-cúbica de m sítios com espaçamento de rede ε ; no final do cálculo, toma-se $m \rightarrow \infty$ e $\varepsilon \rightarrow 0$ com $m\varepsilon = \text{constante}$. A convergência do limite é garantida pela introdução de uma constante de medida M_m que elimina os infinitos do processo. Uma vez que $G(x, x')$ é relacionada com um operador hermiteano através da Eq. (2.74), sua representação matricial no limite discreto, $G_{x,x'}$, é diagonalizável. A integral sobre $\vec{\varphi}$ se torna um produto de Nm integrais gaussianas desacopladas, que podem ser resolvidas exatamente uma a uma.

Resulta em Z uma ação efetiva, dependente do campo λ , dada por

$$f[\lambda] = \int dx \frac{\lambda(x)}{\rho} + \frac{1}{2} \text{Tr}[\ln(G^{-1}(x, x'))] \quad (2.76)$$

tal que

$$Z = \int D\lambda \exp\{-Nf[\lambda]\} \quad (2.77)$$

onde definimos o parâmetro $\rho = \hbar N$. A função $G^{-1}(x, x')$ é a inversa do propagador que satisfaz:

$$\int dx'' G(x, x'') G^{-1}(x'', x') = \delta(x - x') \quad (2.78)$$

A ação efetiva não é quadrática no campo λ e, portanto, não gera integrais gaussianas exatamente solúveis. Utiliza-se a aproximação semi-clássica ($\hbar \rightarrow 0$) que consiste em expandir a ação em torno de sua solução clássica λ_c e tomar termos somente até segunda ordem no desvio $\delta\lambda = \lambda - \lambda_c$. Esta aproximação é justificada a partir do Princípio de Hamilton [40], segundo o qual λ_c é um ponto extremo (ou ponto de sela) da ação $f[\lambda]$, ou seja:

$$\left. \frac{\delta f[\lambda]}{\delta \lambda(x)} \right|_{\lambda=\lambda_c} = 0 \quad (2.79)$$

Assim, no limite clássico, somente as soluções próximas a λ_c contribuem para a integral de caminho e a ação pode ser tomada, em boa aproximação, até segunda ordem em $\delta\lambda$. Com isso, recaímos em integrais gaussianas que sabemos resolver.

A condição de ponto de sela (2.79), juntamente com a expressão abaixo, obtida da Eq. (2.74),

$$\frac{\delta G(x, x')}{\delta \lambda(x'')} = 2G(x, x'')G(x, x') \quad (2.80)$$

aplicadas à Eq. (2.76), levam à equação para o *gap* do MSNL:

$$\frac{1}{\rho} = G_0(0) \quad (2.81)$$

Na Eq. (2.81), G_0 é a função de Green calculada no ponto de sela $\lambda(x) = \lambda_c$ da Eq. (2.74) euclidiana⁴.

⁴ Coerentemente com a rotação para tempo imaginário, o laplaciano covariante ∂^2 na Eq. (2.74) é substituído pelo laplaciano euclidiano $\partial^2 = \partial_\tau^2 + \vec{\nabla}^2$.

No ponto de sela, G_0 é função apenas da diferença $x - x'$, i.e., $G_0(x, x') = G_0(x - x')$. Isto permite a definição da transformada de Fourier de $G_0(x - x')$. A rotação de Wick $t = -i\tau$ motiva a identificação entre o funcional integral de caminho e a função partição do sistema no limite clássico⁵. Como argumentado na seção 2.1, em temperaturas finitas, τ varia dentro do intervalo finito $[0, \hbar\beta]$, o que o distingue das coordenadas espaciais do vetor $\vec{x} = (x_1, \dots, x_M)$, definidas para todo \mathfrak{R} . Isto implica que $G_0(x_0 - x'_0, \vec{x} - \vec{x}')$ admite transformada de Fourier em $(\vec{x} - \vec{x}')$ enquanto a dependência em $(x_0 - x'_0)$ requer uma série de Fourier. Da Eq. (2.74) euclidiana, temos

$$G_0(x_0 - x'_0, \vec{x} - \vec{x}') = \frac{\tilde{g}}{\beta} \sum_n \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^M} \frac{e^{i[\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}') + k_n(x_0 - x'_0)]}}{\vec{k}^2 + k_n^2 + \Delta^2} \quad (2.82)$$

onde $\tilde{g} = g/2c\hbar$, $\Delta^2 = -2g\lambda_c$, $ck_n = \omega_n$ e $\omega_n = n\pi/\hbar\beta$ são as frequências discretas de Matsubara.

A expressão (2.82) para G_0 , empregada na Eq. (2.81), gera a seguinte equação para o *gap* Δ

$$\frac{2}{\rho g} = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^M} \frac{\coth[B(\vec{k}^2 + \Delta^2)^{1/2}]}{(\vec{k}^2 + \Delta^2)^{1/2}} \quad (2.83)$$

onde $B = c\hbar\beta/2$.

O *gap* do modelo 1D em $T = 0$ é obtido como limite da expressão anterior quando $T \rightarrow 0$ e, para $M = 1$, é dado por

$$\Delta_0 = 2\Lambda \exp\left(-\frac{2\pi}{Ng\hbar}\right) \quad (2.84)$$

onde Λ é um parâmetro de corte introduzido na integração em k para assegurar sua convergência. Este procedimento de “renormalização” se justifica quando da aplicação do modelo em matéria condensada já que a existência de um espaçamento de rede a introduz um corte natural no espaço recíproco do sistema. Assim, aqui $\Lambda \sim 1/a$. A Eq. (2.84) foi obtida no limite de $\Lambda \gg \Delta_0$.

A atribuição de valores às constantes da Eq. (2.84), guiada por sua relação com parâmetros microscópicos do sistema, não prediz quantitativamente Δ_0 em concordância com os valores experimentais ou numéricos conhecidos para antiferromagnetos unidimensionais. Simulações numéricas

⁵ Esta identificação é a base para uma descrição estatística de modelos de teoria de campos: o cálculo de suas grandezas termodinâmicas parte da integral de caminho da mesma forma que a função de partição é a matéria prima para obtenção destas grandezas na teoria clássica.

[41] preveem $\Delta_0 = 0.41J$ para uma cadeia AFM de spin-1, em unidades do parâmetro de troca J . Em particular, o corte na Eq. (2.84) carrega o efeito da aplicação de uma teoria manifestamente contínua em um sistema discreto e não pode ser estimado numericamente com precisão. De qualquer maneira, uma vez que o mapeamento de Haldane prediz $g = 2/S$ para $\hbar = 1$ [42], o modelo é capaz de reproduzir o comportamento qualitativo esperado $\Delta_0 \propto e^{-\pi S}$, para $N = 1$ [41]. Na verdade, até o presente momento, nenhuma aproximação analítica, incluindo o MSNL, é capaz de prever quantitativamente Δ_0 em função de parâmetros microscópicos. Em geral, o que se obtém são expressões para temperatura finita, envolvendo razões como $\Delta(T)/\Delta_0$.

Definindo o *gap* reduzido e a temperatura reduzida respectivamente como

$$\delta = \frac{\Delta}{\Delta_0} \quad (2.85)$$

$$t = \frac{T}{\Delta_0} \quad (2.86)$$

o cálculo da Eq. (2.83), em T finita com $M = 1$, leva à expressão transcendental em δ

$$\ln[\delta(t)] = 2 \sum_{n=1}^{\infty} K_0(n\gamma \frac{\delta(t)}{t}) \quad (2.87)$$

onde γ é uma constante e K_0 é a função de Bessel modificada.

Os limites de interesse da Eq. (2.87) geram os seguintes resultados [41]:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \Delta(T) = \Delta_0 + \sqrt{2\pi\Delta_0 T} e^{-\Delta_0/T} \quad (2.88)$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \Delta(T) = \frac{\pi T}{\ln(\frac{\pi T}{\Delta_0})} \quad (2.89)$$

O *gap* do MSNL é obtido em função da temperatura a partir da função de Green de ordem zero, calculada no ponto de sela do modelo. A dinâmica do MSNL é extraída do cálculo das ordens superiores da função de Green, complementando a informação de natureza estática fornecida pelo *gap*. A grandeza relevante para a dinâmica é dada pela largura de linha do modelo, obtida através da parte imaginária da função de Green, que só aparece acima da aproximação de ordem zero. A função relaxação do modelo - conexão entre teoria e experimento pois pode ser obtida através de medidas de espalhamento de neutrons, EPR e NMR - também é obtida pelo cálculo da parte imaginária da função de Green.

Para o cálculo da função de Green para além da ordem zero, usamos a Eq. (2.75) com o acoplamento linear entre o campo sigma e o campo fictício $\vec{J}(x)$ na densidade lagrangeana (2.69). A integração do campo quadrático $\vec{\varphi}(x)$ gera uma ação efetiva $f[\lambda, \vec{J}]$ que, expandida até segunda ordem em torno de seu ponto de sela $\lambda(x) = \lambda_c$, gera uma exponencial gaussiana. Por fim, uma última integração resulta em uma expressão aproximada para $Z[\vec{J}]$. Levando o resultado na Eq. (2.75), obtemos a correspondente expressão de segunda ordem para $G(x, x') = G(x - x')$ que será utilizada no cálculo da auto-energia do modelo segundo a equação de Dyson, apresentada na seção 2.1.

Seguindo-se este caminho, nesta ordem da aproximação, a auto-energia do (1+1)-MSNL é dada, no espaço recíproco, por [42]:

$$\Sigma(k) = \int \frac{d^2 k'}{(2\pi)^2} \frac{[G_0(k + k') - G_0(k')]}{\Pi(k')} \quad (2.90)$$

A função de Green $\Pi(k')$ é associada ao campo multiplicador de Lagrange $\lambda(x)$, sendo dada por [42]:

$$\Pi(k') = \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} G_0(k + k') G_0(k) \quad (2.91)$$

A parte imaginária da auto-energia coincide com a parte imaginária da função de Green e, portanto, é a base para o cálculo da função relaxação e da largura de linha. Até onde sabemos, resultados analíticos ou numéricos para estas grandezas do MSNL ainda não foram apresentados, sendo uma parte a ser complementada no estudo da dinâmica do modelo.

O mapeamento do modelo discreto de Heisenberg AFM em um modelo contínuo introduz a existência de um termo topológico de Hopf [12, 13, 38, 39]. Este mapeamento parte da existência de uma ordem de Nèel local, de curto alcance, para o estado fundamental do antiferromagneto. Em uma dimensão, o termo topológico se anula para o caso de spins inteiros e o modelo de Heisenberg recai no MSNL cuja geração de *gap* (massa) em $T = 0$ prevê um estado fundamental desordenado para estes antiferromagnetos. De fato, segundo o Teorema de Goldstone [43], a presença de mágnons massivos restaura a simetria de rotação dos spins, provocando o desordenamento global do sistema.

Apesar da ordem local, o estado de Nèel não representa o estado fundamental de antiferromagnetos de spin inteiro ⁶.

No caso 1D de spins semi-inteiros, temos o MSNL mais o termo topológico [44]. Uma interpretação possível para o estado fundamental não massivo destes sistemas é que o termo topológico destrói o *gap* do modelo. Este fato, intrínseco ao mapeamento, é a base da conhecida conjectura de Haldane que generaliza para sistemas AFM 1D o seguinte: “cadeias AFM de spin inteiro são massivas enquanto as de spin semi-inteiro apresentam massa nula.” Na verdade, antes de ser uma proposição rigorosa no âmbito do MSNL, esta generalização se fortalece somente através de abordagens interiores ao modelo de Heisenberg original que preveem a coexistência de um estado fundamental de *gap* nulo com a ausência de ordem de longo alcance em cadeias AFM de spin-1/2, como discutido na seção anterior.

Em dimensões superiores a 1, o termo topológico se anula para os antiferromagnetos mais tradicionais e a distinção entre spins inteiros e semi-inteiros desaparece, sendo ambos os casos mapeados no MSNL. Entretanto, em $D = 2$ por exemplo, o papel das flutuações quânticas é meramente o de renormalizar a constante de acoplamento e o modelo se encontra no regime clássico (renormalizado) com estado fundamental de Nèel [45, 46]. De fato, o MSNL2D apresenta *gap* nulo em $T = 0$. O *gap* surge, restaurando a simetria, apenas para temperaturas não nulas, de acordo com o teorema de Mermin-Wagner [47]. Por outro lado, simulações de Monte Carlo Quântico [48, 49, 50] mostram que, em $D = 2$ e para $S = 1/2$, o MSNL recupera as propriedades do hamiltoniano de Heisenberg AFM somente para temperaturas extremamente baixas. Some-se a isto o fato de que o MSNL2D não é mapeado no hamiltoniano de Heisenberg AFM 2D a partir de $S \geq 1$ [51], e somos levados a concluir que, em dimensões superiores a 1, a abordagem do MSNL é muito limitada, não sendo vantajosa nestes casos.

⁶ O MSNL é uma aproximação semi-clásica onde os spins, entidades quânticas, são representados por campos vetoriais. Um estado desordenado do modelo, correspondente a vetores apontando em direções aleatórias, deve ser interpretado quanticamente como tendo comprimento de correlação finito entre os valores dos spins. Igualmente, um estado ordenado, onde os vetores estão todos alinhados, corresponde a comprimento de correlação infinito. De fato, tem-se que o comprimento de correlação obedece $\xi = \Delta_0^{-1}$ [39].

Além do mais, são exatamente as peculiaridades do estado fundamental dos antiferromagnetos 1D que motivam a busca por métodos alternativos, como o MSNL, na abordagem destes sistemas. A distinção qualitativa imposta por Haldane entre spins inteiros e semi-inteiros, embora inicialmente chocante para a comunidade científica (e talvez por isso mesmo), aumentou a atratividade da pesquisa em antiferromagnetismo quântico. O mapeamento em um modelo que restaura a simetria em $T = 0$ sugere que o antiferromagnetismo exibe excitações topológicas notáveis, fenômeno que imediatamente atrai o interesse dos físicos teóricos.

3. MODELO SIGMA NÃO LINEAR ACOPLADO COM UM RUÍDO

3.1 Apresentação e Motivação

O método de Matsubara para introdução de temperatura em modelos de teoria de campos foi discutido na seção 2.3, no contexto do MSNL. Baseia-se na correspondência entre o funcional integral de caminho da teoria quântica de campos e a função de partição da mecânica estatística clássica. Ou seja, o comportamento térmico do modelo é extraído através da prescrição de Boltzmann para tratar flutuações de temperatura em sistemas macroscópicos.

Tecnicamente, quando passamos das variáveis de espaço-tempo para momento-frequência, a prescrição de Boltzmann prediz transformações distintas para temperatura nula e temperaturas finitas ($\neq 0$). Em $T = 0$, a variável $\tau - \tau'$ varia de $-\infty$ a ∞ , admitindo uma transformada de Fourier em pé de igualdade com as coordenadas espaciais; as frequências correspondentes são variáveis contínuas. Ao contrário, em temperaturas finitas, a transformação de $\tau - \tau'$ via série de Fourier gera as frequências discretas de Matsubara. Estas, apresentando dependência linear em T , geram o comportamento termodinâmico das quantidades físicas do modelo.

Existem muitos trabalhos teóricos, baseados na abordagem padrão para a termodinâmica, a respeito da dependência do *gap* do MSNL com a temperatura. Comparações com dados experimentais [52, 53] da cadeia AFM de spin-1 mostram que, no regime das baixas temperaturas, o MSNL1D é uma boa descrição para tais sistemas. Aqui, sugerimos que os efeitos da temperatura no MSNL podem ser satisfatoriamente representados pelo acoplamento do sistema com um campo externo estocástico, remetendo à abordagem de Langevin para o estudo das flutuações em sistemas físicos [54].

Em temperaturas suficientemente baixas, é razoável pensar nas flutuações térmicas como perturbações no modelo em $T = 0$. Assim, nosso raciocínio é seguir o cálculo padrão para $T = 0$, acreditando que a introdução de um ruído dependente da temperatura seja capaz de repro-

duzir o comportamento térmico da cadeia AFM de spin-1, onde aplicaremos o modelo. Além do mais, nosso método é sustentado pela descrição estocástica das flutuações em sistemas macroscópicos através da equação mestra [55]¹.

Do ponto de vista do mapeamento de Haldane [12, 13], o acoplamento do MSNL1D com uma fonte de ruído é análogo à introdução um campo *staggered* com determinadas propriedades estocásticas no modelo de Heisenberg correspondente. Em suma, sugerimos um modelo efetivo para o comportamento térmico do MSNL1D que possa ser útil para aplicação em cadeias AFM de spin inteiro.

3.2 O Modelo

A densidade lagrangeana do MSNL na presença de um campo externo $\vec{A}(x)$ é dada pela Eq. (2.69) adicionada do termo de acoplamento $\vec{A} \cdot \vec{\varphi}$:

$$L[\partial_\mu \vec{\varphi}, \vec{\varphi}, \lambda, \vec{A}] = \frac{1}{2g} (\partial_\mu \varphi^i) (\partial^\mu \varphi^i) + \lambda (\vec{\varphi}^2 - 1) + \vec{A} \cdot \vec{\varphi} \quad (3.1)$$

Tomamos o campo externo $\vec{A}(x)$ como um ruído branco cujas propriedades estatísticas satisfazem a fenomenologia das flutuações térmicas que atuam sobre o sistema. São elas:

$$\langle \vec{A}(x) \rangle = 0 \quad (3.2)$$

$$\langle A^i(x) A^j(x') \rangle = 2\Gamma k_B T \delta(x - x') \delta_{ij} \quad (3.3)$$

O fator $2\Gamma k_B T$ é uma medida da intensidade do ruído de modo que, para baixas temperaturas, ele funciona como uma perturbação no sistema em $T = 0$ (k_B é a constante de Boltzmann). No método de Langevin usual, o “teorema de flutuação-dissipação” implica que Γ é uma constante de amortecimento [55].

Aqui, uma diferença fundamental entre nossa abordagem e a descrição de Langevin torna-se evidente: nossa equação de movimento para $\vec{\varphi}$ não inclui o termo de dissipação. De fato, tal termo geraria um potencial dependente da velocidade na densidade lagrangeana (3.1). Certamente, este

¹ A equação mestra, quando não resolvida exatamente, é tratada via uma expansão sistemática em termos de um parâmetro de escala do sistema. Esta é a base para a existência de uma descrição macroscópica e determinística para sistemas intrinsecamente estocásticos. Justifica, como primeira aproximação, o tratamento padrão em termos de uma equação determinística com ruído adicionado, como na abordagem de Langevin. Finalmente, a aproximação mais baixa na expansão implica que o ruído seja gaussiano, definitivamente legitimando a aplicação em flutuações térmicas.

potencial transformaria o modelo em um problema significativamente mais complicado. Ora, a proposta mesma desta abordagem é investigar se a densidade lagrangeana (3.1), tal como apresentada, é suficiente para reproduzir a fenomenologia térmica da cadeia AFM de spin-1. Assim, tomaremos a constante Γ na Eq. (3.3) como um mero parâmetro, não relacionado, em princípio, a uma força dissipativa, como exigiria o teorema de dissipação-flutuação. Um cenário físico coerente com a ausência de amortecimento corresponde a flutuações causadas principalmente por colisões elásticas, portanto não dissipativas, dos mágnons com outras excitações do sistema. Em outras palavras, parece razoável considerar que, em temperaturas suficientemente baixas, a perturbação causada pelo ruído tenha efeito essencialmente difusivo, sendo desprezíveis os efeitos inelásticos dissipativos.

A partir de considerações elementares - em particular o ilimitado aumento da amplitude de movimento de um oscilador não amortecido sujeito a um ruído - a energia média do sistema definido pelas Eqs. (3.1)-(3.3) deve crescer indefinidamente, ao invés de atingir o equilíbrio térmico. Pelo menos no regime de baixas temperaturas, a aproximação de ponto de sela aqui empregada parece ser imune a esta fato. Para um valor de Γ adequadamente escolhido, a situação de equilíbrio pode ser reconciliada, gerando resultados físicos razoáveis mesmo na ausência de amortecimento.

É informativo mencionar aqui que, para nossos objetivos, é suficiente considerarmos as propriedades estocásticas (3.2) e (3.3) sem nos preocuparmos com a forma específica da distribuição de probabilidade de $\vec{A}(x)$. Na verdade, não usamos explicitamente o fato de que flutuações térmicas, sendo variáveis estocásticas independentes, têm distribuição de probabilidade gaussiana, como requer o teorema do limite central [55]. Este fato é necessário exclusivamente para a legitimação do método no contexto da equação mestra.

Definimos o campo

$$\vec{\varphi}(x) = \vec{\varphi}(x) - \int dx' G(x, x') \vec{A}(x') \quad (3.4)$$

onde $G(x, x')$ é a função de Green dada pela Eq. (2.74) para o MSNL puro (sem campo externo) e $\vec{\varphi}(x)$ obedece as mesmas condições (2.70) e (2.71) válidas para o campo original.

Observando que $D\vec{\varphi} = [\partial\vec{\varphi}/\partial\vec{\varphi}]D\vec{\varphi} = D\vec{\varphi}$, onde $[\partial\vec{\varphi}/\partial\vec{\varphi}] = 1$ é o jacobiano da transformação (3.4), o campo $\vec{\varphi}$ pode ser integrado através do mesmo procedimento usado na seção 2.3 para o campo $\vec{\varphi}$.

A ação efetiva resultante é dada por

$$f[\lambda, \vec{A}] = \int dx \left[\frac{\lambda(x)}{\rho} + \frac{i}{2\rho} \int dx' \vec{A}(x) \cdot G(x, x') \vec{A}(x') \right] + \frac{1}{2} \text{Tr}[\ln(G^{-1}(x, x'))] \quad (3.5)$$

tal que:

$$Z[\vec{A}] = \int D\lambda \exp\{-Nf[\lambda, \vec{A}]\} \quad (3.6)$$

3.3 Gap

O *gap* será obtido através da condição de ponto de sela (2.79) sobre $f[\lambda, \vec{A}]$. A fim de extraírmos o comportamento térmico do modelo, o caráter estocástico de \vec{A} deve ser levado em consideração. A média tomada sobre a condição de ponto de sela, juntamente com as propriedades (3.2) e (3.3) do campo \vec{A} , leva à equação para o *gap* do MSNL acoplado com um ruído

$$\frac{1}{\rho} = G_0(0) \left[1 - i \frac{(2\Gamma K_B T)}{\rho} \int dx G_0(x - x') \right] \quad (3.7)$$

onde G_0 é a função de Green calculada no ponto de sela da Eq. (2.74) euclidiana.

Neste ponto, a diferença técnica entre a prescrição de Boltzmann para a introdução da temperatura no MSNL e o método estocástico se torna evidente. O comportamento térmico do modelo acoplado com ruído decorre da média sobre as equações, trazendo à tona as propriedades estocásticas do campo externo. Este é tomado como uma perturbação no modelo em $T = 0$, para o qual $\tau_f \propto 1/(K_B T)$ implica $\tau - \tau'$ variando de $-\infty$ a $+\infty$, em pé de igualdade com as coordenadas espaciais, ao contrário do que acontece na seção 2.3 que levou à Eq. (2.82).

Aqui, a transformada de Fourier no espaço-tempo gera a seguinte expressão para G_0

$$G_0(x, x') = G_0(x - x') = g \int \frac{dk}{(2\pi)^{M+1}} \frac{e^{ik(x-x')}}{k^2 + \Delta^2} \quad (3.8)$$

onde $k = (\omega/c, \vec{k})$ é o vetor no espaço recíproco, $M + 1$ sua dimensão e $\Delta^2 = -2g\lambda_c$.

Substituindo esta expressão para G_0 na Eq. (3.7), obtemos

$$\frac{4\pi}{\rho g} = \ln \left(\frac{\Lambda'^2 + \Delta^2}{\Delta^2} \right) \left(1 - ig^* \frac{T}{\Delta^2} \right) \quad (3.9)$$

onde $g^* = 2\Gamma k_B g / \rho$ e a constante $\Lambda' \equiv |k|_{max}$ é o parâmetro de corte introduzido para a convergência da integral dupla ($M = 1$) no plano ($\omega/c, k_1$). Como discutido na seção 2.3, o corte aparece naturalmente quando o modelo é aplicado em sistemas cristalinos já que, neste caso, a separação finita entre os sítios da rede restringe k_1 à primeira zona de Brillouin do cristal.

A Eq. (3.9) fornece o seguinte resultado para o *gap* do MSNL1D em $T = 0$

$$\Delta_0 = \Lambda' \exp\left(-\frac{2\pi}{Ng\hbar}\right) \quad (3.10)$$

no limite de $\Lambda' \gg \Delta_0$. O resultado da Eq. (2.84), obtido para o limite análogo, i.e., quando o respectivo parâmetro de corte $\Lambda \gg \Delta_0$, é recuperado se $\Lambda' = 2\Lambda$. O fato esperado de que, para temperatura nula, o MSNL acoplado com um ruído recaia no MSNL puro é evidenciado já na Eq. (3.7), que se iguala à Eq. (2.81) em $T = 0$.

Definimos *gap* reduzido e a temperatura reduzida como nas Eqs. (2.85) e (2.86). Em unidades tais que $K_B = 1$, Δ_0 pode ser dada em Kelvins de modo que t , assim como δ , seja uma variável adimensional. Em termos destas novas variáveis e aplicando o limite $\Lambda' \gg \Delta$, a Eq. (3.9) pode ser reescrita, até primeira ordem em T , como

$$\delta^2(t) = \exp\left[-i\gamma\frac{t}{\delta^2(t)}\right] \quad (3.11)$$

onde

$$\gamma = \frac{8\pi\Gamma}{(N\hbar)^2\Delta_0} \quad (3.12)$$

é uma constante que será tomada como um parâmetro de ajuste entre a Eq. (3.11) e os dados experimentais.

Em princípio, a partir do valor ajustado para γ , podemos obter o parâmetro de ruído Γ se pudermos lidar com as outras constantes envolvidas na Eq. (3.12). Felizmente, inferências quantitativas serão evitadas uma vez que o tratamento da largura de linha fará de Γ um parâmetro de ajuste. Desta forma, será possível atribuir-lhe um valor razoável, independente de considerações explícitas a respeito das constantes do modelo.

Uma inspeção da Eq. (3.11) mostra que $\delta(t)$ é uma quantidade complexa. Sua parte real fornece a massa reduzida, $m(t)$, das quasi-partículas relacionadas ao modelo - mágnons no caso de aplicação em cadeias AFM de spin inteiro. A parte imaginária é relacionada a um tempo de vida

finito para tais excitações, tratado detalhadamente na próxima seção para o cálculo da largura de linha.

A Eq. (3.11) é transcendental em $\delta^2(t)$, não podendo ser resolvida analiticamente. Tratando a equação numericamente, obtemos a curva correspondente a $m(t)$ através da parte real da solução. A linha contínua da Fig. 3.1 mostra a massa reduzida m em função da temperatura reduzida t prevista pelo nosso modelo. A massa reduzida permanece praticamente constante, igual a 1, até aproximadamente $t = 0.1$, quando começa a crescer quase linearmente com a temperatura reduzida. Este é, de fato, o comportamento qualitativo esperado para o MSNL [41]. Os dados experimentais, reportados por Sakaguchi *et al.* [52], foram obtidos via espalhamento inelástico de nêutrons no composto Y_2BaNiO_5 , considerado o melhor candidato para reproduzir cadeias AFM de spin-1. O melhor ajuste entre a teoria e a experiência é obtido quando $\gamma = 1.36$.

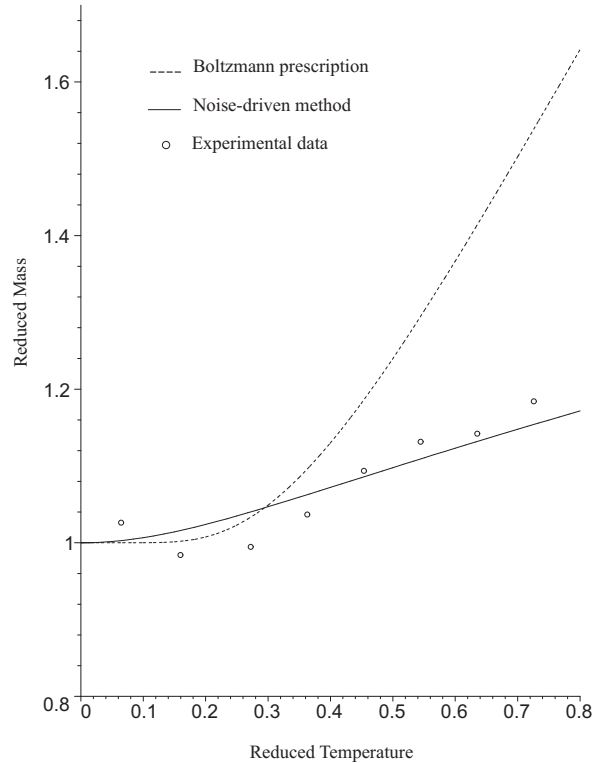


Fig. 3.1: Massa reduzida *versus* temperatura reduzida do MSNL acoplado com um ruído. A curva concorda satisfatoriamente com os dados experimentais para Y_2BaNiO_5 [52] quando $\gamma = 1.36$. A linha tracejada é a previsão de Boltzmann para a massa reduzida do MSNL puro, dada pela Eq. (2.88).

A expressão assintótica ($t \rightarrow 0$) para a massa reduzida do MSNL puro na prescrição de Boltzmann, obtida da Eq. (2.88), é: $m(t) = 1 + (2\pi t)^{1/2} \exp(-1/t)$.

A linha pontilhada na Fig. 3.1 mostra que esta curva começa a subir mais rápido que os resultados experimentais desde $t \approx 0.4$, em contraste com o que ocorre para o MSNL acoplado com ruído. Além do mais, acreditamos que os cálculos envolvidos são mais simples no modelo estocástico. De fato, a prescrição de Boltzmann requer algum esforço algébrico extra envolvendo séries, funções de Bessel modificadas, além de várias aproximações.

Em resumo, pelo menos no regime de baixas temperaturas, onde o MSNL é válido para cadeias AFM de spin inteiro, o modelo acoplado com um ruído térmico gera uma dependência da massa com a temperatura coerente com a fenomenologia esperada. A existência de um parâmetro livre na teoria permite a reconciliação com a situação de equilíbrio mesmo na ausência de um termo dissipativo.

Do ponto de vista do mapeamento de Haldane [12, 13], o acoplamento linear do campo sigma com uma fonte externa equivale ao acoplamento dos operadores de spin com um campo *staggered*, definido anti-paralelamente em cada sítio da cadeia. Este campo costuma ser identificado com um campo cristalino efetivo sobre cada spin. No caso da fonte externa no MSNL ter as propriedades estocásticas (3.2) e (3.3), o cenário físico equivalente seria o de um campo cristalino sob o efeito de flutuações térmicas. Como mostram nossos resultados, este cenário parece satisfatório para descrever o comportamento térmico da energia dos mágnons na cadeia AFM de spin-1, a baixa temperatura. É como se o banho térmico, normalmente inserido implicitamente pela estatística de Boltzmann, pudesse ser explicitamente contemplado através do seu efeito sobre o campo cristalino, que adquire propriedades de um ruído branco.

3.4 Largura de linha

Neste ponto surge a segunda distinção entre o modelo estocástico e a prescrição de Boltzmann para a introdução da temperatura no MSNL. Como mostrado na seção anterior, a Eq. (3.11) é complexa. A parte imaginária do *gap* é associada a uma largura de linha do modelo que, por sua vez, é inversamente proporcional ao tempo de vida de suas excitações elementares. A aproximação de ponto de sela aplicada ao MSNL na prescrição de Boltzmann não gera uma parte imaginária correspondente para o *gap*; nesta aproximação o sistema se comporta como um gás de partículas livres. Ao desprezarmos as interações, produzimos excitações com tempo

de vida infinito. Em contraste, o modelo estocástico implica em um tempo de vida finito mesmo na aproximação de ponto de sela.

Para a aplicação em cadeias AFM de spin inteiro, as interações entre mágnons são contempladas pelo termo $\lambda(x)\varphi^2$ da densidade lagrangeana (2.69), que no MSNL puro fornece a única fonte de decaimento. O ponto de sela desconsidera esta fonte já que, nesta aproximação, $\lambda(x) = \lambda_c$ é constante. Entretanto, no MSNL acoplado com um ruído, a interação com o campo $\vec{A}(x)$ introduz um canal de decaimento adicional, além das interações do tipo mágnon-mágnon. Neste contexto, o ponto de sela, cego para efeitos de decaimento oriundos das interações entre mágnons, não pode ignorar os efeitos explicitamente introduzidos pelo acoplamento com o campo cristalino efetivo dotado de propriedades térmicas.

Do ponto de vista físico, é razoável esperar que o decaimento dos mágnons seja influenciado pelas flutuações térmicas as quais a rede, em temperaturas finitas, está sujeita. De fato, o decaimento de mágnons presentes em uma rede cristalina não é causado somente pelas interações do tipo mágnon-mágnon, que entram nas equações como uma contribuição de segunda ordem para o acoplamento físico original spin-spin via parâmetro de troca. Outras fontes de decaimento comuns são o acoplamento spin-spin via dipolo magnético, spin-fônon, spin-órbita, spin-campo magnético externo e spin-campo cristalino.

No que diz respeito ao tipo de decaimento abordado, nosso método pode ser visto como uma descrição conjunta para o acoplamento spin-campo cristalino e spin-fônon, quando consideramos a difusão de fônons na rede como uma medida da atividade térmica do sistema. O acoplamento do sistema magnético com tais fônons se dá, indiretamente, como uma fonte de flutuação para o campo cristalino. Os mágnons do sistema adquirem um tempo de vida finito como consequência deste efeito coletivo. Recorrendo a um certo abuso de linguagem, daqui para frente nos referiremos ao ruído genericamente como sendo um “banho térmico” e à largura de linha correspondente como uma “largura de linha térmica”, enfatizando o caráter térmico do campo externo sobre seu caráter cristalino.

A fim de analisar consistentemente o decaimento de mágnons no MSNL acoplado com o banho térmico, esta seção se dedica ao cálculo da largura de linha levando em consideração todas as contribuições para efeitos de decaimento existentes no modelo. Para tal, calcularemos a função de Green do MSNL acoplado com o ruído, $G_R(x, x')$, para além do ponto de sela.

Obteremos $G_R(x, x')$ via introdução de um campo fictício, digamos $\vec{J}(x)$, que se acopla linearmente com o campo $\vec{\varphi}(x)$, exatamente como $\vec{A}(x)$. Temos:

$$G_R(x, x') = \frac{i\hbar}{Z[\vec{A}, \vec{J}]} \frac{\delta^2 Z[\vec{A}, \vec{J}]}{\delta \vec{J}(x) \delta \vec{J}(x')} \Big|_{\vec{J}=0} \quad (3.13)$$

Como o acoplamento é linear, a introdução do campo \vec{J} é, na verdade, uma tarefa trivial. A única mudança na ação efetiva (3.5) será que, ao invés de $\vec{A}(x) \cdot G(x, x') \vec{A}(x')$, teremos $(\vec{A}(x) + \vec{J}(x)) \cdot G(x, x') (\vec{A}(x') + \vec{J}(x'))$. Juntamente com a propriedade do ruído Eq. (3.3), o cálculo leva a

$$G_R = G - i \frac{A}{\rho} G^2 \quad (3.14)$$

onde, por simplicidade, tomamos

$$A = 2\Gamma K_B T \quad (3.15)$$

e a Eq. (3.14) está escrita na forma matricial.

Da Eq. (3.14) e invocando a correspondência entre a função de Green (multiplicada por $-i$) e a correlação entre os valores do campo $\vec{\varphi}$ em dois pontos diferentes do espaço-tempo, vemos que esta é reduzida sob a ação dos efeitos térmicos. Isto é coerente com a expectativa física de que as flutuações tendem a desordenar o sistema.

Fazendo uso da Eq. (3.14), a função de Green de ordem zero do MSNL acoplado com um ruído (G_{0R}) é obtida a partir de G_0 pela fórmula:

$$G_{0R} = G_0 - i \frac{A}{\rho} G_0^2 \quad (3.16)$$

A ocorrência de uma largura de linha térmica mesmo na aproximação de ponto de sela, originalmente manifestada na complexidade da Eq. (3.11), decorre naturalmente da parte imaginária da Eq. (3.16).

A auto-energia $\Sigma(x, x')$ do MSNL é definida através da forma matricial da equação de Dyson

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G \quad (3.17)$$

onde G_0 é a função de Green no ponto de sela.

Para a definição da auto-energia $\Sigma_R(x, x')$ do MSNL acoplado com um ruído, escrevemos a equação de Dyson correspondente

$$G_R = G_{0R} + G_{0R} \Sigma_R G_R \quad (3.18)$$

que, expandida iterativamente em termos de G_{0_R} e reescrita via Eq. (3.16), gera a seguinte expansão em termos de potências de G_0 :

$$G_R = G_0 - i\frac{A}{\rho}G_0^2 + G_0\Sigma_R G_0 - i\frac{A}{\rho}G_0\Sigma_R G_0^2 - i\frac{A}{\rho}G_0^2\Sigma_R G_0 + G_0\Sigma_R G_0\Sigma_R G_0 + O(G_0^4) \quad (3.19)$$

Agora, usando a Eq. (3.14) para G_R e então expandindo G em potências de G_0 , seguindo Eq. (3.17), encontramos:

$$G_R = G_0 - i\frac{A}{\rho}G_0^2 + G_0\Sigma G_0 - i\frac{A}{\rho}G_0\Sigma G_0^2 - i\frac{A}{\rho}G_0^2\Sigma G_0 + G_0\Sigma G_0\Sigma G_0 + O(G_0^4) \quad (3.20)$$

Comparando as Eqs. (3.19) e (3.20), temos

$$\Sigma_R = \Sigma \quad (3.21)$$

i.e., para G_R calculada até terceira ordem em G_0 , a auto-energia do MSNL acoplado com um ruído é igual à do MSNL puro. Da Eq. (3.20) fica claro que $G_R = G$ para $T = 0$ e, até ordem G_0^3 , a temperatura afeta a função de Green através dos termos linearmente dependentes de A .

A equação de Dyson (3.18) pode ser escrita no espaço recíproco como

$$G_R(k) = \frac{1}{G_{0_R}^{-1}(k) - \Sigma(k)} \quad (3.22)$$

onde $\Sigma_R(k)$ foi tomada igual a $\Sigma(k)$. Utilizaremos as expressões (2.90) e (2.91) da seção 2.3 para a auto-energia $\Sigma(k)$ do (1+1)-MSNL até ordem $1/N$.

Efeitos de decaimento se manifestam na parte imaginária do denominador da Eq. (3.22). Usando a Eq. (3.16) para G_{0_R} e depois de alguma álgebra, escrevemos a largura de linha total como

$$\begin{aligned} \Gamma(k) = & \left[\frac{N}{A} - \frac{A}{N} \frac{g^2}{(k^2 + \Delta_0^2)^2} \right]^{-1} - \frac{1}{2g} \int d^2k' \left[\frac{1}{(k+k')^2 + \Delta_0^2} - \frac{1}{k'^2 + \Delta_0^2} \right] \times \\ & \times k'^2 \left(1 + \frac{4\Delta_0^2}{k'^2} \right)^{1/2} \left[\ln^2 \left(\frac{\left(1 + \frac{4\Delta_0^2}{k'^2} \right)^{1/2} - 1}{\left(1 + \frac{4\Delta_0^2}{k'^2} \right)^{1/2} + 1} \right) + \pi^2 \right]^{-1} \end{aligned} \quad (3.23)$$

onde foi usada a relação de Feynman:

$$\frac{1}{ab} = \int_0^1 dx \frac{1}{[(a-b)x + b]^2} \quad (3.24)$$

No limite de validade da Eq. (3.21), i.e., para G_R até terceira ordem em G_0 , a Eq. (3.23) mostra que a largura de linha total se separa em uma contribuição térmica (oriunda de G_{0R}^{-1}) mais uma contribuição das interações mágnon-mágnon (oriunda de Σ). Tomando termos de ordens superiores nas expansões Eq. (3.19) e (3.20), a auto-energia do modelo estocástico Σ_R se torna uma função não trivial de Σ e A . Neste caso, a largura de linha total contém contribuições mistas do banho térmico e das interações entre mágnons.

Usando que $T = \Delta_0 t$, rescrevemos a Eq. (3.15) como

$$A = 2\Gamma\Delta_0 t \quad (3.25)$$

sob a condição $k_B = 1$ para uma temperatura reduzida adimensional. A constante Γ é o parâmetro livre a ser ajustado de acordo com os dados experimentais.

As medidas de Sakaguchi *et al.* [52] são executadas para o vetor de espalhamento (1D) $k_1 = \pi/2$, correspondente a $k_1 = 0$ no (1+1)-MSNL. Uma vez que $\omega^2 = \vec{k}^2 + M^2$ (para $c = \hbar = 1$), avaliamos Eq. (3.23) em $k = (M, 0) = (\Delta_0 m(t), 0)$. Fazendo o vetor de integração $k' = (\omega, k)$, obtemos:

$$\begin{aligned} \Gamma(t) = & \left[\frac{N}{2\Gamma\Delta_0} \frac{1}{t} - \frac{2\Gamma g^2}{N\Delta_0^3} \frac{t}{(m^2(t) + 1)^2} \right]^{-1} - \\ & - \frac{1}{2g} \int_{-\infty}^{+\infty} dk d\omega \left[\frac{1}{k^2 + \omega^2 + 2\Delta_0 m(t)\omega + \Delta_0^2(m^2(t) + 1)} - \frac{1}{k^2 + \omega^2 + \Delta_0^2} \right] \times \\ & \times (k^2 + \omega^2) \left(1 + \frac{4\Delta_0^2}{k^2 + \omega^2} \right)^{1/2} \left[\ln^2 \left(\frac{\left(1 + \frac{4\Delta_0^2}{k^2 + \omega^2} \right)^{1/2} - 1}{\left(1 + \frac{4\Delta_0^2}{k^2 + \omega^2} \right)^{1/2} + 1} \right) + \pi^2 \right]^{-1} \quad (3.26) \end{aligned}$$

Tomaremos $N = 3$ e $g = 2$ (em unidades de energia) já que para $\hbar = 1$ o mapeamento no MSNL prediz $g = 2/S$ [42] e estamos considerando $S = 1$. Para Δ_0 usamos o valor experimental de Sakaguchi *et al.* [52] para o composto Y_2BaNiO_5 : $\Delta_0 = 9.5 \text{ meV}$.

Depois de uma integração numérica da Eq. (3.26), traçamos a largura de linha em meV versus temperatura reduzida, como mostrado na Fig. 3.2. O melhor ajuste com os dados experimentais foi obtido para $\Gamma = 3.84 \times 10^{-2}$. Lembrando que o produto ΓT está relacionado à intensidade do ruído, o valor relativamente pequeno de Γ justifica a utilização de ΓT

como um parâmetro perturbativo para a expansão da função de Green a baixas temperaturas.

Obtivemos concordância razoável com os dados experimentais até em torno de $t = 0.55$. Acima desta temperatura, os valores experimentais superam a expectativa teórica. Uma predição mais acurada requer a avaliação de uma série perturbativa estendida para a auto-energia. Espera-se que, em temperaturas mais elevadas, os termos de ordens superiores da expansão passem a ser importantes para a largura de linha, contribuindo aditivamente de forma a aproximar a curva teórica dos dados experimentais. De qualquer maneira, já para a correção de *1-loop*, o modelo apresenta satisfatória concordância com a experiência em baixas temperaturas e com a expectativa qualitativa de uma largura de linha crescente com a temperatura. Isto aponta para a validade do método de acoplamento do MSNL com um ruído para representar o comportamento térmico de sua largura de linha.

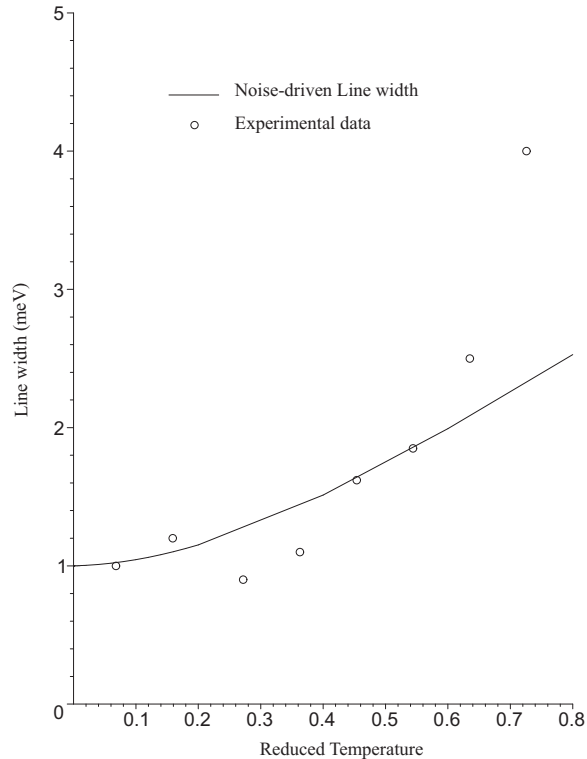


Fig. 3.2: Largura de linha *versus* temperatura reduzida do MSNL acoplado com um ruído para $\Gamma = 3.84 \times 10^{-2}$. Os dados experimentais correspondem ao composto Y_2BaNiO_5 [52].

É razoável esperar que a contribuição térmica para a Eq. (3.26) se iguale à parte imaginária da Eq. (3.11). Entretanto, as duas curvas não se sobrepõem perfeitamente quando traçadas em um mesmo gráfico. A razão para esta discordância quantitativa está na diferença dos métodos de obtenção das curvas. A parte imaginária da Eq. (3.11) resulta de uma integração, sobre a primeira zona de Brillouin, de todos os modos $k = (\omega/c, k_1)$ permitidos ao sistema. Por outro lado, a contribuição térmica para a Eq. (3.26) é avaliada para o valor experimental definido $k = (\Delta_0 m(t), 0)$. De qualquer maneira, as curvas compartilham o mesmo comportamento qualitativo: ambas zeram em $t = 0$, crescem com a temperatura e são da mesma ordem de grandeza.

A Fig. 3.3 mostra a largura de linha total do modelo, resultante da Eq. (3.26), traçada junto com a parte imaginária da Eq. (3.11). Como esperado, a contribuição térmica se anula em $t = 0$. No regime de baixas temperaturas (até aproximadamente $t = 0.2$), a diferença entre as curvas é em torno de 87 %. A medida que a temperatura aumenta, os efeitos térmicos se tornam mais significativos; todavia, até a temperatura para a qual há dados experimentais ($t = 0.8$), não excedem 18 % do total. Isto indica que, para o intervalo de temperatura no qual o MSNL representa os antiferromagnetos, as interações entre mágnons são mais significativas para os efeitos de decaimento do que suas interações com o banho térmico.

Um trabalho interessante seria comparar a largura de linha do MSNL obtida via prescrição de Boltzmann padrão com os resultados do método estocástico. Como mostrado pelas Eqs. (2.90) e (2.91), a expressão analítica para a auto-energia do modelo já foi obtida até ordem $1/N$. O cálculo da largura de linha correspondente em T finita, que requer apenas mais algum esforço algébrico e provavelmente computacional, não foi ainda apresentado na literatura. Isto ocorre possivelmente por considerar-se desfavorável o custo/benefício do esforço para obtenção de resultados quantitativos para um modelo cujo interesse é apenas qualitativo e dado por seus comportamentos limite ($T \rightarrow 0$, $T \rightarrow \infty$, etc.). Entretanto, acreditamos que tal esforço se justificaria no contexto de submeter os presentes resultados ao teste comparativo com a previsão de Boltzmann para o mesmo modelo.

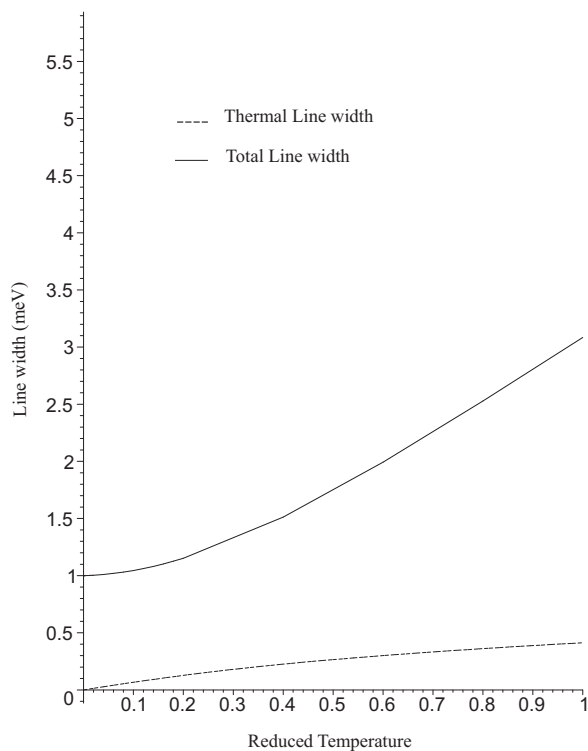


Fig. 3.3: Largura de linha térmica e largura de linha total *versus* temperatura reduzida do MSNL acoplado com um ruído. Próximo a temperatura nula, a influência das flutuações térmicas sobre os efeitos de tempo de vida é pequena, se comparada com a contribuição advinda das interações entre mágnons.

3.5 Conclusão

Este trabalho analisa a dependência com a temperatura das grandezas centrais do MSNL. A abordagem consiste em tratar os efeitos térmicos através de um ruído acoplado ao modelo e investigar a resposta do gap, da função de Green e da largura de linha a este acoplamento. Este método é uma alternativa à consagrada prescrição de Boltzmann para a introdução da temperatura em sistemas físicos. Baseia-se em utilizar um campo físico efetivo como veículo para manifestação dos efeitos das flutuações térmicas sobre o sistema. Trata-se de um modelo fenomenológico que se justifica pela comparação com a experiência.

O método proposto e a prescrição padrão remetem a cenários físicos diferentes. Em primeiro lugar, enquanto o “cenário Boltzmann” mostra um sistema em equilíbrio térmico com o banho, o “cenário estocástico” corresponde a um sistema acoplado com um ruído externo sem amortecimento. Felizmente, para temperaturas suficientemente baixas, escolhas adequadas dos parâmetros livres do modelo são capazes de recuperar a

fenomenologia de equilíbrio. Em segundo lugar, o campo externo introduz um canal de decaimento adicional, relacionado a um campo cristalino sob o efeito das flutuações térmicas do sistema. O processo de decaimento no MSNL puro, tratado via formalismo de Boltzmann, resulta unicamente das interações do tipo mágnon-mágnon, inexistindo qualquer consideração a respeito de efeitos cristalinos, tampouco térmicos.

Concluimos que o método efetivo de contemplar conjuntamente o efeito do campo cristalino e das flutuações térmicas sobre o sistema produz resultados compatíveis com nossos sistemas físicos de interesse: as cadeias AFM de spin inteiro. Em particular, para o *gap* em função da temperatura, o MSNL acoplado a um ruído adaptou-se melhor ao comportamento do composto Y_2BaNiO_5 do que a termodinâmica padrão do MSNL puro. A introdução de um campo externo no MSNL o aproxima do cenário físico real dos antiferromagnetos já que contempla o efeito do campo cristalino da rede. A inclusão da temperatura através da atribuição de propriedades estocásticas adequadas ao campo externo se mostrou, a um só tempo, fenomenologicamente satisfatória e algebricamente simples.

A própria geração de uma largura de linha, ausente no MSNL puro tratado via Boltzmann, não deixa de ser razoável em termos físicos. De fato, além do acoplamento com o campo cristalino propriamente dito, é razoável esperar que as flutuações térmicas atuando sobre o sistema ajam como um canal de decaimento para suas excitações elementares. Nosso modelo estocástico intrinsecamente considera esta possibilidade na medida em que trata o banho através de seu efeito sobre o campo cristalino, i.e., como uma fonte de decaimento. A largura de linha total mostrou satisfatória concordância com os dados experimentais já na aproximação de terceira ordem para a função de Green do MSNL acoplado com um ruído e de *1-loop* para a auto-energia.

Embora presente, a contribuição térmica veiculada pelo campo externo não gerou, dentro do limite de baixa temperatura, grande alteração quantitativa na largura de linha total. Isto é, no regime de temperatura típico da aplicação do MSNL na cadeia AFM de spin inteiro, interações entre mágnons são mais significativas para os efeitos de decaimento do que suas interações com o banho térmico. De qualquer maneira, a assim chamada “largura de linha térmica” parece ser um fenômeno real, podendo gerar efeitos de decaimento apreciáveis em temperaturas mais elevadas.

Gostaríamos de enfatizar que nosso tratamento estocástico do banho térmico não pretende confrontar a prescrição de Boltzmann, tão tradicional e teoricamente embasada. Nosso ponto é mostrar que uma hipótese simples, porém com características físicas diferentes, é capaz de reproduzir os presentes resultados. Uma vez satisfatório para o MSNL aplicado ao antiferromagnetismo 1D, em princípio, a abordagem também pode ser útil em outros modelos de teoria de campos, para os quais o tratamento de flutuações térmicas possa ser difícil através dos métodos usuais. Até então, a hipótese não é mais que um modelo válido para um caso específico. A fim de reforçar sua validade, é de fato necessário que ela seja testada para uma gama maior de situações.

Um trabalho interessante, complementar ao aqui apresentado, seria a obtenção da dinâmica do MSNL via prescrição de Boltzmann para a inclusão de temperatura. A largura de linha assim obtida pode ser comparada com o resultado do método estocástico a fim de reavaliar a adequação de métodos distintos ao mesmo modelo.

4. MODELO DE HEISENBERG ANTIFERROMAGNÉTICO ACOPLADO COM FÔNONS

4.1 Apresentação e Motivação

Como já foi dito, o hamiltoniano de Heisenberg (e seus casos particulares) fornece o substrato para o estudo de sistemas cristalinos magnéticos de vários tipos. Em particular, a introdução neste hamiltoniano do acoplamento entre os graus de liberdade elásticos e magnéticos, o chamado “acoplamento mágnon-fônon”, desempenha um importante papel na análise dos materiais magnéticos. De fato, exceto em condições muito especiais de temperatura e aparelhagem de medida, todo cristal está sempre sujeito a vibrações elásticas que interferem na dinâmica dos demais graus de liberdade do sistema e vice-versa. Nos últimos anos, o estudo desta interação se intensificou principalmente devido à possibilidade de ser o acoplamento mágnon-fônon um mecanismo relevante por trás de novos problemas, teóricos e experimentais, em física da matéria condensada [56, 57, 58, 59].

A busca pelo entendimento das excitações dos sistemas AFM 1D foi estimulada pela diferença fenomenológica entre spins inteiros e semi-inteiros, estabelecida pela discrepância em relação a ocorrência ou não do gap. Atualmente, antiferromagnetos 1D de spin inteiro na presença de campos externos, interações entre segundos vizinhos, anisotropias, etc., são abundantemente encontrados na literatura [60]. Mas, como Anderson [61] observou já em 1987, além de todas as interações anteriores, flutuações da rede acopladas com o sistema magnético também podem causar a frustração dos spins. De fato, mostra-se por primeiros princípios [62] que o estado fundamental não trivial de certos magnetos quasi-unidimensionais, geralmente aceito como devido apenas à competição entre interações FM e AFM, depende também da interação entre os mágnons e os fônons da rede. Trabalhos experimentais recentes dão suporte a esta conclusão teórica [56, 57, 63, 64, 65].

Mesmo assim, a dinâmica da cadeia AFM de spin-1 acoplada com fônons ainda não foi suficientemente explorada. No cenário ferromagnético clássico, a dinâmica de fônons para uma cadeia de Heisenberg compressível foi investigada, há 27 anos atrás, por Fizez *et al.* [66, 67] através da aproximação da fração continuada. O limite de S grande no modelo XY 1D acoplado com fônons foi tratado por Pires [68] através do método de Mori. O antiferromagneto quântico 1D de spin-1/2 acoplado com fônons desenvolve um *gap* via dimerização da cadeia, fenômeno que ficou conhecido como *efeito spin-Peierls* [25]. O modelo XY 1D de spin-1/2 sob a ação de fônons também sofre uma transição do tipo spin-Peierls que foi abordada de diferentes formas. A aproximação de fase aleatória foi utilizada por Holicki *et al.* [69] e o grupo de renormalização por Sun *et al.* [70]. Embora Schulz [71] tenha mostrado que cadeias AFM de spin inteiro não desenvolvem uma instabilidade do tipo spin-Peierls, acreditamos que o acoplamento mágnon-fônon desempenha um papel importante para a física de tais sistemas.

Em dimensões superiores a 1, o estudo do acoplamento mágnon-fônon têm sido desenvolvido de várias maneiras. Em magnetos bidimensionais, por exemplo, o método da função de Green foi aplicado dentro do maquinário do modelo de Heisenberg FM [72, 73, 74] e do modelo s-d [75]. O hamiltoniano de Heisenberg AFM também foi estudado [58, 59].

Além de somar à base conceitual do fenômeno magneto-elástico em baixas dimensões, a análise do acoplamento mágnon-fônon no antiferromagneto 1D de spin-1 também contribui para o entendimento dos novos comportamentos da matéria observados experimentalmente. A supercondutividade de alta temperatura de transição é provavelmente o exemplo mais proeminente neste cenário [76]. O estudo de sistemas 1D deve ser considerado como um passo importante para a explicação dos sistemas AFM 2D cuja criticalidade na geração de líquidos de spin tem mostrado íntima conexão com a transição supercondutora, em temperaturas elevadas, de alguns cupratos [59]. O estudo da dinâmica do antiferromagneto 1D de spin-1 acoplado com fônons é o objeto deste capítulo.

4.2 O Modelo

A interação entre os graus de liberdade vibracionais e magnéticos da rede reside no fato de que o parâmetro de troca J_{ij} entre os sítios magnéticos é função da distância r_{ij} entre eles; quando a rede vibra, J_{ij} varia. Tomando $J_{ij} = J(r_{ij})$ no hamiltoniano da Eq. (2.59), contemplamos a possibilidade de que os mágnons gerados pelas excitações magnéticas do sistema possam se acoplar com os fônons oriundos das excitações elásticas.

Como primeiro problema, trataremos o caso isotrópico e com interações apenas entre primeiros vizinhos. Nosso hamiltoniano é então dado por:

$$H = \sum_{viz} J(r_{ij}) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (4.1)$$

Seja \vec{a}_{ij} o parâmetro de rede para um cristal D-dimensional na direção dos vizinhos i e j . Escrevemos

$$\vec{r}_{ij} = \vec{a}_{ij} + \vec{\Delta}_{ij} \quad (4.2)$$

onde

$$\vec{\Delta}_{ij} = \vec{x}_j - \vec{x}_i \quad (4.3)$$

é a diferença entre os deslocamentos \vec{x}_j e \vec{x}_i dos sítios j e i em relação as suas posições de equilíbrio.

A Eq. (4.2) implica que

$$r_{ij}^2 = a_{ij}^2 + \Delta_{ij}^2 + 2\vec{a}_{ij} \cdot \vec{\Delta}_{ij} \quad (4.4)$$

No caso 1D, com os sítios vibrando apenas na direção da cadeia:

$$r_{ij} = a + (x_j - x_i) \quad (4.5)$$

A expansão de $J(r_{ij})$ em torno de $r_{ij} = a$ é dada por

$$J(r_{ij}) = J(a) + \alpha(x_j - x_i) + O[(x_j - x_i)^2] \quad (4.6)$$

onde $\alpha = \left. \frac{dJ}{dr_{ij}} \right|_{r_{ij}=a}$.

Para pequenos deslocamentos em relação à posição de equilíbrio, podemos truncar a expansão no termo linear. Substituindo tal aproximação para $J(r_{ij})$ na Eq. (4.1), obtemos o hamiltoniano 1D de primeiros vizinhos e isotrópico

$$H = H_s + H_{sf} \quad (4.7)$$

onde, para uma cadeia de N sítios,

$$H_s = J(a) \sum_{l=1}^{N-1} \vec{S}_l \cdot \vec{S}_{l+1} \quad (4.8)$$

é o hamiltoniano de spin usual, representativo de um gás de mágnons interagentes, e

$$H_{sf} = \alpha \sum_{l=1}^{N-1} (x_{l+1} - x_l) \vec{S}_l \cdot \vec{S}_{l+1} \quad (4.9)$$

é o “hamiltoniano spin-fônon”, correspondente a um gás de mágnons interagentes entre si e com os fônons da rede cristalina.

O hamiltoniano que contempla a totalidade dos graus de liberdade do sistema magneto-elástico é dado por

$$H_t = H_0 + H_{sf} \quad (4.10)$$

onde $H_0 = H_s + H_f$ e H_f é o hamiltoniano de fônons

$$H_f = \sum_{l=1}^N \frac{m}{2} \dot{x}_l^2 + \frac{\kappa}{2} (x_l - x_{l+1})^2 \quad (4.11)$$

com $x_{N+1} = x_1$. Temos que m é a massa dos íons magnéticos e κ é a constante elástica da cadeia.

4.2.1 Hamiltonianos Antiferromagnéticos

Para o caso AFM, descrito adequadamente em duas sub-cadeias $A=[x_l, \vec{S}_l; l \text{ par}]$ e $B=[y_l, \vec{T}_l; l \text{ ímpar}]$, o hamiltoniano spin-fônon fica

$$H_{sf} = \alpha \sum_{l=1}^{N-1} \sum_{l \text{ ímpar}} (x_l - y_{l-1}) \vec{T}_{l-1} \cdot \vec{S}_l + (y_{l+1} - x_l) \vec{S}_l \cdot \vec{T}_{l+1} \quad (4.12)$$

para o qual a cadeia se fecha no sítio $[y_0, \vec{T}_0]=[y_N, \vec{T}_N]$. Lembremos que isto é necessário para que os resultados oriundos da simetria do anel possam ser utilizados (vide seção 2.2). Tomaremos N um número natural par¹.

¹ Isto permite que o nosso hamiltoniano possa ser escrito na forma simples da Eq. (4.29), contendo apenas termos do tipo $\vec{T}_i \cdot \vec{S}_j$. Caso contrário, teríamos que incluir um incômodo termo de acoplamento de spins paralelos uma vez que, em um anel com N ímpar, os spins dos sítios 1 e N pertenceriam à mesma sub-rede. Apenas por generalidade - não se trata aqui de resolver uma amostra específica com certamente um número ímpar de sítios! - o caso N ímpar é facilmente contemplado “unindo” os spins paralelos das extremidades da cadeia. O anel obtido tem $M = N - 1$ sítios e preserva o número e tipo das interações da cadeia original para um modelo de primeiros vizinhos.

Definindo as duas sub-cadeias alternativamente como $A=[x_l, \vec{S}_l; l \text{ ímpar}]$ e $B=[y_l, \vec{T}_l; l \text{ par}]$, o hamiltoniano spin-fônon fica

$$H_{sf} = \alpha \sum_{l=2}^N \sum_{l_{par}} (x_l - y_{l-1}) \vec{T}_{l-1} \cdot \vec{S}_l + (y_{l+1} - x_l) \vec{S}_l \cdot \vec{T}_{l+1} \quad (4.13)$$

para o qual a cadeia se fecha no sítio $[y_1, \vec{T}_1]=[y_{N+1}, \vec{T}_{N+1}]$.

Somando as duas equações (4.12) e (4.13), obtemos uma soma em todos os valores de l :

$$H_{sf} = \frac{\alpha}{2} \sum_{l=1}^N (x_l - y_{l-1}) \vec{T}_{l-1} \cdot \vec{S}_l + (y_{l+1} - x_l) \vec{S}_l \cdot \vec{T}_{l+1} \quad (4.14)$$

Procedendo de forma análoga na definição das sub-cadeias, os hamiltonianos individuais de spin e fônons são escritos como:

$$H_s = \frac{J(a)}{2} \sum_{l=1}^N \vec{T}_{l-1} \cdot \vec{S}_l + \vec{S}_l \cdot \vec{T}_{l+1} \quad (4.15)$$

$$H_f = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N \frac{m}{2} (\dot{y}_{l-1}^2 + \dot{x}_l^2) + \frac{\kappa}{2} [(x_l - y_{l-1})^2 + (y_{l+1} - x_l)^2] \quad (4.16)$$

Como discutido na seção 2.2, uma solução AFM satisfatória para o hamiltoniano de spin H_s não pode ser obtida através de uma aplicação ingênua de uma teoria de ondas de spin. É sabido que as usuais transformações de Holstein-Primakoff ou Dyson Maléev em torno de um estado ordenado não são adequadas para tratar modelos de Heisenberg AFM em baixas dimensões.

A teoria de ondas de spin modificada (MSW) de Takahashi [26] contempla o estado fundamental desordenado das cadeias AFM através da imposição explícita de magnetização por sítio nula. De fato, usando uma aproximação variacional da matriz densidade, o teorema de Mermin-Wagner [47] é garantido “à mão”, tornando a abordagem de Takahashi rotacionalmente invariante. Arovas e Auerbach [27], por meio da representação de bósons de Schwinger, propuseram uma teoria mais rigorosa para a invariância rotacional em sistemas AFM de baixa dimensionalidade. Os resultados finais deste trabalho são equivalentes aos obtidos pela abordagem MSW. Some-se a isto o fato de que o método de Takahashi é também equivalente ao de Hirsch e Tang [28], correspondendo a correção estática

de 1-loop para a frequência de mágnons “vestidos” na função de Green de mágnons interagentes, e concorda ainda com resultados numéricos. Assim, a teoria MSW acabou por ser afirmar como ao método padrão para o tratamento de hamiltonianos AFM em $D = 1, 2$ e tem sido usada em duas dimensões até para o “temperamental” spin-1/2.

A frequência de mágnons corrigida pelo método de Takahashi é dada por $\omega_q^m = \lambda(1 - \eta^2\gamma_q^2)^{1/2}$. A função θ_q (introduzida a seguir no contexto da interação H_{sf}) prevista pelo método é tal que $\tanh(2\theta_q) = \eta\gamma_q$. Os parâmetros η e λ são obtidos a partir de equações auto-consistentes que devem ser resolvidas numericamente; $\gamma_q = z^{-1} \sum_{\vec{\delta}} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{\delta})$, onde z é igual ao número de vizinhos de cada sítio da rede e $\vec{\delta}$ os vetores que ligam o sítio aos vizinhos. No caso da cadeia, $z = 2$, $\gamma_q = -\cos(q)$ e

$$\omega_q^m = \lambda[1 - \eta^2 \cos^2(q)]^{1/2} \quad (4.17)$$

$$\tanh(2\theta_q) = -\eta \cos(q) \quad (4.18)$$

A cadeia AFM de spin-1 foi resolvida por Pires e Gouvêa [77] através das transformações de Dyson-Maléev (Holstein-Primakoff com maior variedade de processos de dois mágnons), dentro do formalismo da teoria MSW. A aproximação empregada consiste em calcular o efeito estático da interação entre mágnons até segunda ordem, obtendo um sistema efetivo de mágnons livres com massas renormalizadas. Termos de ordens superiores são desprezados com base em argumentos de baixas temperaturas. Seguindo o procedimento dos autores, o hamiltoniano H_s é escrito em termos de operadores de Bogoliubov como

$$H_m = \sum_q \hbar\omega_q^m (\alpha_q^\dagger \alpha_q + \beta_q^\dagger \beta_q) \quad (4.19)$$

onde o subscrito s para “spin” da equação original (4.15) foi substituído por m para “mágnon” indicando que, depois de Dyson-Maléev, o hamiltoniano representa excitações magnéticas bosônicas, os mágnons. Na Eq. (4.19), α_q^\dagger e β_q^\dagger são operadores de criação enquanto α_q e β_q são operadores de destruição de mágnons; ω_q^m é a frequência renormalizada (vestida) de mágnons prevista pelo método, coincidente com a Eq. (4.17). A quantidade estática adicional obtida por Pires e Gouvêa para o modelo acima é o *gap* em função da temperatura (Eqs. (12a) e (12b) na referência [77]). Em particular, em $T = 0$, o *gap* decresce como $e^{-\pi S}$ de acordo com o previsto pelo MSNL (seção 2.3; Eq. (11) na referência [77] e discussão subsequente).

Cosideremos agora o hamiltoniano de fônons em uma cadeia bipartida, dado pela Eq. (4.16). Diagonalizado em termos de operadores de criação e destruição de fônons, H_f fica:

$$H_f = \sum_q \hbar\omega_q^{fa} (c_q^\dagger c_q + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_q^{fo} (d_q^\dagger d_q + \frac{1}{2}) \quad (4.20)$$

H_f se separa em duas partes associadas a fônons livres, ditos acústicos e óticos, com frequências dadas por:

$$\omega_q^{fa} = \sqrt{\frac{2\kappa}{m}} [1 - \cos(q)]^{1/2} \quad (4.21)$$

$$\omega_q^{fo} = \sqrt{\frac{2\kappa}{m}} [1 + \cos(q)]^{1/2} \quad (4.22)$$

O estado fundamental do hamiltoniano aditivo não perturbado $H_0 = H_m + H_f$ é o produto dos estados fundamentais individuais: $|\rangle_0 = |\rangle_0^m |\rangle_0^f$, onde $|\rangle_0^m$ é dado pelo vácuo de mágnons e $|\rangle_0^f$ pelo vácuo de fônons.

A fim de estudar a influência do hamiltoniano de interação (4.14) sobre o estado fundamental $|\rangle_0$ do sistema composto, submeteremos H_{sf} ao tratamento delineado na próxima seção.

4.3 Cálculo do Hamiltoniano de Interação

O plano será reescrever a interação H_{sf} em termos de operadores de mágnons através da teoria de ondas de spin via transformações de Holstein-Primakoff padrão. As correções estáticas da teoria de ondas de spin modificada [26] serão, então, incorporadas através do uso das Eqs. (4.17) e (4.18) quando do aparecimento das funções correspondentes em nossas expressões.

Notamos que, diferentemente do apresentado por Pires e Gouvêa [77] para diagonalização de H_s via transformações de Dyson-Maléev, nosso tratamento do hamiltoniano de interação tem como ponto de partida as simplificadas transformações de Holstein-Primakoff. Aqui, isto apenas representa uma economia algébrica já que, no final, as interações entre mágnons serão desprezadas frente suas interações com os fônons, que são o fenômeno relevante no contexto de H_{sf} .

As transformações de Holstein-Primakoff [4, 22] aproximam uma cadeia de spins por uma cadeia de osciladores harmônicos acoplados com solução conhecida em termos de operadores de bósons. Seja Q_l o deslocamento do l -ésimo oscilador em relação à sua posição de equilíbrio e P_l seu momento. Seguindo o desenvolvimento da referência [22], associa-se as componentes do spin com estes graus de liberdade de acordo com as equações:

$$S_l^x = \sqrt{S}Q_l \quad S_l^y = \sqrt{S}P_l \quad S_l^z = S - \frac{1}{2}(P_l^2 + Q_l^2 - 1) \quad (4.23)$$

$$T_l^x = \sqrt{S}Q_l \quad T_l^y = -\sqrt{S}P_l \quad T_l^z = -S + \frac{1}{2}(P_l^2 + Q_l^2 - 1) \quad (4.24)$$

Introduzimos os operadores de bóson de acordo com as definições usuais em termos de Q_l e P_l

$$a_l, b_l = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_l + iP_l) \quad (4.25)$$

$$a_l^\dagger, b_l^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_l - iP_l) \quad (4.26)$$

onde a e a^\dagger são definidos para a sub-cadeia A, enquanto b e b^\dagger são para a sub-cadeia B.

Invertendo as Eqs. (4.25) e (4.26) obtemos:

$$S_l^+ = S_l^x + iS_l^y = \sqrt{2S}a_l \quad S_l^- = S_l^x - iS_l^y = \sqrt{2S}a_l^\dagger \quad S_l^z = S - a_l^\dagger a_l \quad (4.27)$$

$$T_l^+ = T_l^x + iT_l^y = \sqrt{2S}b_l^\dagger \quad T_l^- = T_l^x - iT_l^y = \sqrt{2S}b_l \quad T_l^z = -S + b_l^\dagger b_l \quad (4.28)$$

Levando estes resultados na Eq. (4.14) e observando que operadores de spin em sítios distintos comutam, temos

$$H_{mf} = \frac{\alpha S}{2} \sum_{l=1}^N (x_l - y_{l-1})(a_l b_{l-1} + a_l^\dagger b_{l-1}^\dagger + a_l^\dagger a_l + b_{l-1}^\dagger b_{l-1} - S) + \\ + (y_{l-1} - x_l)(a_l b_{l+1} + a_l^\dagger b_{l+1}^\dagger + a_l^\dagger a_l + b_{l+1}^\dagger b_{l+1} - S) \quad (4.29)$$

onde substituímos o subscrito sf para “spin-fônon” por mf para “mágnon-fônon” explicitando que, depois de Holstein-Primakoff, a interação se dá entre fônons e mágnons. Na Eq. (4.29), ignoramos termos contendo quatro operadores que correspondem às interações entre mágnons. Isto se justifica já que, como nosso efeito de interesse aqui é a interação entre mágnons e

fônons, a interação subjacente dos mágnons entre si pode ser desconsiderada no hamiltoniano H_{mf} . Como já mencionado, o efeito das interações entre mágnons é contemplado dentro do “background” magnético H_s no contexto da teoria de ondas de spin modificada.

Escrevemos os operadores a_l , b_l , x_l e y_l em termos de suas coordenadas coletivas seguindo a Eq. (2.63) para uma variável dinâmica genérica definida em uma sub-cadeia com periodicidade $M = N/2$

$$\begin{aligned} a_l &= \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_q a_q e^{-iql} \\ b_l &= \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_q b_q e^{+iql} \\ x_l &= \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_q x_q e^{-iql} \\ y_l &= \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_q y_q e^{-iql} \end{aligned} \quad (4.30)$$

onde redefinimos q para $q = 2\pi n/M$, $n = 1, \dots, M$, de modo a podermos omitir o parâmetro de rede $2a$ da exponencial. Também por economia de notação, omitimos os limites das somas em q ; eles são $2\pi/M \xrightarrow{M \rightarrow \infty} 0$ e 2π . Finalmente, o sinal positivo no expoente de b_l é devido às Eqs. (4.23)-(4.26) que implicam em $b = (1/\sqrt{2s})(T^x - iT^y) \rightarrow (1/\sqrt{2s})(S^x - iS^y) = a^\dagger$. Isto porque os spins \vec{S} e \vec{T} são representados por letras diferentes apenas para distinguirmos entre sub-cadeias mas correspondem, na verdade, à mesma entidade física.

Utilizando a relação para a delta de Kronecker

$$\delta_{n,0} = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N e^{i\frac{2\pi n}{N}l} \quad (4.31)$$

a seguinte mudança de variáveis

$$\begin{aligned} x_q &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi_q + \eta_q) \\ y_q &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi_q - \eta_q) \end{aligned} \quad (4.32)$$

algumas relações trigonométricas e as definições dos operadores

$$\begin{aligned}\Gamma_{qk} &= \cos\left(\frac{q}{2}\right)(a_{k+q}^\dagger a_k + b_k^\dagger b_{k+q}) + \cos\left(k + \frac{q}{2}\right)(a_k b_{k+q} + a_{k+q}^\dagger b_k^\dagger) \\ \Delta_{qk} &= \sin\left(\frac{q}{2}\right)(a_{k+q}^\dagger a_k - b_k^\dagger b_{k+q}) + \sin\left(k + \frac{q}{2}\right)(a_{k+q}^\dagger b_k^\dagger - a_k b_{k+q})\end{aligned}\quad (4.33)$$

obtemos, após alguma álgebra, o hamiltoniano de interação:

$$H_{mf} = i\alpha S \sqrt{\frac{2}{M}} \sum_{q,k} \xi_q \sin\left(\frac{q}{2}\right) \Gamma_{qk} + \eta_q \cos\left(\frac{q}{2}\right) \Delta_{qk} \quad (4.34)$$

Aplicamos as seguintes transformações de Bogoliubov sobre os operadores de mágnons

$$\begin{aligned}a_q &= u_q \alpha_q + v_q \beta_q^\dagger \\ b_q &= v_q \alpha_q^\dagger + u_q \beta_q\end{aligned}\quad (4.35)$$

onde as funções u_q e v_q são escritas como

$$\begin{aligned}u_q &= \cosh \theta_q \\ v_q &= \sinh \theta_q\end{aligned}\quad (4.36)$$

tal que $u_q^2 - v_q^2 = 1$.

A partir de algumas relações hiperbólicas, reescrevemos os operadores Γ e Δ em termos de α e β e, substituindo o resultado na Eq. (4.34), obtemos a forma final do hamiltoniano de interação

$$H_{mf} = h_1^\xi + h_2^\xi + h_1^\eta + h_2^\eta \quad (4.37)$$

$$h_1^\xi = \sum_{q,k} M_1(q,k) \xi_q (\alpha_{k+q}^\dagger \alpha_k + \beta_{k+q} \beta_k^\dagger) \quad h_2^\xi = \sum_{q,k} M_2(q,k) \xi_q (\alpha_{k+q}^\dagger \beta_k^\dagger + \beta_{k+q} \alpha_k)$$

$$h_1^\eta = \sum_{q,k} N_1(q,k) \eta_q (\alpha_{k+q}^\dagger \alpha_k - \beta_{k+q} \beta_k^\dagger) \quad h_2^\eta = \sum_{q,k} N_2(q,k) \eta_q (\alpha_{k+q}^\dagger \beta_k^\dagger - \beta_{k+q} \alpha_k)$$

onde os coeficientes M e N são dados por:

$$\begin{aligned}
 M_1(q, k) &= i\alpha S \sqrt{\frac{2}{M}} \sin\left(\frac{q}{2}\right) \left[\cos\left(\frac{q}{2}\right) \cosh(\theta_k + \theta_{k+q}) + \cos\left(k + \frac{q}{2}\right) \sinh(\theta_k + \theta_{k+q}) \right] \\
 M_2(q, k) &= i\alpha S \sqrt{\frac{2}{M}} \sin\left(\frac{q}{2}\right) \left[\cos\left(\frac{q}{2}\right) \sinh(\theta_k + \theta_{k+q}) + \cos\left(k + \frac{q}{2}\right) \cosh(\theta_k + \theta_{k+q}) \right] \\
 N_1(q, k) &= i\alpha S \sqrt{\frac{2}{M}} \cos\left(\frac{q}{2}\right) \left[\sin\left(\frac{q}{2}\right) \cosh(\theta_k - \theta_{k+q}) + \sin\left(k + \frac{q}{2}\right) \sinh(\theta_k - \theta_{k+q}) \right] \\
 N_2(q, k) &= i\alpha S \sqrt{\frac{2}{M}} \cos\left(\frac{q}{2}\right) \left[\sin\left(\frac{q}{2}\right) \sinh(\theta_k - \theta_{k+q}) + \sin\left(k + \frac{q}{2}\right) \cosh(\theta_k - \theta_{k+q}) \right]
 \end{aligned} \tag{4.38}$$

De posse do hamiltoniano de interação e da função θ_q dada pela Eq. (4.18), vamos calcular as funções de Green dos fônons acústicos e óticos.

4.4 Funções de Green

Na representação de interação, as funções de Green de fônons acústicos e óticos são expandidas em potências de H_{mf} . Em termos dos operadores ξ_q e η_q elas são dadas, analogamente à Eq. (2.53), por ²:

$$D^{fa}(q; t, t') = \frac{m\omega_q^{fa}}{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{n+1} \int dt_1 \dots \int dt_n \langle |T \hat{\xi}_q(t) \hat{\xi}_{-q}(t') \hat{H}_{mf}(t_1) \dots \hat{H}_{mf}(t_n) | \rangle_0^{CD} \tag{4.39}$$

$$D^{fo}(q; t, t') = \frac{m\omega_q^{fo}}{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{n+1} \int dt_1 \dots \int dt_n \langle |T \hat{\eta}_q(t) \hat{\eta}_{-q}(t') \hat{H}_{mf}(t_1) \dots \hat{H}_{mf}(t_n) | \rangle_0^{CD} \tag{4.40}$$

Devido à linearidade das interações $h_{1,2}^\xi$ e $h_{1,2}^\eta$ em ξ e η , todas as contribuições de ordem ímpar para as Eqs. (4.39) e (4.40) correspondem a *brackets* com um número ímpar de operadores de fônons e, portanto, se anulam.

² Para uma definição mais detalhada da função de Green de fônons em termos dos operadores de criação e destruição correspondentes veja a referência [14].

Seguindo cálculo análogo ao apresentado para a função de Green não perturbada na seção 2.1, as contribuições de ordem zero para as funções de Green de fônons são dadas, depois de uma transformada de Fourier, por:

$$D_0^{fa}(q; \omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{2\omega_q^{fa}}{\omega^2 - \omega_q^{fa2}} \quad (4.41)$$

$$D_0^{fo}(q; \omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{2\omega_q^{fo}}{\omega^2 - \omega_q^{fo2}} \quad (4.42)$$

Para o cálculo das contribuições de ordens superiores, precisaremos da função de Green não perturbada de mágnons, escrita (para operadores α e β) analogamente à Eq. (2.34) como:

$$G_0^\alpha(q; t-t')\delta_{q',q} = -\frac{i}{\hbar} {}_0\langle |T\hat{\alpha}_q(t)\hat{\alpha}_{q'}^\dagger(t')| \rangle_0 \quad G_0^\beta(q; t-t')\delta_{q',q} = -\frac{i}{\hbar} {}_0\langle |T\hat{\beta}_q(t)\hat{\beta}_{q'}^\dagger(t')| \rangle_0 \quad (4.43)$$

$$\tilde{G}_0^\alpha(q; t-t')\delta_{q',q} = -\frac{i}{\hbar} {}_0\langle |T\hat{\alpha}_q^\dagger(t)\hat{\alpha}_{q'}(t')| \rangle_0 \quad \tilde{G}_0^\beta(q; t-t')\delta_{q',q} = -\frac{i}{\hbar} {}_0\langle |T\hat{\beta}_q^\dagger(t)\hat{\beta}_{q'}(t')| \rangle_0 \quad (4.44)$$

Novamente seguindo cálculo análogo ao da seção 2.1, depois de uma transformada de Fourier, temos

$$G_0^{\alpha/\beta}(q; \omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\omega - \omega_q^m} \quad (4.45)$$

$$\tilde{G}_0^{\alpha/\beta}(q; \omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{-1}{\omega + \omega_q^m} \quad (4.46)$$

onde ω_q^m é a frequência de mágnons dada pela Eq. (4.17).

A função de Green de mágnons obedece as relações:

$$\begin{aligned} \tilde{G}_0^{\alpha/\beta}(q; t) &= G_0^{\alpha/\beta}(q; -t) \\ \tilde{G}_0^{\alpha/\beta}(q; \omega) &= G_0^{\alpha/\beta}(q; -\omega) \end{aligned} \quad (4.47)$$

A contribuição de segunda ordem em H_{mf} para as funções de Green é calculada seguindo o procedimento da seção 2.1. Utilizamos o *teorema de Wick* para decompor os *brackets* das Eqs. (4.39) e (4.40) em pares de operadores de fônons ou mágnons. Os termos oriundos de todos os pareamentos possíveis são compostos pelos diagramas de Feynman elementares da Fig 4.1.

$$\begin{aligned}
 {}_0\langle |T \hat{\xi}_q(t) \hat{\xi}_{-q}(t')| \rangle_0 &= \frac{i\hbar^2}{m\omega_q^{f_a f_o}} D_0^{f_a f_o}(q; t-t') \delta_{q',q} \longrightarrow \text{Diagram 1} \delta_{q',q} \\
 {}_0\langle |T \hat{\alpha}_q(t) \hat{\alpha}_{q'}^\dagger(t')| \rangle_0 &= i\hbar G_0^\beta(q; t-t') \delta_{q',q} \longrightarrow \text{Diagram 2} \delta_{q',q} \\
 {}_0\langle |T \hat{\alpha}_q^\dagger(t) \hat{\alpha}_{q'}(t')| \rangle_0 &= i\hbar \tilde{G}_0^\beta(q; t-t') \delta_{q',q} \longrightarrow \text{Diagram 3} \delta_{q',q} \\
 {}_0\langle |T \hat{\alpha}_q^\dagger(t) \hat{\alpha}_{q'}(t)| \rangle_0 &= n_{q,t}^\beta \delta_{q',q} \longrightarrow \text{Diagram 4} \delta_{q',q} \\
 {}_0\langle |T \hat{\alpha}_q(t) \hat{\alpha}_{q'}^\dagger(t)| \rangle_0 &= \tilde{n}_{q,t}^\beta \delta_{q',q} \longrightarrow \text{Diagram 5} \delta_{q',q}
 \end{aligned}$$

Fig. 4.1: Diagramas de Feynman elementares para a interação mágnon-fônon.

Mantendo apenas os diagramas conexos e diferentes entre si, a contribuição de segunda ordem para as funções de Green de fônons é dada por diagramas do tipo

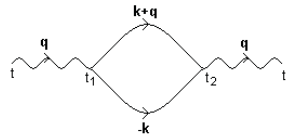


Fig. 4.2: Diagrama conexo para a contribuição de segunda ordem da interação mágnon-fônon para as funções de Green de fônons.

com índices apropriados para fônons acústicos ou óticos e mágnons do tipo α ou β . Estes diagramas correspondem a processos de dois mágnons e um fônon.

Após alguma álgebra obtemos:

$$\begin{aligned}
 D_2^{fa}(q; \omega) &= i \frac{\sqrt{2\pi}\hbar^2}{m\omega_q^{fa}} [D_0^{fa}(q; \omega)]^2 \times \\
 &\times \left\{ \sum_k M_1(q, k) M_1(-q, k+q) \int d\omega' [G_0^\alpha(k+q; \omega+\omega') G_0^\alpha(k; \omega') + G_0^\beta(k; \omega+\omega') G_0^\beta(k+q; \omega')] + \right. \\
 &+ \left. \sum_k M_2(q, k) M_2(-q, k+q) \int d\omega' [G_0^\alpha(k+q; \omega+\omega') \tilde{G}_0^\beta(k; \omega') + \tilde{G}_0^\alpha(k; \omega+\omega') G_0^\beta(k+q; \omega')] \right\}
 \end{aligned} \tag{4.48}$$

$$\begin{aligned}
 D_2^{fo}(q; \omega) &= i \frac{\sqrt{2\pi}\hbar^2}{m\omega_q^{fo}} [D_0^{fo}(q; \omega)]^2 \times \\
 &\times \left\{ \sum_k N_1(q, k) N_1(-q, k+q) \int d\omega' [G_0^\alpha(k+q; \omega+\omega') G_0^\alpha(k; \omega') + G_0^\beta(k; \omega+\omega') G_0^\beta(k+q; \omega')] - \right. \\
 &- \left. \sum_k N_2(q, k) N_2(-q, k+q) \int d\omega' [G_0^\alpha(k+q; \omega+\omega') \tilde{G}_0^\beta(k; \omega') + \tilde{G}_0^\alpha(k; \omega+\omega') G_0^\beta(k+q; \omega')] \right\}
 \end{aligned} \tag{4.49}$$

Tecnicamente, após uma continuação analítica no plano complexo, as funções de Green em T finita são obtidas das expressões acima para $T = 0$ substituindo-se ω por $i\omega_n$, onde $\omega_n = \frac{2\pi n}{\beta}$ são as frequências de Matsubara, e $\int \frac{d\omega}{2\pi}$ por $\frac{i}{\beta} \sum_n$.

Utilizaremos a identidade válida para bósons em T finita

$$\sum_n \frac{1}{i\omega_n - \omega_q} = -\beta(n_q + 1) \tag{4.50}$$

onde

$$n_q = \frac{1}{e^{\beta\omega_q} - 1} \tag{4.51}$$

é o número de ocupação de bósons.

Definindo

$$\Omega_\pm(q, k) = \omega_k^m \pm \omega_{k+q}^m \tag{4.52}$$

as funções de Green em temperatura finita, escritas via equação de Dyson até segunda ordem, são dadas por

$$D(q; \omega) = D_0(q; \omega) + D_0(q; \omega) \Sigma(q; \omega) D_0(q; \omega) \tag{4.53}$$

onde

$$\Sigma(q; \omega) = \sum_k \frac{A(q, k)\Omega_+(q, k)}{\omega^2 - \Omega_+^2(q, k)} + \frac{B(q, k)\Omega_-(q, k)}{\omega^2 - \Omega_-^2(q, k)} \quad (4.54)$$

é a auto-energia de fônons em segunda ordem. Por simplicidade de notação, nas equações anteriores para as funções de Green e auto-energias de fônons acústicos e óticos omitimos os superescritos correspondentes fa e fo . As funções $A(q, k)$ e $B(q, k)$ para os casos acústico e ótico são dadas por:

$$\begin{aligned} A^{fa}(q, k) &= + \frac{2\sqrt{2\pi}}{m\omega_q^{fa}} M_2(q, k)M_2(-q, k + q)(n_k^m + n_{k+q}^m + 1) \\ B^{fa}(q, k) &= - \frac{2\sqrt{2\pi}}{m\omega_q^{fa}} M_1(q, k)M_1(-q, k + q)(n_k^m - n_{k+q}^m) \\ A^{fo}(q, k) &= - \frac{2\sqrt{2\pi}}{m\omega_q^{fo}} N_2(q, k)N_2(-q, k + q)(n_k^m + n_{k+q}^m + 1) \\ B^{fo}(q, k) &= - \frac{2\sqrt{2\pi}}{m\omega_q^{fo}} N_1(q, k)N_1(-q, k + q)(n_k^m - n_{k+q}^m) \end{aligned} \quad (4.55)$$

Daqui para frente todas as equações valem genericamente para fônons acústicos e óticos com as funções de entrada correspondentes. Distinguiremos entre os dois casos apenas na discussão dos resultados.

A influência da interação com os mágnons sobre a dinâmica dos modos de vibração da rede será obtida pelas funções relaxação de fônons.

4.5 Funções Relaxação

Usamos a relação conhecida [14] entre a função relaxação e a parte imaginária da função de Green

$$R(q; \omega) = -\frac{1}{\pi\omega} D''(q; \omega) \quad (4.56)$$

para obtermos uma expressão em termos das auto-energias calculadas na seção anterior como:

$$R(q; \omega) = -\frac{1}{\pi\omega} \left(\frac{2\omega_q}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right)^2 \frac{\Sigma''(q; \omega)}{[\omega^2 - \omega_q^2 - \frac{2\omega_q}{\sqrt{2\pi\hbar}} \Sigma'(q; \omega)]^2 + [\frac{2\omega_q}{\sqrt{2\pi\hbar}} \Sigma''(q; \omega)]^2} \quad (4.57)$$

As partes real e imaginária das auto-energias são obtidas observando-se que a expressão (4.54) envolve somatórios da razão entre uma função de

k , que chamaremos genericamente de $f(k)$, pela diferença $\omega^2 - \Omega_{\pm}^2(q, k)$. Quando $\Omega_{\pm}^2(q, k) = \omega^2$ temos uma indeterminação que precisa ser tratada com cuidado. Para M suficientemente grande, podemos tomar em boa aproximação $k = 2\pi n/M$, $n = 1, \dots, M$, como uma variável contínua dentro do intervalo $[0, 2\pi]$ e substituir \sum_k por $\int \frac{dk}{2\pi}$. As integrais podem ser resolvidas através da utilização da relação formal para integrandos

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x + x_0 + i\varepsilon} = P \frac{1}{x + x_0} + i\pi \delta(x + x_0) \quad (4.58)$$

onde P denota “parte principal”. Aplicando a fórmula

$$\delta(F(x)) = \sum_i \delta(x - x_i) \left[\frac{dF(x)}{dx} \Big|_{x=x_i} \right]^{-1} \quad (4.59)$$

onde os x_i 's são os zeros de $F(x)$, temos

$$\begin{aligned} I &\equiv \int_0^{2\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{f(k)}{\omega^2 - \Omega_{\pm}^2(q, k)} = \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^{2\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{f(k)}{(-2\Omega_{\pm}(q, k))} \left[\frac{1}{\omega + \Omega_{\pm}(q, k) + i\varepsilon} - \frac{1}{\omega - \Omega_{\pm}(q, k) + i\varepsilon} \right] \\ I &= P \int_0^{2\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{f(k)}{2\Omega_{\pm}(q, k)} \frac{1}{\omega - \Omega_{\pm}(q, k)} - P \int_0^{2\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{f(k)}{2\Omega_{\pm}(q, k)} \frac{1}{\omega + \Omega_{\pm}(q, k)} - \\ &\quad - i\pi \sum_i \left[\frac{\partial \Omega_{\pm}(q, k)}{\partial k} \Big|_{k=k_{i\pm}^-} \right]^{-1} \int_0^{2\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{f(k)}{2\Omega_{\pm}(q, k)} \delta(k - k_{i\pm}^-) - \\ &\quad - i\pi \sum_i \left[\frac{\partial \Omega_{\pm}(q, k)}{\partial k} \Big|_{k=k_{i\pm}^+} \right]^{-1} \int_0^{2\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{f(k)}{2\Omega_{\pm}(q, k)} \delta(k - k_{i\pm}^+) \end{aligned} \quad (4.60)$$

onde $k_{i\pm}^+$ é raiz de $F_{\pm}^+(q, k) = \omega + \Omega_{\pm}(q, k)$ e $k_{i\pm}^-$ é raiz de $F_{\pm}^-(q, k) = \omega - \Omega_{\pm}(q, k)$.

Como todas as funções envolvidas na Eq. (4.54) são reais, temos para as partes real e imaginárias das auto-energias de fônons:

$$\Sigma'(q; \omega) = P \int_0^{2\pi} \frac{dk}{4\pi} \left[\frac{A(q, k)}{\omega - \Omega_+(q, k)} - \frac{A(q, k)}{\omega + \Omega_+(q, k)} + \frac{B(q, k)}{\omega - \Omega_-(q, k)} - \frac{B(q, k)}{\omega + \Omega_-(q, k)} \right] \quad (4.61)$$

$$\begin{aligned}
 \Sigma''(q; \omega) = & -\pi \sum_i \int_0^{2\pi} \frac{dk}{4\pi} \left[\frac{\partial \Omega_+(q, k)}{\partial k} \Big|_{k=k_{i+}^+} \right]^{-1} A(q, k) \delta(k - k_{i+}^+) + \\
 & + \left[\frac{\partial \Omega_+(q, k)}{\partial k} \Big|_{k=k_{i+}^-} \right]^{-1} A(q, k) \delta(k - k_{i+}^-) + \\
 & + \left[\frac{\partial \Omega_-(q, k)}{\partial k} \Big|_{k=k_{i-}^+} \right]^{-1} B(q, k) \delta(k - k_{i-}^+) + \\
 & + \left[\frac{\partial \Omega_-(q, k)}{\partial k} \Big|_{k=k_{i-}^-} \right]^{-1} B(q, k) \delta(k - k_{i-}^-) \quad (4.62)
 \end{aligned}$$

A parte real das auto-energias $\Sigma'(q; \omega)$ é obtida através de um método numérico de integração capaz de lidar com as singularidades dos integrandos quando os denominadores se anulam. O método desenvolvido, implementado em linguagem *Fortran*, encontra-se disponível no Apêndice A.1. O cálculo da parte imaginária $\Sigma''(q; \omega)$ requer um método numérico para obtenção das raízes $k_{i\pm}^\pm$ e que some os integrandos avaliados nestes pontos. Para tal desenvolvemos um método, também implementado em *Fortran*, que encontra-se disponível no Apêndice A.2.

Tendo calculado as auto-energias, podemos analisar as curvas das funções relaxação de fônons para determinados valores dos parâmetros do problema. Pela Eq. (4.57), vemos que a posição do pico da função relaxação fornece a frequência (ou energia) dos fônons cujo desvio de ω_q , correpondente ao gás de fônons livres, é medido pela parte real da auto-energia. Em boa aproximação, a frequência de fônons acoplados com mágnons pode ser dada pela expressão:

$$\tilde{\omega}_q^2 = \omega_q^2 + \frac{2\omega_q}{\sqrt{2\pi\hbar}} \Sigma'(q; \omega_q) \quad (4.63)$$

A largura de linha da função relaxação é associada com o amortecimento (ou decaimento) dos fônons, sendo proporcional ao inverso do seu tempo de vida. O aparecimento de uma largura de linha na função relaxação dos fônons é devido ao acoplamento destes com os mágnons da rede. Seu comportamento é governado pela parte imaginária da auto-energia. Para a mesma aproximação anterior, a largura de linha é dada por:

$$\Gamma_q = \frac{2\omega_q}{\sqrt{2\pi\hbar}} \Sigma''(q; \omega_q) \quad (4.64)$$

Para a investigação da dinâmica de fônons sob a atuação do acoplamento mágnon-fônon, analisaremos a função relaxação juntamente com a sua posição do pico ao quadrado e largura de linha em três casos: i) para valores fixos de q e T e variando α , ii) para valores fixos de q e α e variando T e iii) para valores fixos de α e T e variando q .

Consideraremos α como um parâmetro adimensional através de mudanças apropriadas de unidades e tomando $J = 1$. Também T é feita adimensional quando medida em termos de J através da convenção $k_B = 1$. Finalmente, $\hbar = 1$ para os cálculos numéricos das Eqs. (4.57), (4.63) e (4.64).

4.5.1 Fônons Acústicos

i) A Fig. 4.3 mostra a função relaxação de fônon acústico $R(q; \omega)$ versus frequência ω para $q = \pi/16$, $T = 0.1$ e três valores de constante de acoplamento: $\alpha = 0.1, 0.5, 0.99$. Restringimo-nos a $\alpha < 1$ já que nosso método perturbativo para as funções de Green presume um valor pequeno para a constante de acoplamento. Como vemos, o aumento da constante de acoplamento faz com que a posição do pico se desloque suavemente para a esquerda juntamente com um alargamento da largura de linha.

De fato, no gráfico a esquerda da Fig. 4.4 para $\tilde{\omega}_q^2$ versus α , fica manifesto que a energia do fônon decai com o acoplamento mágnon-fônon. O valor dado pela curva para a energia quando $\alpha = 0$ está de acordo com $\omega_{\pi/16} = 0.19603$ para a energia do fônon na ausência do acoplamento quando a razão típica $\kappa/m = 1$. A diminuição na energia do fônon sugere que a interação tende a transferir energia dos graus de liberdade elásticos para os graus magnéticos, identificando o acoplamento mágnon-fônon como uma fonte de desordem para o “background” magnético. De fato, mágnons mais energéticos correspondem a um menor comprimento de correlação spin-spin. No que se refere ao estado fundamental desordenado da cadeia AFM de spin-1, a quantidade apropriada para análise é a energia de fônons como função de α para $q = T = 0$. O comportamento qualitativo de tal curva é análogo ao aqui apresentado para os pequenos valores $q = \pi/16$ e $T = 0.1$: embora antiferromagnetos 1D apresentem temperatura crítica nula, i.e., não comportam uma transição de um estado fundamental ordenado para um estado fundamental desordenado induzida pela variação de um parâmetro não-térmico, concluímos que o acoplamento mágnon-fônon intensifica a desordem magnética primitiva em $T = 0$.

Um resultado complementar à dependência da energia de fônons com α é fornecido na referência [60] onde se estudou o efeito do acoplamento mágnon-fônon sobre o gap de Haldane em cadeias AFM de spin-1. Os autores obtiveram o gap de Haldane como uma função crescente do acoplamento, corroborando nosso resultado sobre a transferência de energia dos graus de liberdade elásticos para os magnéticos nos sistemas considerados. Na verdade, a direção preferencial para a transferência de energia no sentido da desordem magnética não é casual, mas maximiza a entropia nos processos induzidos pelo acoplamento mágnon-fônon.

O acoplamento mágnon-fônon, através da sua contribuição exclusivamente quântica para a desmagnetização dos sistemas, têm sido considerado como uma das interações responsáveis pelas novas fases da matéria observadas experimentalmente. Em particular, a supercondutividade de alta T_c tem sido conectada com estados de líquidos de spin emergentes de transições de fase quânticas no antiferromagneto 2D. Apesar dos sistemas 1D não apresentarem tais transições, o presente trabalho contribui para a compreensão do mecanismo pelo qual o acoplamento mágnon-fônon atua na geração de fases da matéria não previstas pela termodinâmica clássica.

Acompanhando a curva além dos nossos dados, vemos que $\tilde{\omega}_q^2$ zera em algum valor finito de α (> 1), sugerindo a ocorrência de uma instabilidade do sistema neste ponto. Observamos que tal não representa uma instabilidade “física”, mas um comportamento espúrio do nosso método perturbativo quando o parâmetro de expansão α excede 1. Como mencionado acima, a teoria perturbativa não funciona dentro deste regime de constante de acoplamento. De fato, para os não-críticos sistemas AFM 1D de spin-1, esperamos $\tilde{\omega}_q^2 \rightarrow 0$ quando $\alpha \rightarrow \infty$ de forma suave.

O gráfico da direita na Fig 4.4 para Γ_q versus α evidencia que, de fato, aumentando-se a interação, o efeito de amortecimento dos fônons torna-se mais intenso. É natural que a interação abrevie o tempo de vida dos fônons, acelerando seu decaimento. Quando $\alpha = 0$, o amortecimento zera, em acordo com um “background” elástico composto por osciladores harmônicos acoplados levando a fônons livres com tempo de vida infinito. Entretanto, este não deve ser o caso em um sistema real onde, além do acoplamento mágnon-fônon, outros mecanismos - acoplamento elétron-fônon, potenciais elásticos anarmônicos, etc. - também contribuem para o amortecimento.

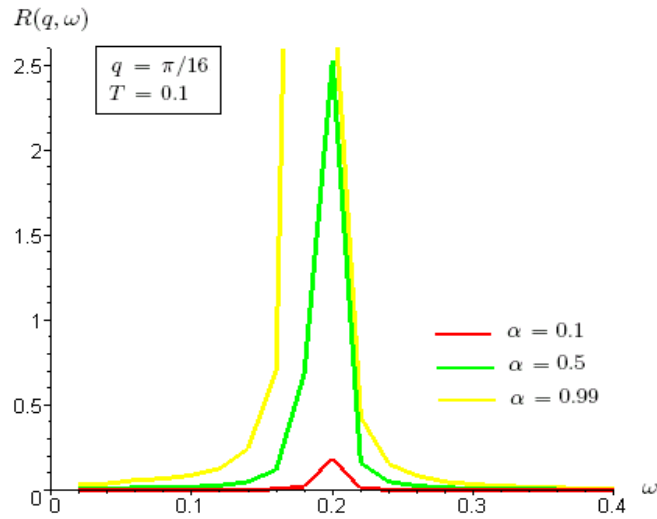


Fig. 4.3: Funções relaxação de fônons acústicos *versus* frequência para $q = \pi/16$, $T = 0.1$ e três valores de constante de acoplamento: $\alpha = 0.1, 0.5, 0.99$.

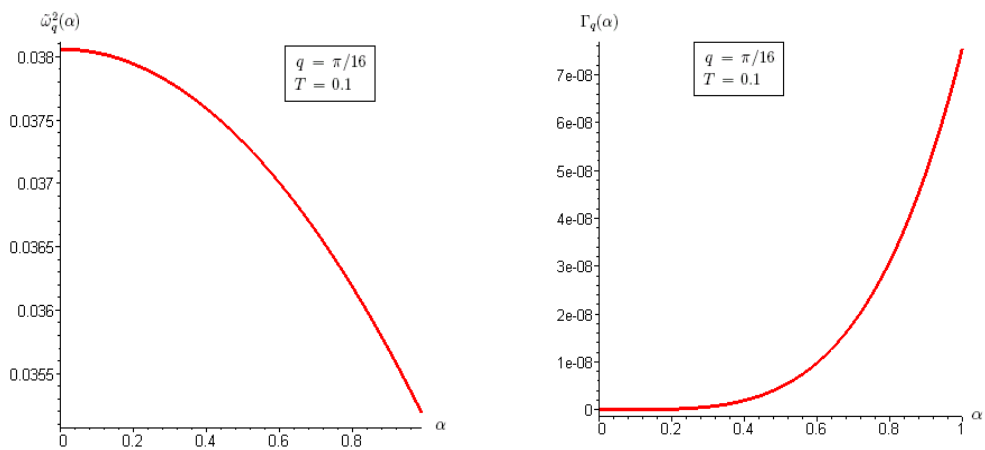


Fig. 4.4: Frequência ao quadrado (esquerda) e largura de linha (direita) de fônons acústicos *versus* constante de acoplamento para $q = \pi/16$ e $T = 0.1$.

ii) A Fig. 4.5 mostra a função relaxação de fônons acústicos $R(q, \omega)$ versus frequência ω para $q = \pi/16$, $\alpha = 0.1$ e três valores de temperatura: $T = 0.1, 0.145, 0.195$. Para esta escolha de valores, utilizamos resultados numéricos obtidos anteriormente [78] para os parâmetros dependentes da temperatura λ e η , seguindo as equações auto-consistentes de Takahashi [26] na cadeia AFM de spin-1. Enquanto a largura de linha claramente cresce com a temperatura, a posição do pico não aparenta ser muito sensível a mudanças de temperatura no intervalo considerado.

O gráfico a esquerda na Fig. 4.6 para $\tilde{\omega}_q^2$ versus T mostra um aumento na energia do fônion com a temperatura. Realmente, é razoável que o ganho em energia térmica do sistema, devido ao aumento de temperatura, seja compartilhado entre os fônions. Apesar de concordar com as tais expectativas qualitativas, o aumento da energia do fônion com a temperatura é muito pequena, como fica claro pela variação da escala vertical do gráfico. É por isso que, na Fig. 4.5, não pudemos perceber o deslocamento do pico da função relaxação para valores diferentes de T . Esta dependência tão modesta com a temperatura é devida ao nível de aproximação que estamos usando. Levando a série perturbativa para a função de Green além do termo de segunda ordem, a contribuição térmica para a energia do fônion deve aumentar. De qualquer maneira, nossa aproximação captura o comportamento térmico qualitativo de interesse, qual seja, a perda na energia dos fônions devida ao acoplamento com os mágnons é minimizada pela atividade térmica do sistema. Aumentando-se a temperatura além de nossos dados, o valor de $\tilde{\omega}_{\pi/16}^2 = 0.0384$ para fônions livres é eventualmente recuperado e, então, superado.

O gráfico a direita na Fig. 4.6 para Γ_q versus T mostra que o amortecimento de fônions se mantém igual a zero até em torno de $T = 0.04$ e então começa a crescer de forma praticamente linear com a temperatura. Isto é, para altas temperaturas, onde as flutuações do sistema se tornam mais intensas, o papel da dinâmica de spins na diminuição do tempo de vida dos fônions é mais significativo. Novamente, a curva passando pela origem é uma característica “não-física” do modelo harmônico.

Escolhemos o valor $q = \pi/16$ nas situações i) e ii) porque os fônions medidos em experimentos Raman têm, em geral, vetores de onda pequenos, mas não nulos [79].

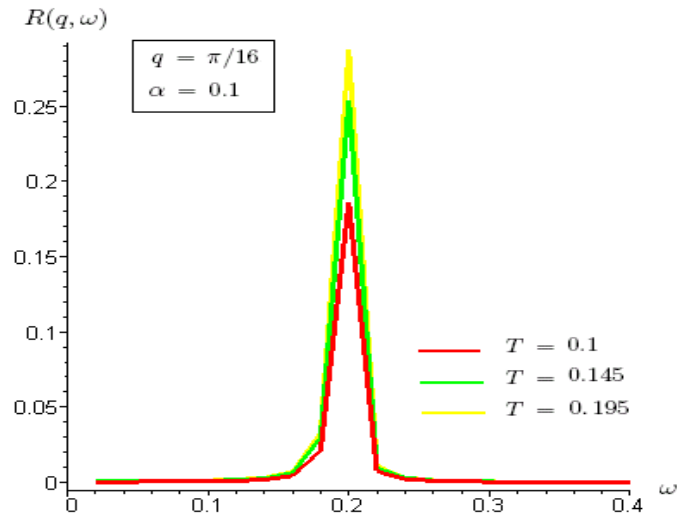


Fig. 4.5: Funções relaxação de fônons acústicos *versus* frequência para $q = \pi/16$, $\alpha = 0.1$ e três valores de temperatura: $T = 0.1, 0.145, 0.195$.

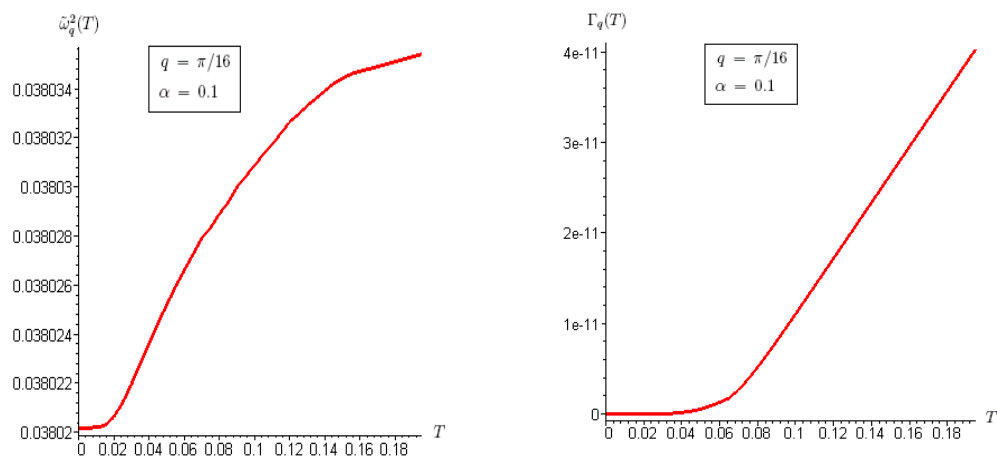


Fig. 4.6: Frequência ao quadrado (esquerda) e largura de linha (direita) de fônons acústicos *versus* temperatura para $q = \pi/16$ e $\alpha = 0.1$.

iii) A Fig. 4.7 mostra a função relaxação de fônons acústicos $R(q, \omega)$ versus frequência ω para $\alpha = 0.1$, $T = 0.1$ e três valores de vetor de onda $q = 1.1755, \pi/2, 1.9661$. A razão para a escolha de $\pi/2$ ficará clara em breve. Os outros valores de q foram tomados equidistantes de $\pi/2$. A posição do pico é máxima para o valor intermediário $q = \pi/2$ e coincide para os valores de q equidistantes de $\pi/2$. O comportamento da largura de linha não pode ser inferido com segurança a partir deste gráfico.

O gráfico à esquerda na Fig. 4.8 para $\tilde{\omega}_q^2$ versus q mostra a forma usual para a lei de dispersão de fônons óticos (ao quadrado) na zona reduzida. Ela não parece ser muito afetada pelo acoplamento com os mágnons. Entretanto, um observador cuidadoso verá uma depressão muito sutil localizada em torno de $q = \pi/2$. No gráfico central da Fig. 4.8, traçamos $\tilde{\omega}_q^2$ para $\alpha = 0.1$ e $\alpha = 0$ ($T = 0.1$), focalizando na vizinhança de $q = \pi/2$. De fato, para $\alpha = 0.1$, existe uma região preferencial de vetores de onda, em torno do centro da primeira zona de Brillouin, onde o acoplamento mágnon-fônon transfere energia do “background” elástico para o magnético. Isto indica que, longe de $q = \pi/2$, as frequências de fônons não correspondem à variação de energia de alguma possível transição de mágnon. Em princípio, para um acoplamento mais intenso, fônons menos energéticos começam a ser recrutados para a troca de energia com os mágnons.

O gráfico à esquerda na Fig. 4.8 para Γ_q versus q evidencia que o amortecimento aumenta linearmente com q na região de pequenos vetores de onda, alcançando o ponto máximo próximo a $q = 0.2$, e, a partir daí, cai a zero rapidamente. Existe outro pico de menor intensidade próximo a $q = 2.0$, pequeno o suficiente para não escalar com o pico aparente na figura. A ocorrência de picos separados por uma distância bem definida é devida ao *gap* no espectro de energia de mágnons gerado pela diferença entre o ramo mais energético $\Omega_+(q, \omega)$ e o ramo menos energético $\Omega_-(q, \omega)$. Em resumo, temos que o tempo de vida de fônons acústicos é fortemente dependente do vetor de onda, o decaimento sendo mais drástico para fônons com pequenos valores de q .

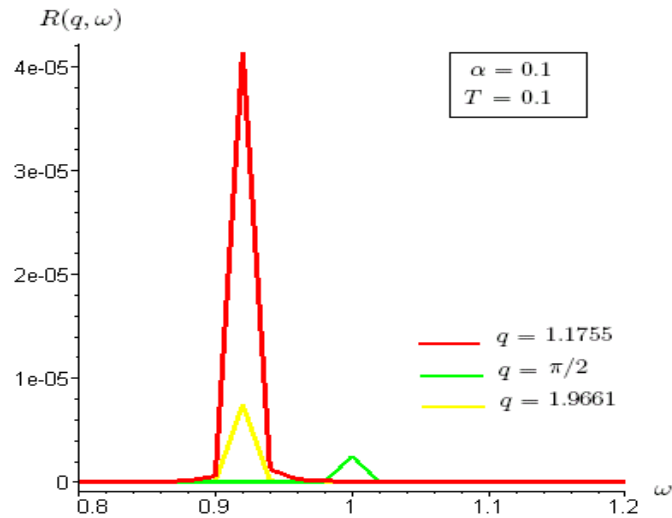


Fig. 4.7: Funções relaxação de fônons acústicos *versus* frequência para $\alpha = 0.1$, $T = 0.1$ e três valores de vetor de onda $q = 1.1755, \pi/2, 1.9661$.

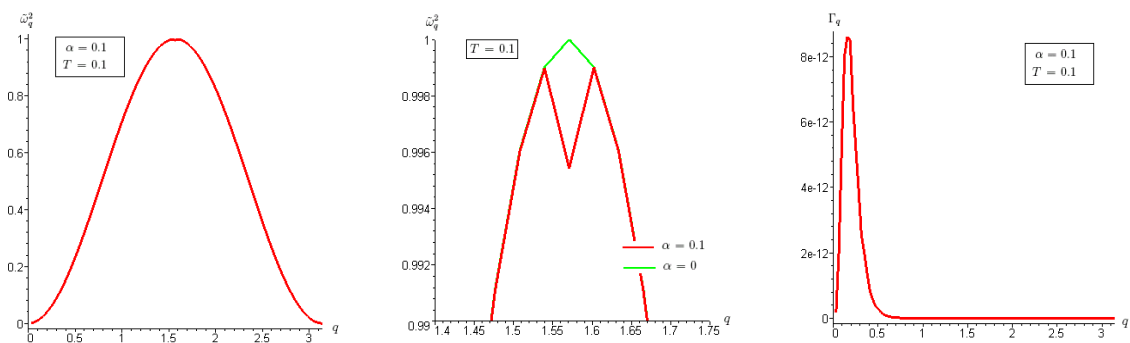


Fig. 4.8: Frequência ao quadrado (esquerda), frequência ao quadrado na vizinhança do centro primeira zona de Brillouin (centro) e largura de linha (direita) de fônons acústicos *versus* vetor de onda para $\alpha = 0.1$ e $T = 0.1$.

Finalmente, comparando a magnitude da largura de linha com a da energia, temos $\Gamma/\tilde{\omega} \ll 1$ para os três casos, indicando excitações de fônons bem definidas para todos os intervalos de parâmetros considerados.

4.5.2 Fônons Óticos

As dependências da energia e da largura de linha dos fônons óticos com a constante de acoplamento e com a temperatura são análogas às já discutidas para fônons acústicos. A energia decresce com o acoplamento e cresce com a temperatura. A largura de linha cresce tanto com o acoplamento quanto com a temperatura.

Para a dependência da energia dos fônons óticos com q , encontramos a mesma depressão em $q = \pi/2$ do caso acústico. Na Fig. 4.9 à esquerda, um *zoom* no centro da primeira zona de Brillouin mostra um gráfico comparativo para as leis de dispersão (ao quadrado) $\tilde{\omega}_q^2$, de fônons acústicos e óticos, para $\alpha = 0.1$ e $T = 0.1$. A depressão na curva acústica é acompanhada pela mesma mudança na curva ótica. Juntando-se os ramos complementares de fônons acústicos e óticos, definidos na zona de Brillouin reduzida da cadeia, obtém-se um espectro de fônons simétrico e sem *gap* na zona completa, como deve ser para massas iguais acopladas por molas de igual elasticidade.

A dependência da largura de linha de fônons óticos com q é mostrada no gráfico da direita na Fig. 4.9 para Γ_q . O pico principal ocorre em torno de $q = 2.5$, i.e., diferentemente do caso acústico, fônons óticos apresentam efeitos de tempo de vida finito mais intensos na região de grandes vetores de onda. A partir das escalas verticais dos gráficos de largura de linha acústica e ótica, é aparente que o amortecimento causado pelo acoplamento com mágnons é cem vezes mais grave para o modo ótico. São detectáveis no gráfico dois pequenos picos laterais, um à direita e adjacente ao pico principal e o outro, mais distante, na região de pequenos vetores de onda. Estes picos adicionais são devidos ao *gap* no espectro de energia de mágnons.

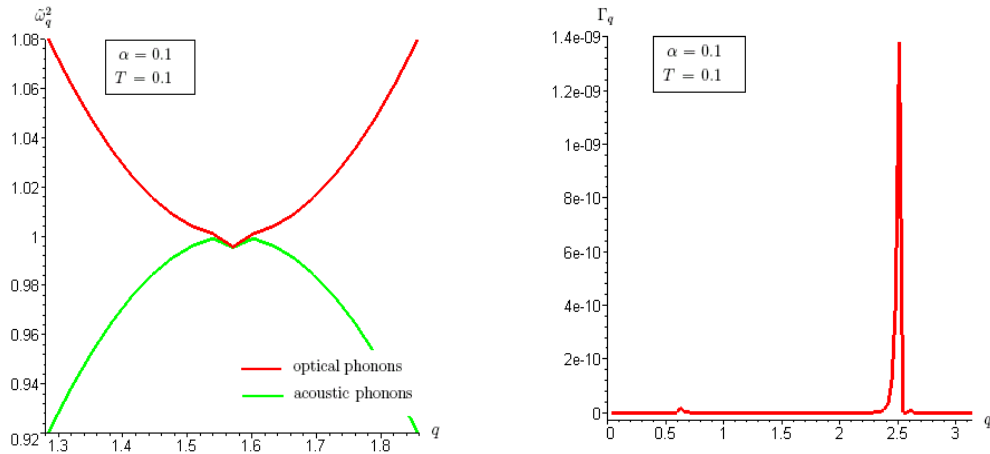


Fig. 4.9: Frequências ao quadrado de fônons acústicos e óticos na vizinhança do centro da primeira zona de Brillouin (esquerda) e largura de linha de fônons acústicos (direita) *versus* vetor de onda para $\alpha = 0.1$ e $T = 0.1$.

4.6 Conclusão

Determinamos o acoplamento entre mágnons e fônons em uma cadeia elástica AFM com $S = 1$ através de um modelo de interação obtido de um hamiltoniano de Heisenberg com parâmetro de troca dependente da posição dos íons magnéticos. O hamiltoniano individual de fônons definido em uma cadeia bipartida se separa em duas partes conectadas à geração de fônons acústicos e fônons óticos, com energias diferentes. O hamiltoniano individual de spins AFM, tratado pela teoria de ondas de spins modificada, gera mágnons com energia corrigida em relação à prevista pela teoria de ondas de spin padrão.

Para a interação, tratamos processos de dois mágnons e um fônon emergentes da expansão das funções de Green acústica e ótica até segunda ordem. As funções relaxação correspondentes foram obtidas a partir das partes real e imaginária das auto-energias.

As dependências da energia e da largura de linha de fônons com o acoplamento, temperatura e vetor de onda foram investigadas. Os resultados indicam que o acoplamento tende a transferir energia dos graus de liberdade elásticos para os graus magnéticos e a abreviar o tempo de vida dos fônons. Em temperaturas elevadas, a atividade térmica do sistema é traduzida em um aumento na energia dos fônons ao passo que intensifica seu decaimento. Na lei de dispersão, a primeira região a ser afetada pelo acoplamento é o centro da primeira zona de Brillouin, onde os fônons correspondem à ener-

gia de alguma transição de mágnon possível. A dinâmica de fônons sob a interação com mágnons é fortemente dependente de q . O pico principal da largura de linha de fônons acústicos está localizado na região de pequenos vetores de onda enquanto, para fônons óticos, ocorre o contrário.

Da coleção de resultados acima, é a energia de fônons como uma função decrescente do acoplamento que evidencia a interação mágnon-fônon como uma fonte de frustração dos spins. Resumindo, sistemas elásticos AFM 1D de spin-1 gozam de flutuações não-térmicas, engendradas pelo acoplamento mágnon-fônon, que decididamente favorecem a desordem magnética. Este efeito exclusivamente quântico, manifestamente relevante para outros sistemas de interesse atual dentro do cenário de transições de fase quânticas, pôde ser observado sob o ponto de vista da dinâmica de fônons aqui desenvolvida. Os demais resultados obtidos recuperam a fenomenologia esperada para fônons sujeitos a quaisquer interações que se somem ao potencial de rede harmônico e, portanto, apontam para a acuidade do nosso modelo de interação.

Nossos resultados podem ser comparados com espalhamento de neutrons ou raio-X em compostos capazes de realizar estruturas AFM 1D de spin-1, ajustando-se os correspondentes dados experimentais com as funções relaxação teóricas (ou, equivalentemente, o fator de estrutura dinâmico). Entretanto, até onde sabemos, tais resultados experimentais não se encontram disponíveis na literatura para os sistemas de interesse. Esperamos que este trabalho possa estimular esforços experimentais no sentido de checar as presentes predições teóricas.

5. CONCLUSÕES

Tendo em vista a pesquisa de fronteira em física de transições de fase quânticas e sua conexão com o antiferromagnetismo de baixa dimensionalidade, o foco deste doutorado foi o estudo de sistemas AFM 1D de spin-1. Estes sistemas foram abordados dentro do ferramental de dois modelos complementares: o Modelo de Heisenberg e o Modelo Sigma não Linear. Para o primeiro, estudamos o acoplamento entre os graus de liberdade magnéticos e elásticos da cadeia e sua influência sobre a dinâmica dos fônons. Para o segundo, analisamos como o acoplamento com um ruído branco pode mapear o comportamento térmico do modelo na fenomenologia observada para sistemas AFM reais.

O trabalho no MSNL foi motivado principalmente pela idéia de tratar um modelo já bastante explorado para a análise do antiferromagnetismo sob um ponto de vista diferente do padrão e, acreditamos, mais fenomenológico. Substituímos a estabelecida estatística de Boltzmann para a obtenção da termodinâmica do modelo pelo acoplamento direto entre o parâmetro de ordem e um campo externo com determinadas características estocásticas. Neste sentido, nosso método se assemelha mais à prescrição de Langevin para a introdução da temperatura em sistemas físicos. Acreditamos que a abordagem proposta - contemplar os efeitos do banho térmico através de um campo efetivo presente já no hamiltoniano - possui o apelo conceitual de colocar em evidência o papel das flutuações estatísticas na dinâmica dos sistemas.

No que se refere à aplicação em cadeias AFM de spin inteiro, o campo proposto pode ser interpretado como um veículo efetivo tanto para o campo cristalino sobre cada spin quanto para as flutuações térmicas do sistema. Através do nosso método, conseguimos aproximar a curva teórica para o *gap* em função da temperatura dos dados experimentais do composto Y_2BaNiO_5 , considerado o melhor representante de cadeias AFM de spin-1. Em particular, obtivemos a equação típica para o *gap* em $T = 0$ e seu comportamento qualitativo como uma função crescente da temperatura.

O acoplamento com o campo efetivo introduz um canal de decaimento para os mágnons que não é contemplado no MSNL puro tratado via Boltzmann. A ocorrência da largura de linha correspondente é entendida como um efeito conjunto das flutuações térmicas e do potencial cristalino sobre os spins, abreviando o tempo de vida dos mágnons. Dado o grau da aproximação utilizada, a curva teórica para a largura de linha em função da temperatura apresentou satisfatória concordância com os dados experimentais do composto Y_2BaNiO_5 . A largura de linha crescente com a temperatura está de acordo com a expectativa qualitativa de que, quanto mais intensas as flutuações térmicas no sistema, maior o amortecimento sobre suas excitações elementares.

Portanto, como abordagem para o antiferromagnetismo, nosso método pode ser considerado um refinamento em relação ao MSNL sem campo externo acompanhado de uma simplificação algébrica dada pela substituição do poderoso, e neste caso mais trabalhoso, maquinário de Boltzmann por uma descrição térmica efetiva de fácil manipulação. Trata-se de uma “negociação” muito cara aos físicos que, em última análise, estão sempre a procura da forma mais econômica de adequar seus modelos ao comportamento da natureza, sem abrir mão de conceitos fundamentais.

O trabalho no Modelo de Heisenberg AFM 1D de spin-1 acoplado com fônons teve por objetivo principal cobrir uma lacuna existente na literatura a respeito da fenomenologia magneto-elástica na cadeia AFM de spin inteiro. Contribuímos com a determinação da dinâmica dos fônons sob o acoplamento com os mágnons AFM da cadeia, gerando previsões para a energia e largura de linha em função dos parâmetros do modelo. Além disso, acreditamos que o presente trabalho contribui para o entendimento do acoplamento mágnon-fônon como um possível mecanismo por trás de fenômenos relacionados com a nova física de transições de fase quânticas.

De fato, a energia dos fônons acústicos e óticos como uma função decrescente do acoplamento indica uma conexão com o cenário de efeitos quânticos conduzindo a matéria para estados não previstos pela termodinâmica clássica. A transferência de energia dos fônons para os mágnons, intensificando a desordem magnética, mostra a assinatura da ocorrência de excitações quânticas importantes em cadeias AFM de spin-1.

Complementando o resultado anterior, checamos outras dependências correspondentes à fenomenologia ordinária de uma cadeia elástica sujeita a outros potenciais além do termo harmônico. Como esperado, a energia dos

fônons acústicos e óticos aumenta com a temperatura, i.e., com a agitação térmica do sistema. As leis de dispersão de fônons acústicos e óticos são afetadas pelo acoplamento com mágnons em uma região localizada da zona de Brillouin, onde os fônons podem induzir alguma transição magnética permitida. Como esperado, as larguras de linha acústica e ótica crescem com o acoplamento, de acordo com a idéia de que as interações tendem a abreviar o tempo de vida das excitações. As larguras de linha também crescem com a temperatura, sendo agora a agitação térmica do sistema a amortecer os fônons, e se desenvolvem em picos em torno de posições razoáveis dentro da primeira zona de Brillouin.

Observamos que os dois trabalhos desenvolvidos neste doutorado podem ser considerados complementares no que diz respeito a concepção metodológica e os resultados obtidos. Enquanto o MSNL acoplado com um ruído propõe uma tecnologia alternativa à bem estabelecida prescrição de Boltzmann para a termodinâmica do modelo, o trabalho no acoplamento mágnon-fônon é ortodoxo em relação às técnicas de cálculo utilizadas, em particular, na abordagem de temperatura finita. Por outro lado, ao passo que o primeiro trabalho refina resultados já existentes na literatura, o segundo gera resultados novos, que vêm somar ao conhecimento estabelecido sobre o assunto.

APÊNDICE

A. INTEGRAÇÃO NUMÉRICA DE FUNÇÕES COM DENOMINADORES QUE SE ANULAM

Queremos calcular integrais do tipo

$$I(q; \omega) = \int_a^b \frac{f(q, k)}{\omega - \Omega(q, k)} dk \quad (\text{A.1})$$

onde $f(q, k)$ e $\Omega(q, k)$ são funções complicada de k (e q) e ω é um parâmetro constante com respeito à variável de integração.

A idéia é dividir o intervalo $[a, b]$ em N sub-intervalos iguais $[k_i, k_{i+1}]$ de comprimento $\Delta k = (b - a)/N$ e aproximar a integral, por um método controlado, dentro de cada sub-intervalo. A integral total será estimada pela soma dos N valores assim calculados:

$$I(q; \omega) = \sum_{i=0}^{N-1} I_i(q; \omega)$$

$$I_i(q; \omega) = \int_{k_i}^{k_{i+1}} \frac{f(q, k)}{\omega - \Omega(q, k)} dk \quad (\text{A.2})$$

A aproximação mais comum para a integral em um intervalo pequeno é dada pela “regra do trapézio” que consiste em multiplicar o integrando avaliado no ponto médio do intervalo pelo comprimento deste. Este método só é uma boa aproximação quando os integrandos são funções bem comportadas, digamos $g(k)$, de modo que sua partição nos sub-intervalos $[k_i, k_{i+1}]$ possa ser feita tal que

$$\lim_{k \rightarrow \tilde{k}^+} g(k) = \lim_{k \rightarrow \tilde{k}^-} g(k) < \infty \quad \forall \quad \tilde{k} \in [k_i, k_{i+1}] \quad e \quad i = 0, 1, \dots, N - 1$$

O integrando da Eq. (A.1) não obedece necessariamente esta condição dentro de todos os intervalos $[k_i, k_{i+1}]$. Em particular, para algum $i = 0, 1, \dots, N - 1$, pode existir $k^* \in [k_i, k_{i+1}]$ tal que $\omega - \Omega(q, k^*) = 0$ e $f(q, k^*) \neq 0$. Neste ponto:

$$\lim_{k \rightarrow k^*} \frac{f(q, k)}{\omega - \Omega(q, k)} = \pm \infty$$

Precisamos de uma estimativa para $I_i(q; \omega)$ mais sofisticada do que a regra do trapézio. Sendo $f(q, k)$ bem comportada, a primeira aproximação é dada por

$$I_i(q; \omega) = f(q, \bar{k}_i) \int_{k_i}^{k_{i+1}} \frac{dk}{\omega - \Omega(q, k)} \quad (\text{A.3})$$

onde

$$\bar{k}_i = \frac{k_i + k_{i+1}}{2} \quad (\text{A.4})$$

é o ponto médio de $[k_i, k_{i+1}]$. O denominador singular será então tratado de forma mais cuidadosa. (Após a retirada da função $f(q, k)$ de dentro da integral, gostaríamos de poder integrar (A.3) exatamente mas $\Omega(q, k)$ é uma função complicada e o cálculo analítico é impossível.)

Aproximamos então, em cada $[k_i, k_{i+1}]$,

$$\Omega(q, k) \approx \Omega(q, \bar{k}_i) + \Omega'(q, \bar{k}_i)(k - \bar{k}_i) \quad (\text{A.5})$$

onde $\Omega'(q, \bar{k}_i) = \frac{\partial \Omega(q, k)}{\partial k} \Big|_{k=\bar{k}_i}$.

Com isso

$$I_i(q; \omega) = f(q, \bar{k}_i) \int_{k_i}^{k_{i+1}} \frac{dk}{D_i(q, k; \omega)} \quad (\text{A.6})$$

com $D_i(q, k; \omega)$, definida em $[k_i, k_{i+1}]$, dada por:

$$D_i(q, k; \omega) = -\Omega'(q, \bar{k}_i)k + [\omega - \Omega(q, \bar{k}_i) + \Omega'(q, \bar{k}_i)\bar{k}_i] \quad (\text{A.7})$$

Analisando os possíveis comportamentos de $D_i(q, k; \omega)$ dentro de seu domínio, vamos atribuir valores aproximados para $I_i(q; \omega)$.

1) $\Omega'(q, \bar{k}_i) \neq 0$ e $\omega - \Omega(q, \bar{k}_i) \neq 0$

1.1) $D_i(q, k; \omega) \neq 0 \quad \forall \quad k \in [k_i, k_{i+1}]$

$$I_i(q; \omega) \approx -\frac{f(q, \bar{k}_i)}{\Omega'(q, \bar{k}_i)} \ln \left| \frac{\omega - \Omega(q, k_{i+1})}{\omega - \Omega(q, k_i)} \right| \quad (\text{A.8})$$

1.2) $\exists k = k_i^* \in [k_i, k_{i+1}]$ tal que $D_i(q, k_i^*; \omega) = 0$

$$I_i(q; \omega) \approx -\frac{f(q, \bar{k}_i)}{\Omega'(q, \bar{k}_i)} \ln \left(\frac{k_{i+1} - k_i^*}{k_i^* - k_i} \right) \quad (\text{A.9})$$

$$1.3) D_i(q, k_i; \omega) = 0 \text{ ou } D_i(q, k_{i+1}; \omega) = 0$$

Usando a Eq. (A.9) com $k_i^* = k_i$ ou $k_i^* = k_{i+1}$ temos

$$I_i(q; \omega) = -\infty \quad \text{ou} \quad I_i(q; \omega) = +\infty \quad (\text{A.10})$$

respectivamente. Neste caso, deve-se mudar o número de sub-intervalos N de modo a deslocar seus extremos, evitando a ocorrência de 1.3).

$$2) \Omega'(q, \bar{k}_i) = 0 \text{ e } \omega - \Omega(q, \bar{k}_i) \neq 0$$

$$\Rightarrow D_i(q, k; \omega) = \omega - \Omega(q, \bar{k}_i) = cte \neq 0 \quad \forall \quad k \in [k_i, k_{i+1}]$$

$$I_i(q; \omega) \approx \frac{f(q, \bar{k}_i)}{\omega - \Omega(q, \bar{k}_i)} \Delta k \quad (\text{A.11})$$

$$3) \Omega'(q, \bar{k}_i) \neq 0 \text{ e } \omega - \Omega(q, \bar{k}_i) = 0$$

$$\Rightarrow D_i(q, k; \omega) = -\Omega'(q, \bar{k}_i)(k - \bar{k}_i)$$

$$I_i(q; \omega) \approx -\frac{f(q, \bar{k}_i)}{\Omega'(q, \bar{k}_i)} \ln \left| \frac{k_{i+1} - \bar{k}_i}{k_i - \bar{k}_i} \right| = 0 \quad (\text{A.12})$$

$$4) \Omega'(q, \bar{k}_i) = \omega - \Omega(q, \bar{k}_i) = 0$$

$$\Rightarrow D_i(q, k; \omega) = 0 \quad \forall \quad k \in [k_i, k_{i+1}]$$

$$I_i(q; \omega) = \infty \quad (\text{A.13})$$

Neste caso, deve-se mudar o número de sub-intervalos N de modo a deslocar seus extremos, evitando a ocorrência de 4).

O resultado final é dado pelas Eqs. (A.2) com:

$$I_i(q; \omega) = \begin{cases} -\frac{f(q, \bar{k}_i)}{\Omega'(q, k_i)} \ln \left| \frac{\omega - \Omega(q, k_{i+1})}{\omega - \Omega(q, k_i)} \right| & \text{se 1.1)} \\ -\frac{f(q, \bar{k}_i)}{\Omega'(q, k_i)} \ln \left(\frac{k_{i+1} - k_i^*}{k_i^* - k_i} \right) & \text{se 1.2)} \\ \frac{f(q, \bar{k}_i)}{\omega - \Omega(q, k_i)} \Delta k & \text{se 2)} \\ 0 & \text{se 3)} \end{cases} \quad (\text{A.14})$$

B. OBTENÇÃO NUMÉRICA DOS ZEROS DE UMA FUNÇÃO

Queremos encontrar os zeros da função contínua de k

$$D(q, k; \omega) = \omega - \Omega(q, k) \quad (\text{B.1})$$

pertencentes ao intervalo $[a, b]$, dados q e ω .

A necessidade de um método numérico aparece quando $\Omega(q, k)$ é uma função complicada, impedindo que a variável k seja isolada em termos de q e ω na equação:

$$\Omega(q, k) = \omega \quad (\text{B.2})$$

Sejam

$$k = k^\alpha(q, \omega) \in [a, b] \quad (\text{B.3})$$

com $\alpha = 1, 2, \dots, L$, as L raízes da Eq. (B.2), i.e., os zeros da função $D(q, k; \omega)$. Os valores de $k^\alpha(q, \omega)$ podem ser estimados numericamente por um método gráfico: investiga-se o sinal de $D(q, k; \omega)$ em função de k ; os pontos onde a função muda de sinal são seus zeros. Os zeros que não obedecem tal condição são, necessariamente, pontos de derivada nula da função $\Omega(q, k)$ em relação a k .

★ Pré-requisitos para as entradas do método numérico

O método aqui desenvolvido é adaptado à utilização no cálculo da Eq. (4.62) de modo que os zeros encontrados não sejam, simultaneamente, pontos de derivada nula de $\Omega(q, k)$, já que isto geraria divergências em $\Sigma''(q; \omega)$. Além disso, queremos analisar $\Sigma''(q; \omega)$ como função de ω para um valor fixo de q . Definimos uma coleção de valores de q e ω , digamos $\{q_i\} = \{q_i \in [q^i, q^f]; i = 1, \dots, M_1\}$ e $\{\omega_j\} = \{\omega_j \in [\omega^i, \omega^f]; j = 1, \dots, M_2\}$, tal que, para cada q_i , ω percorre todos os valores de $\{\omega_j\}$.

De modo a evitar os zeros que sejam, simultaneamente, pontos de derivada nula, deve-se tomar q_i e ω_j tais que:

$$\text{se } \exists k^\alpha \in [a, b] \text{ tal que } \Omega(q_i, k^\alpha) = \omega_j \text{ então } \left. \frac{\partial \Omega(q_i, k)}{\partial k} \right|_{k=k^\alpha} \neq 0. \quad (\text{c.1})$$

Uma forma de implementar tal condição é avaliar $\Omega(q_i, k)$ nos pontos de derivada nula através de algum processo gráfico e então definir $\{\omega_j\}$ “pulando” os valores assim encontrados¹. Tendo isto em mente, nosso ponto de partida é que todos os zeros de $D(q_i, k; \omega_j)$ são pontos de mudança de sinal.

Dividimos o intervalo $[a, b]$ em N_1 sub-intervalos iguais $[k_l, k_{l+1}]$ de comprimento $\Delta k_1 = (b - a)/N_1$ e avaliamos $D(q_i, k; \omega_j)$ nos extremos de cada sub-intervalo. Seja $S[f(x)]$ a função que retorna o sinal de $f(x)$. Como $D(q_i, k; \omega_j)$ é contínua em cada $[k_l, k_{l+1}]$:

Se

$$S[D(q_i, k_l; \omega_j)] = S[D(q_i, k_{l+1}; \omega_j)] \quad (\text{B.4})$$

então ou $D(q_i, k; \omega_j)$ não possui zero em $[k_l, k_{l+1}]$ ou possui no mínimo dois.

Se

$$S[D(q_i, k_l; \omega_j)] \neq S[D(q_i, k_{l+1}; \omega_j)] \quad (\text{B.5})$$

então $D(q_i, k; \omega_j)$ possui no mínimo um zero em $[k_l, k_{l+1}]$.

Refinando-se cada vez mais a partição de $[a, b]$, pode-se garantir que, para um dado valor de N_1 , cada sub-intervalo contenha, no máximo, um zero de $D(q_i, k; \omega_j)$. Este N_1 é tal que Δk_1 seja menor do que a distância entre os zeros consecutivos mais próximos entre si, quando são examinados todos os zeros de $D(q_i, k; \omega_j)$, dado q_i e $\{\omega_j\}$. Tais zeros correspondem ao cruzamento do ω_j mais próximo de um extremo de $\Omega(q_i, k)$ e esta função. Seja $\tilde{\omega}$ este tal ω_j e $\Delta \tilde{k}$ a distância entre os zeros definidos por $\tilde{\omega}$.

Devemos ter $\Delta k_1 < \Delta \tilde{k}$. Pode-se estimar $\Delta \tilde{k}$ através de algum processo gráfico² e, então, tomar N_1 tal que:

$$\frac{b-a}{N_1} < \Delta \tilde{k} \quad (\text{c.2})$$

Definidos os valores de entrada $\{q_i\}$ e $\{\omega_j\}$ de acordo com a condição (c.1) e assegurada a condição (c.2), podemos partir para o método numérico propriamente dito para a obtenção dos zeros da função $D(q_i, k; \omega_j)$.

¹ Utilizamos o *software Maple* para traçar $\Omega(q_i, k)$ em função de k e estimar os pontos de derivada nula.

² Utilizamos o *software Maple* para estimar $\Delta \tilde{k}$ a partir da curva de $\Omega(q_i, k)$ e a coleção $\{\omega_j\}$.

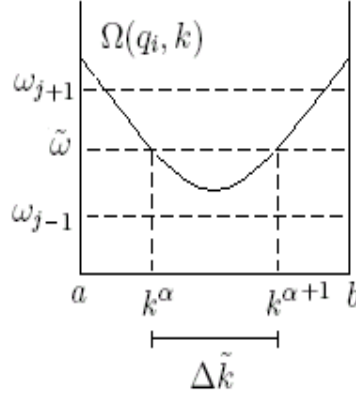


Fig. B.1: Representação de $\Omega(q_i, k)$ e dos zeros consecutivos de $D(q_i, k; \omega_j)$ mais próximos entre si.

★ *Método numérico de obtenção dos zeros da função $D(q_i, k; \omega_j)$*

Investigaremos o sinal de $D(q_i, k; \omega_j)$ nos extremos de $[k_l, k_{l+1}]$, contemplando a possibilidade de que a função se anule exatamente em algum dos extremos:

Se

$$D(q_i, k_l; \omega_j) = 0 \quad (\text{B.6})$$

então k_l é um zero de $D(q_i, k; \omega_j)$.

Se

$$D(q_i, k_{l+1}; \omega_j) = 0 \quad (\text{B.7})$$

então k_{l+1} é um zero de $D(q_i, k; \omega_j)$.

Se

$$S[D(q_i, k_l; \omega_j)] = S[D(q_i, k_{l+1}; \omega_j)] \quad (\text{B.8})$$

então $D(q_i, k; \omega_j)$ não possui zero em $[k_l, k_{l+1}]$.

Se

$$S[D(q_i, k_l; \omega_j)] \neq S[D(q_i, k_{l+1}; \omega_j)] \quad (\text{B.9})$$

então $D(q_i, k; \omega_j)$ possui um, e apenas um, zero em $[k_l, k_{l+1}]$.

Ocorrendo (B.6)

$$k^\alpha = k_l \quad (\text{B.10})$$

Ocorrendo (B.7)

$$k^\alpha = k_{l+1} \quad (\text{B.11})$$

Ocorrendo (B.8), passa-se à busca pelo zero de $D(q_i, k; \omega_j)$ ao próximo intervalo $[k_{l+1}, k_{l+2}]$ através de uma análise semelhante a (B.6)-(B.9).

Ocorrendo (B.9), refinamos a localização do zero ali existente particionando $[k_l, k_{l+1}]$ em N_2 sub-intervalos iguais $[k_{l+\frac{m}{N_2}}, k_{l+\frac{m+1}{N_2}}]$ ($m = 0, 1, \dots, N_2 - 1$) de comprimento $\Delta k_2 = \Delta k_1 / N_2 = (b - a) / N_1 N_2$. Avaliamos $D(q_i, k; \omega_j)$ nos extremos de cada sub-intervalo.

Se

$$D(q_i, k_{l+\frac{m}{N_2}}; \omega_j) = 0 \quad (\text{B.12})$$

então $k_{l+\frac{m}{N_2}}$ é um zero de $D(q_i, k; \omega_j)$.

Se

$$D(q_i, k_{l+\frac{m+1}{N_2}}; \omega_j) = 0 \quad (\text{B.13})$$

então $k_{l+\frac{m+1}{N_2}}$ é um zero de $D(q_i, k; \omega_j)$.

Se

$$S[D(q_i, k_{l+\frac{m}{N_2}}; \omega_j)] = S[D(q_i, k_{l+\frac{m+1}{N_2}}; \omega_j)] \quad (\text{B.14})$$

então $D(q_i, k; \omega_j)$ não possui zero em $[k_{l+\frac{m}{N_2}}, k_{l+\frac{m+1}{N_2}}]$.

Se

$$S[D(q_i, k_{l+\frac{m}{N_2}}; \omega_j)] \neq S[D(q_i, k_{l+\frac{m+1}{N_2}}; \omega_j)] \quad (\text{B.15})$$

então $D(q_i, k; \omega_j)$ possui um, e apenas um, zero em $[k_{l+\frac{m}{N_2}}, k_{l+\frac{m+1}{N_2}}]$.

Ocorrendo (B.12)

$$k^\alpha = k_{l+\frac{m}{N_2}} \quad (\text{B.16})$$

Ocorrendo (B.13)

$$k^\alpha = k_{l+\frac{m+1}{N_2}} \quad (\text{B.17})$$

Ocorrendo (B.14), passa-se à busca pelo zero de $D(q_i, k; \omega_j)$ ao próximo intervalo $[k_{l+\frac{m+1}{N_2}}, k_{l+\frac{m+2}{N_2}}]$ através de uma análise semelhante a (B.12)-(B.15).

Ocorrendo (B.15), podemos reaplicar o processo de sub-divisão do intervalo, e assim até um refinamento de ordem n onde sub-dividimos o intervalo

contendo o zero em N_n pequenas partes. Para N_2 suficientemente grande, podemos parar no refinamento de segunda ordem e tomar o zero contido em $[k_{l+\frac{m}{N_2}}, k_{l+\frac{m+1}{N_2}}]$ como sendo o ponto médio deste intervalo:

$$k^\alpha = \frac{1}{2}(k_{l+\frac{m}{N_2}} + k_{l+\frac{m+1}{N_2}}) \quad (\text{B.18})$$

Procedendo assim para todos os intervalos $[k_l, k_{l+1}]$ ($l = 0, \dots, N - 1$) encontra-se todos os zeros de $D(q_i, k; \omega_j)$ pertencentes a $[a, b]$ com uma precisão de, no mínimo $p = \frac{\Delta k_2}{2} = \frac{b-a}{2N_1N_2}$, já que a distância entre o zero real e o valor estimado é menor que a distância deste a uma das extremidades do intervalo que o contém.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] H. Bethe, Z. Phys. **71**, 205 (1931).
- [2] L. Hulthén, Ark. Met. Astron. Fysik. **26A**, Na.11 (1938).
- [3] F. Bloch, Z. Phys. **74**, 295 (1932).
- [4] T. Holstein e H. Primakoff, Phys. Rev. **58**, 1048 (1940).
- [5] P.W. Anderson, Phys. Rev. B **86**, 694 (1952).
- [6] R. Kubo, Phys. Rev. **87**, 568 (1952).
- [7] J. Schwinger *On Angular Momentum* (U.S. Atomic Energy Commission Rpt. NYO-3071, 1952) re-impreso *Quantum Theory of Angular Momentum* (L. Biedenharn and H. Van Dam, Academic, New York, 1965).
- [8] F. Dyson, Phys. Rev. **102**, 1217 (1956).
- [9] S.V. Maléev, Sov. Phys. JETP **6**, 776 (1958).
- [10] J. Villain, J. de Phys. **35**, 27 (1974).
- [11] P. Jordan, E. Wigner, Z. Phys. **47**, 631 (1928).
- [12] FDM. Haldane, Phys. Lett. A **93**, 464 (1983).
- [13] FDM. Haldane, Phys. Rev. Lett. **50**, 1153 (1983).
- [14] G.D. Mahan *Many-Particle Physics* (Plenum Press, New York and London, 1986), Cap. 1 e Cap. 2.
- [15] G.D. Mahan *Many-Particle Physics* (Plenum Press, New York and London, 1986), Cap. 3.
- [16] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloe *Quantum Mechanics - Volume Two* (John Wiley and Sons, Inc. and Hermann, 1977), pg. 1428. (???)
- [17] E. Ising, Z. Phys. **31**, 253 (1925).

- [18] S.G. Brush, Rev. Mod. Phys. **39**, 883 (1967).
- [19] E. Lieb, T. Schultz e D. Mattis, Ann. Phys. **16**, 407 (1961).
- [20] H.J. Schulz e T. Ziman, Phys. Rev. Lett., **59**, 140 (1987).
- [21] D.C. Mattis *The Theory of Magnetism I - Statics and Dynamics* (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1981).
- [22] J. Van Kranendonk, J.H. Van Vleck, Rev. Mod. Phys. **30**, No. 1, 1 (1958).
- [23] J. des Clouizeaux e J.J. Pearson, Phys. Rev. **128**, 2131 (1962).
- [24] R.B. Griffiths, Phys. Rev. **133**, A768 (1964).
- [25] E. Pytte, Phys. Rev. B, **10**, 4637 (1974).
- [26] M. Takahashi, Phys. Rev. B **40**, 2494 (1989).
- [27] D.P. Arovas e A. Auerbach, Phys. Rev. B **38**, 316 (1988).
- [28] J.E. Hirsch e S. Tang, Phys. Rev. B **40**, 4769 (1989).
- [29] I. Affleck, J. Phys. A, **31**, 4573 (1998).
- [30] K. Damle and S. Sachdev, Phys. Rev. B **57**, No. 14, 8307 (1998).
- [31] N. Read and S. Sachdev, Phys. Rev. B **42**, 4568 (1990).
- [32] T. Senthil et al., Cond-Mat. **0312617**, v1 (2003).
- [33] F. Vernay, A. Ralko, F. Becca et al., Phys. Rev. B **74**, No. 5, Art. No. 054402, (2006).
- [34] F. Alet et al., Cond-Mat. **0511516**, v1 (2005).
- [35] T. Senthil et al., Cond-Mat. **0404718**, v2 (2004).
- [36] T. Senthil et al., Cond-Mat. **0311326**, v1 (2003).
- [37] S. Caracciolo *et al.*, Phys. Rev. Lett. **75**, 1891, (1995).
- [38] E. Fradkin *Field Theories of Condensed Matter Systems* (Frontiers in Physics, Addison-Wesley Publishing Company, The Advanced Book Program, 1991).

- [39] M. Malard Sales, *O Formalismo da Integral de Caminho e Aplicação no Modelo Sigma não Linear* (dissertação de mestrado, UFMG, Belo Horizonte, 2003).
- [40] J.B. Marion e S.T. Thornton *Classical Dynamics of Particle and Systems* (Saunders College Publishing, Harcourt Brace College Publishing ,Fourth Eddition, 1995), Cap. 7.
- [41] Th. Jolicoeur and O. Golinelli, Phys. Rev. B **50**, No. 13, 9265 (1994).
- [42] E. Ercolessi, G. Morandi, P. Pieri and M. Roncaglia, Phys. Rev. B **62**, No. 22, 14860 (2000).
- [43] D. Lurie, *Particles and Fields* (Interscience Publishers, a division of John Wiley and sons, New York.London.Sydney,1968).
- [44] R. Shankar e N. Read, Nuclear Phys. **B336**, 457 (1990).
- [45] S. Chakravarty, B.I. Halperin e D. Nelson, Phys. Rev. Lett. **60**, 1057 (1988).
- [46] S. Chakravarty, B.I. Halperin e D. Nelson, Phys. Rev. B **39**, 2344 (1989).
- [47] N.D. Mermin e H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **22**, 1133 (1966).
- [48] B.B. Beard, R.J. Birgeneau, M. Greven e U.-J. Wiese, Phys. Rev. Lett. **80**, 1742 (1998).
- [49] J.-K. Kim e M. Troyer, Phys. Rev. Lett. **80**, 2705 (1998).
- [50] N. Elstner, A. Sokol, R.R.P. Singh, M. Greven e R.J. Birgeneau, Phys. Rev. Lett. **75**, 938 (1995).
- [51] A. Cuccoli, V. Tognetti, P. Veruchi e R. Vaia, J. Applied Phys. **85**, 6079 (1999).
- [52] T. Sakaguchi *et al.*, J. Phys. Soc. Jap. **65**, 3025 (1996).
- [53] A. Zheludev *et al.*, Phys. Rev. B **53**, 15004 (1996).
- [54] M. Malard Sales, A.S.T. Pires, R. Dickman e M.C. Nemes, Phys. A **370**, 601 (2006).
- [55] N. G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, (North-Holland, Amsterdam, 1992).

- [56] T. Rudolf *et al.*, Cond. Mat., **0701080v1** (2007).
- [57] T. Rudolf *et al.*, Phys. Rev. B, **75**, 052410 (2007).
- [58] X. Su e H. Zheng, Solid State Comm., **109**, 323 (1999).
- [59] X.B. Wang *et al.*, Phys. Rev. B, **50**, 7056 (1994).
- [60] M.E. Gouvea e A.S.T. Pires, Phys. Rev. B, **75**, 052401 (2007) e referências lá encontradas.
- [61] P.W. Anderson, Science, **235**, 1196 (1987).
- [62] Craig J. Fennie e Karin M. Rabe, Phys. Rev. Lett., **96** (2006).
- [63] J. Hemberger *et al.*, Phys. Rev. Lett., **97** (2006).
- [64] K.Y. Choi *et al.*, Phys. Rev. B, **73** (2006).
- [65] A.B. Sushkov *et al.*, Phys. Rev. Lett., **94** (2005).
- [66] J. Fizez, B. De Raedt e H. De Raedt, J. Phys. C: Solid State Phys., **14**, 2923 (1981).
- [67] J. Fizez, H. De Raedt e B. De Raedt, Phys. Rev. B, **21**, 5330 (1980).
- [68] A.S.T Pires, Solid State Comm., **129**, 621 (2004).
- [69] M. Holicki, H. Fehske e R. Werner, Phys. Rev. B, **63** (2001).
- [70] P. Sun, D. Schmeltzer e A.R. Bishop, Phys. Rev. B, **62** (2000).
- [71] H.J. Schulz, Phys. Rev. B, **34**, 6372 (1986).
- [72] T.M. Cheng, L. Li e X. Ze, Solid State Comm., **141**, 89 (2007).
- [73] T.M. Cheng, L. Li e X. Ze, Phys. Lett. A, **353**, 431 (2006).
- [74] L.M. Woods, Phys. Rev. B, **65** (2001).
- [75] J.M. Wesselinowa, J.M.M.M, **279**, 276 (2004).
- [76] T. Jalborg, Cond. Mat., **0508672v1** (2005).
- [77] A.S.T. Pires and M.E. Gouvea, J. M. M. M. **241**, 315 (2002).
- [78] M.E. Gouvea, não publicado.
- [79] K.F. McCarty *et al.*, Phys. Rev. B, **43**, No. 16, 13751 (1991).