

**Dinâmica de spin da cadeia de Heisenberg
antiferromagnética de spin 1 com interações
entre primeiros e segundos vizinhos**

GERALDO MOREIRA DA ROCHA FILHO

Agosto de 2007

**Dinâmica de spin da cadeia de Heisenberg
antiferromagnética de spin 1 com interações entre primeiros
e segundos vizinhos**

GERALDO MOREIRA DA ROCHA FILHO

Orientadora: Dr^a. Maria Elizabeth de Gouvêa

Co-orientador: Dr. Antônio Sérgio Teixeira Pires

Tese apresentada à
UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS,
como requisito parcial para a obtenção do grau de
DOUTOR EM CIÊNCIAS.

Agosto de 2007

Agradecimentos

- A Deus, em primeiro lugar.
- À Beth, por sua amizade, dedicação e competência como orientadora.
- Ao Prof. Antônio Sérgio, por sua dedicação e competência como co-orientador.
- À minha esposa, Aparecida, e à minha filha Sarah, pela companhia, pelo afeto e pelo carinho.
- Ao meu papai (Em Memória) e à minha vovó Julieta (Em Memória).
- À minha mamãe, pelo seu apoio e pela sua motivação durante toda minha vida.
- Aos meus irmãos Carmen, Wander e Ney Marcos.
- A todos os meus tios(as), primos(as) e parentes, especialmente ao meu primo Luiz.
- Aos colegas: Rodrigo (“*Pop Star*”), Marcos Paulo e Mariana, pelas discussões sob magnetismo.
- Aos funcionários Shirley, Marluce, Perpétua e Edina, em especial ao Gilberto, Rubens e Valter pela amizade.
- Aos colegas de pós-graduação.
- À CAPES, que financiou este trabalho.

Abstract

We present low-temperature static and dynamic properties of the quantum one-dimensional isotropic spin-1 Heisenberg magnetic system with antiferromagnetic nearest-neighbor (nn) and next-nearest-neighbor (nnn) interactions. The modified spin-wave theory is used to provide quantities as the spin-wave dispersion relation, the ground-state energy, the gap and its dependence with temperature, and the asymptotic behavior of the spin-spin correlation function. The ground state energy and the singlet-triplet energy gap are obtained for several values of j , defined as the ratio of the nnn interaction constant to the nn one. We also compare two different ways of implementing the MSW (Modified Spin-Wave) theory currently found in the literature, and show that, despite the remarkable differences between the equations to be solved in each procedure, the results given by both are equivalent, except for the predicted value of the j_{max} , the maximum value of j accessible in each treatment. Our results show that the ground state and the gap energies increase with j , for $j \leq j_{max}$, in accordance with numerical results available in the literature.

The calculation of the dynamic correlation function is performed using the projection operator formalism: the procedure includes up to two-magnon processes. We show that, depending on the values of the frustration parameter j , of the wavevector and temperature, a double peak structure for the dynamical correlation function can develop.

Resumo

Neste trabalho, apresentamos as propriedades estáticas e dinâmicas do sistema magnético de Heisenberg quântico de spin-1 isotrópico unidimensional com interações antiferromagnéticas entre primeiros e segundos vizinhos. Usando a teoria de onda de spin modificada, obtivemos a relação de dispersão de onda de spin, a energia do estado fundamental, o *gap* e sua dependência com a temperatura e o comportamento assintótico da função de correlação spin-spin. A energia do estado fundamental e o *gap* de energia singleto-triplete são obtidos para vários valores de j , definido como a razão das constantes de interações antiferromagnéticas entre segundos e primeiros vizinhos. Comparamos, também, duas formas diferentes de implementar a teoria de onda de spin modificada (MSW), atualmente encontradas na literatura, e mostramos que, apesar das grandes diferenças entre as equações a serem resolvidas em cada procedimento, os resultados obtidos por ambas são equivalentes, exceto pelo valor do j_{max} , que é o valor máximo de j acessível em cada tratamento. Nossos resultados mostram que as energias do estado fundamental e do *gap* aumentam com j , para $j \leq j_{max}$, de acordo com os resultados numéricos disponíveis na literatura.

O cálculo da função de correlação dinâmica é realizado usando o formalismo do operador de projeção: o procedimento inclui até processos de dois magnons. Mostramos que, dependendo dos valores do parâmetro de frustração j , do vetor de onda e da temperatura, uma estrutura com dois picos para a função de correlação dinâmica pode se desenvolver.

Conteúdo

AGRADECIMENTOS	i
ABSTRACT	ii
RESUMO	iii
1 Introdução	1
1.1 Introdução	1
1.1.1 Materiais magnéticos reais quase 1D.	4
1.1.2 Funções de correlação	9
1.1.3 Teorema flutuação-dissipação	10
2 Propriedades estáticas da cadeia antiferromagnética de spin 1 com interações entre primeiros e segundos vizinhos	16
2.1 Introdução	16
2.2 Teoria de onda de spin convencional e modificada.	18
2.3 O esquema SWDM	21
2.4 O esquema FD	25
2.5 Resultados	28
2.5.1 O modelo de Heisenberg 1D não frustrado	28
2.5.2 O modelo de Heisenberg 1D frustrado	32
2.6 Conclusões	41
3 Dinâmica de spin da cadeia de Heisenberg antiferromagnética de spin 1 com interações entre primeiros e segundos vizinhos	43
3.1 Introdução	43

3.2	O método do operador de projeção	45
3.2.1	Discussão dos resultados numéricos	55
3.2.2	Conclusões	62
4	Conclusões finais	65

Lista de Figuras

1.1	Visão esquemática da estrutura típica do magneto quase 1D $CsNiCl_3$.	6
1.2	Visão esquemática da estrutura em forma de cadeia do composto $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2(ClO_4)$ (<i>NENP</i>).	7
1.3	A estrutura cristalina do composto Y_2BaNiO_5 .	8
2.1	Gap normalizado, $\Delta(T)/\Delta_0$, em função da temperatura normalizada, T/Δ_0 , para $j = 0$. Os resultados da teoria MSW (linhas contínuas e pontilhadas) são comparados com os dados de Monte Carlo [54], e os dados experimentais obtidos para os compostos Y_2BaNiO_5 [9] e NINAZ [8].	30
2.2	Esquema SWDM. Relação de dispersão em função de k/a .	33
2.3	Esquema FD. Relação de dispersão em função de k/a .	34
2.4	Energia do estado fundamental, E_{GS} , em função de j . Os resultados dos esquemas FD (triângulos) e SWDM (círculos) são comparados com os dados numéricos disponíveis na literatura [20] (quadrados).	34
2.5	Gap na temperatura zero, Δ_0 , em função de j obtido das duas aproximações: FD (losângulos cheios) e SWDM (círculos abertos).	35
2.6	Gap na temperatura zero, $\Delta(T = 0)$, normalizado pelo <i>gap</i> na temperatura zero para $j = 0$, Δ_0 , em função de j . Os resultados da MSWT (triângulos abertos \rightarrow FD e círculos cheios \rightarrow SWDM) são comparados com os resultados numéricos obtidos por Tonegawa et al [20] (quadrados cheios).	36
2.7	Gap na temperatura T , $\Delta(T)$, normalizado pelo valor do <i>gap</i> na temperatura zero para cada valor de j , $\Delta(0)$, em função da temperatura normalizada, $T/\Delta(0)$, para $j = 0.00, 0.05, 0.10$, e 0.20 .	37

2.8	Função correlação $ \langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_r \rangle $ em função da distância r , para vários valores de j	39
2.9	O ponto r_f , para o qual nossos resultados começam a concordar com a expansão assintótica, em função do parâmetro de frustração j	40
3.1	Ω_- e Ω_+ em função de k/π para $j = 0.10$, $q = \pi/10$ e $T = 0.20J_1S^2$. A linha horizontal corresponde à energia de onda de spin ω_q	56
3.2	Σ''_q (linha contínua) e Σ'_q (linha pontilhada) em função de ω para $j = 0.10$, $q = \pi/10$ e $T = 0.20J_1S^2$	58
3.3	$R(q, \omega)$ em função de ω para $j = 0.10$, $q = \pi/10$ e $T = 0.04J_1S^2$ (linha contínua) e $T = 0.20J_1S^2$ (linha pontilhada).	59
3.4	$R(q, \omega)$ em função de ω para $j = 0.10$, $q = \pi/4$, para três valores de T	60
3.5	$R(q, \omega)$ em função de ω para $q = \pi/10$, $T = 0.04J_1S^2$ para vários valores de j	61
3.6	$R(q, \omega)$ em função de ω para $q = \pi/10$, $T = 0.20J_1S^2$ para vários valores de j	62
3.7	$R(q, \omega)$ em função de ω para $q = \pi/4$, $T = 0.04J_1S^2$ para vários valores de j	63
3.8	$R(q, \omega)$ em função de ω para $q = \pi/4$, $T = 0.20J_1S^2$ para vários valores de j	64

Lista de Tabelas

2.1	Energia do estado fundamental, E_{GS} , e o <i>gap</i> na temperatura zero para $j = 0$, Δ_0	29
-----	--	----

Capítulo 1

Introdução

1.1 Introdução

O estudo da Física de materiais magnéticos de baixa dimensão é bastante antigo, mas grande parte do conhecimento acumulado, especialmente nas décadas anteriores à de 80, se concentra nos tratamentos clássicos. Nos últimos anos, a Física de sistemas magnéticos de dimensões baixas (1 ou 2 dimensões) voltou a ser alvo de uma fervilhante investigação teórica e experimental devido à diversidade dos questionamentos teóricos que têm sido levantados nessa área e, também, ao aprimoramento das técnicas que permitem a construção de materiais com caráter quase uni- ou bidimensional. Fenômenos relacionados à frustração que podem levar à dimerização magnética, competição entre interações, interação entre os spins e a rede (transição spin-Peierls), flutuações quânticas e outros são assuntos de grande interesse na área. Estes fenômenos surgem, principalmente, na investigação de modelos antiferromagnéticos: do ponto de vista teórico, os modelos ferromagnéticos são, aparentemente, menos ricos em comportamentos excêntricos. Até mesmo quando os teóricos da área se concentravam, prioritariamente, no tratamento de modelos clássicos, foi nos modelos antiferromagnéticos que os mais surpreendentes fatos surgiram - a começar pelo estado fundamental de um antiferromagneto unidimensional de Heisenberg.

Recentemente, entre os sistemas que vêm merecendo atenção pelo seu rico comportamento estão aqueles que, devido à simetria da rede ou à competição de interações entre os spins do sistema, apresentam algum grau de frustração. Sistemas com frustração, na maioria das vezes, não podem ser tratados por técnicas conven-

cionais [1]. No que diz respeito a sistemas antiferromagnéticos, nosso interesse neste trabalho, a frustração tende a reduzir as correlações antiferromagnéticas e, assim, a tendência rumo à ordem de Néel, ou seja, os spins primeiros vizinhos alinham, predominantemente, antiparalelos. Desse modo, o estado fundamental de sistemas clássicos antiferromagnéticos é do tipo Néel apenas quando a frustração é pequena: se ela é aumentada, o estado fundamental passa a exibir um estado helicoidal ordenado. Em sistemas quânticos, o cenário de frustração e de flutuações quânticas pode levar a um estado de líquido de spin ou qualquer tipo de quebra espontânea de simetria.

Um dos sistemas quânticos frustrados mais simples que, ainda assim, merece grande atenção é a cadeia de spin de Heisenberg isotrópica quântica com interações antiferromagnéticas entre primeiros nn (de *nearest-neighbor*) e segundos vizinhos nnn (de *next-nearest-neighbor*). Na ausência de frustração, sabe-se que a cadeia de Heisenberg antiferromagnética tem propriedades bem diferentes para spins inteiros ou semi-inteiros: a conhecida conjectura de Haldane [2, 3]. Assim, segundo Haldane, para valores de spins inteiros, o sistema exibe um *gap* no espectro de excitação, ou seja, o primeiro estado excitado de energia mais baixa é separado do estado fundamental por uma diferença de energia. O valor do *gap* de Haldane diminui com o valor de S . Por outro lado, o espectro de excitação para valores de spins semi-inteiros não exibe nenhum *gap*. A conjectura de Haldane já foi experimentalmente comprovada em compostos como por exemplo, $CsNiCl_3$ [4, 5], $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2(ClO_4)$ (*NENP*) [6, 7], $Ni(C_3H_{10}N_2)_2N_3(ClO_4)$ (*NINAZ*) [8] e Y_2BaNiO_5 [9]. Dessa forma, podemos esperar que a cadeia de spins de Heisenberg, com interações até segundos vizinhos, tenha, também, um comportamento significativamente diferente para spins inteiros ou semi-inteiros.

Cadeias de spin semi-inteiro frustradas foram muito estudadas e, agora, são bem entendidas [10]. Cadeias de spin inteiro frustradas, devido às interações entre segundos vizinhos, têm também atraído interesse considerável. Uma breve revisão do comportamento de cadeias antiferromagnéticas frustradas com spin $S = 1/2$ e $S = 1$, é apresentada no Capítulo 2.

Existem muitos trabalhos teóricos relacionados ao estudo do *gap* em cadeias de Heisenberg antiferromagnéticas isotrópicas de spin $S=1$ com interações entre primeiros vizinhos (*gap* de Haldane). Entre as técnicas numéricas utilizadas nesse

estudo, podemos citar, como exemplo, os métodos de Monte Carlo quântico [11, 12] e de diagonalização exata de cadeias finitas [13, 14]. Considerando métodos analíticos citamos, como exemplo, técnicas do grupo de renormalização no modelo σ não linear [2, 3, 15, 16], teoria de onda de spin modificada [17, 18] e técnica da função memória [19]. No entanto, o número de trabalhos voltados à investigação de cadeias de Heisenberg antiferromagnéticas de spin $S=1$ frustradas não é tão grande.

As propriedades do estado fundamental da cadeia de Heisenberg antiferromagnética de spin 1 frustrada foram investigadas primeiramente por Tonegawa *et al.* [20] usando o método de diagonalização exata. Eles encontraram, em particular, que quando o parâmetro de frustração j (definido como a razão das constantes de interações antiferromagnéticas entre segundos e primeiros vizinhos) aumenta, a energia do estado fundamental e o *gap* aumentam. Métodos analíticos [21, 22] prevêm, também, um *gap* para qualquer valor da frustração. Em trabalhos recentes, Pati *et al.* [23] e Kolezhuk *et al.* [24] mostraram, usando o método do grupo de renormalização da matriz densidade, que, embora o *gap* exista para qualquer valor de j , ele não é uma função monotonicamente crescente com este parâmetro.

No Capítulo 2, estudamos as propriedades estáticas da cadeia de Heisenberg antiferromagnética de spin 1 frustrada usando, para isto, a teoria de onda de spin modificada MSW (de *Modified Spin-Wave*). Obtemos a energia do estado fundamental, a dependência do *gap* com a temperatura e com o parâmetro de frustração j , a relação de dispersão da onda de spin e o comportamento da função de correlação spin-spin. Comparamos, também, duas formas diferentes de implementação da teoria MSW freqüentemente encontradas na literatura, e mostramos que, apesar das diferenças entre as equações a serem resolvidas dentro de cada procedimento, os resultados dados por ambos são equivalentes, exceto pelo valor previsto de j_{max} , o valor máximo de j acessível em cada tratamento. Nossos resultados mostram que o estado fundamental e as energias do *gap* aumentam com j , para $j \leq j_{max}$, em acordo com os resultados numéricos anteriores.

Apesar do enorme progresso alcançado no entendimento das propriedades estáticas do modelo de Heisenberg unidimensional (1D) antiferromagnético de spin 1 frustrado, faltam, ainda, trabalhos dedicados ao comportamento dinâmico desse modelo. Por esta razão, no Capítulo 3, apresentamos o cálculo para a função de correlação dinâmica deste modelo. A função de correlação dinâmica foi calculada ao

combinarmos o método do operador de projeção com a teoria MSW. A frequência dos modos de onda de spin locais e as correlações estáticas que são necessárias como entrada para o método foram obtidas através do tratamento de onda de spin modificada, em vez de usarmos a teoria de onda de spin padrão. Mostramos que, dependendo dos valores do parâmetro de frustração e da temperatura, uma estrutura de dois picos na função de correlação dinâmica pode se desenvolver.

1.1.1 Materiais magnéticos reais quase 1D.

Sistemas de spins quânticos de baixa dimensão são sistemas de muitos corpos interagentes para os quais vários resultados rigorosos são conhecidos. Existe um grande número de compostos que podem ser descritos como sistemas de spins de baixa dimensão. Assim muitos dos resultados rigorosos são de relevância experimental.

Em Física da Matéria Condensada, estudamos vários tipos de sistemas de muitos corpos. Em um sistema de muitos corpos, um número grande de entidades interage uma com a outra e, normalmente, efeitos quânticos são importantes. As entidades podem ser férmions (elétrons em um metal, átomos de He^3), bosons (átomos de He^4) ou spins localizados sobre alguma rede. Discutiremos sistemas de spins interagentes em baixas dimensões com os spins localizados nos sítios de uma rede de D -dimensões. Um dos modelos de spins localizados interagentes é o modelo de Heisenberg descrito pela hamiltoniana

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.1)$$

onde \mathbf{S}_i é o operador de spin localizado no sítio i e J_{ij} denota a energia da interação de troca. O spin $|\mathbf{S}_i|$ pode ter um módulo igual a $1/2, 1, 3/2, 2, \dots$ etc. A rede, nos sítios da qual os spins estão localizados pode, por exemplo, ser uma cadeia linear ($D = 1$), uma rede quadrada ($D = 2$) ou uma rede cúbica ($D = 3$).

Em grande parte dos trabalhos teóricos, considera-se apenas os sítios i e j que são os vizinhos mais próximos na rede e os J_{ij} 's têm o mesmo módulo J para todas as interações entre primeiros vizinhos (nn). Então, a hamiltoniana de Heisenberg (1.1) torna-se

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (1.2)$$

A interação de troca dá origem a uma ordem magnética abaixo de uma temperatura crítica. Porém, para alguns sistemas de spins, a ordem magnética não existe, mesmo em $T = 0$. Os sistemas, de acordo com seu ordenamento são classificados em três grandes grupos: ferromagnetos (FM), antiferromagnetos (AFM) e ferrimagnetos (Fi). Para a ordem FM, os spins nn têm uma tendência rumo ao alinhamento paralelo; para a ordem AFM, os spins nn tendem a ficar antiparalelos. No entanto, nesses dois casos, os momentos magnéticos nos sítios nn têm módulos iguais. No caso da ordem Fi, existem várias possibilidades, entre elas, podemos ter a situação em que os spins nn têm o alinhamento antiparalelo, mas os momentos magnéticos associados a eles têm módulos diferentes. Em todos os três casos, a ordem magnética sobrevive até uma temperatura crítica T_c , acima da qual a ordem desaparece.

O sinal da energia da interação de troca determina o alinhamento favorável dos spins nn . $J > 0$ ($J < 0$) corresponde à interação de troca antiferromagnética (ferromagnética).

O antiferromagneto ($J > 0$) de Heisenberg 1D que, quando inclui apenas interações nn , é representado por

$$H = J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}, \quad (1.3)$$

onde $|\mathbf{S}_i| = |\mathbf{S}_{i+1}| = S$. Como mencionamos, na introdução, esta é a hamiltoniana isotrópica estudada por Haldane.

Os diferentes materiais investigados experimentalmente, considerados bons candidatos para a comprovação da conjectura de Haldane, para o caso de S inteiro, não são descritos precisamente pela equação (1.3). De fato, o modelo que melhor descreve um antiferromagneto “real” quase 1D [25], apresenta outras interações e acaba se desviando do modelo ideal (1.3). Entre as interações que existem nos materiais reais temos a anisotropia magnética axial ($D(S_i^z)^2$), que reduz o *gap* [26] e a interação de troca entre cadeias J' que tende a induzir uma ordem de longo alcance para uma temperatura finita [27, 28].

Entre os vários compostos magnéticos usados para comprovar o *gap* de Haldane, podemos citar, como exemplos, o $CsNiCl_3$ [4, 5], o $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2(ClO_4)$ (NENP) [6, 7], o $Ni(C_3H_{10}N_2)_2N_3(ClO_4)$ (NINAZ) [8] e o Y_2BaNiO_5 [9].

Estes materiais apresentam propriedades estruturais e magnéticas diferentes. Para o $CsNiCl_3$ temos as razões $D/|J| = -0.038$ e $J'/J = 0.017$ [4]. O NENP

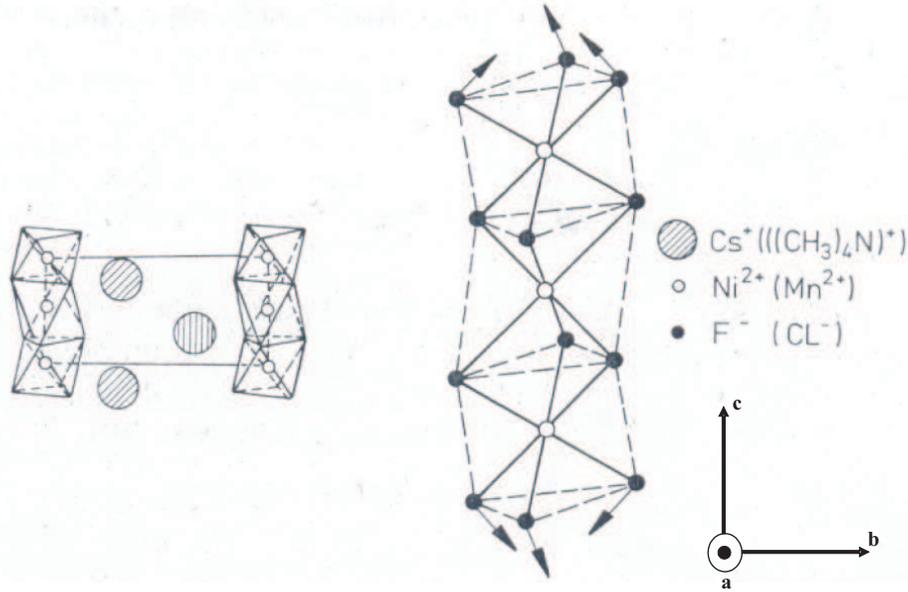


Figura 1.1: Visão esquemática da estrutura típica do magneto quase 1D $CsNiCl_3$.

possui uma anisotropia mais acentuada, $D/|J| \approx 0.17$ [6]; esse é, também, o valor encontrado para a anisotropia no NINAZ [8]. No NENP, a razão entre J' e J é pequena ($|J'/J| \simeq 10^{-4}$) [6]. O NINAZ também apresenta esta razão pequena $|J'/J| \leq 7 \times 10^{-4}$ [8]. O composto Y_2BaNiO_5 [9] apresenta a razão $|J'/J| \leq 10^{-4}$ e tem uma anisotropia axial de $D/|J| = -0.03$.

O $CsNiCl_3$, apesar de apresentar uma anisotropia axial pequena, não é um bom magneto 1D, porque a interação entre as cadeias, J'/J , é da ordem de 0.017, um valor grande em comparação com os outros compostos. Os outros três compostos têm um caráter unidimensional mais acentuado uma vez que razão entre J' e J é da ordem de 10^{-4} . No entanto, o composto Y_2BaNiO_5 pode ser classificado, dentre os três, como o melhor antiferromagneto 1D de Heisenberg de spin $S = 1$ isotrópico, isto é, sistema de Haldane, pois a razão entre D e J é menor neste composto. Temos assim que a hamiltoniana que descreve o Y_2BaNiO_5 é mais próxima de (1.3).

A Figura 1.1 representa o composto $CsNiCl_3$: sua estrutura hexagonal reflete o caráter 1D através das cadeias de $NiCl_3$ fortemente acopladas ao longo do eixo c . Esta propriedade estrutural leva a uma forte interação de troca entre os íons de Ni^{2+} , com spin $S = 1$, ao longo das cadeias. Como as cadeias estão amplamente

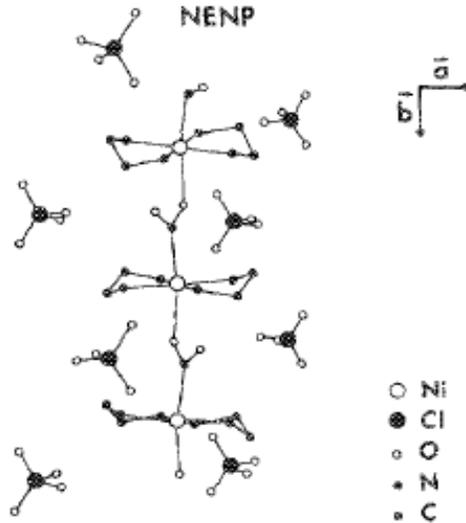


Figura 1.2: Visão esquemática da estrutura em forma de cadeia do composto $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2(ClO_4)$ (NENP).

separadas ao longo dos eixos a e b pelos íons de Cs^+ , a interação magnética entre cadeias é mais fraca do que a interação dentro da cadeia.

A Figura 1.2 representa a estrutura cristalina do NENP. Os íons de Ni^{2+} com $S = 1$ estão ligados ao longo do eixo b por grupos de nitrato e formam uma cadeia linear. As cadeias lineares são separadas uma da outra por ânions de perclorato (ClO_4).

A estrutura cristalina do composto Y_2BaNiO_5 é apresentada na Figura 1.3. Os íons de Ni^{2+} , com $S = 1$, formam uma rede cúbica de corpo centrada (bcc) e estão localizados no centro do octaedro O_6 . As cadeias magnéticas organizam-se ao longo do eixo a . Como as cadeias estão separadas pelos outros átomos constituintes, Y e Ba , as interações entre cadeias são significativamente mais fracas do que as interações dentro das cadeias.

Voltando à hamiltoniana, (1.3), vemos que podemos ter a seguinte situação $|\mathbf{S}_i| \neq |\mathbf{S}_{i+1}|$. Este sistema corresponde a uma cadeia de spins misturados, também denominado de sistema ferrimagnético. Um exemplo de modelo para esse sistema, considera dois tipos de spins S e s que se alternam sobre uma cadeia com interação

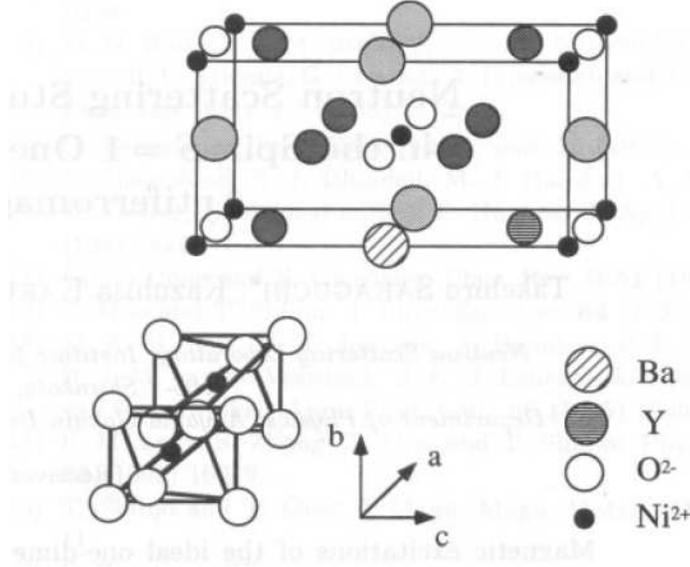


Figura 1.3: A estrutura cristalina do composto Y_2BaNiO_5 .

de troca antiferromagnética entre primeiros vizinhos, como descrito por

$$H = J \sum_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i + \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}). \quad (1.4)$$

O caso mais simples é representado por $S = 1$ e $s = \frac{1}{2}$ [29, 30, 31]. O modelo descrito por (1.4) exibe uma estrutura magnética dupla, ou seja, exibe duas excitações distintas do estado fundamental [29]: uma é sem *gap* e a outra com *gap*. Estudos numéricos [30, 31] das propriedades termodinâmicas da cadeia de spin (1.4), mostram que, para temperaturas baixas, o modelo se comporta como um ferromagneto, enquanto que para temperaturas médias ele comporta-se como um antiferromagneto que tem um *gap*.

Vários esforços têm sido dedicados à síntese de ferrimagnetos de baixa dimensão. Como exemplos de ferrimagnetos 1D reais, podemos citar: o $MnCu(S_2C_2O_2)_2(H_2O)_3 \cdot 4.5H_2O$ [32, 33], o $ACu(pba)(H_2O)_3 \cdot nH_2O$, o $ACu(pbaOH)(H_2O)_3 \cdot nH_2O$ [34, 35, 36] (onde A é Fe ($n = 3$), Co , Ni ou Zn ($n = 2$); $pba = 1,3$ -propylenebis(oxamato), e $pbaOH = 2$ -hydroxy-1,3-propylenebis(oxamato)) e o $NiCu(pba)(H_2O)_3 \cdot 2H_2O$ [37].

No contexto da transição spin-Peierls, outro modelo também obtido da equação

(1.1), que pode ser estudado, é o modelo de Heisenberg 1D descrito por

$$H = J_1 \sum_i [1 - (-1)^i \delta] \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + J_2 \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}. \quad (1.5)$$

A interação spin-rede que leva à dimerização da rede entra neste modelo através do parâmetro δ . J_1 e J_2 descrevem, respectivamente, as interações de troca entre primeiros e segundos vizinhos, com sua razão, $j = J_2/J_1$, definindo a intensidade de frustração. Acima da temperatura de transição spin-Peierls, δ se anula e a frustração devida à interação de troca entre segundos vizinhos torna-se o fator dominante. A importância de introduzirmos frustração em modelos usados para estudar fenômenos como a transição spin-Peierls foi sugerido por algumas investigações experimentais, como a realizada por Hase *et al.* [38] no composto $CuGeO_3$.

Neste trabalho, estamos interessados no antiferromagneto de Heisenberg 1D frustrado, ou seja, $J_1 > 0$ e $J_2 > 0$, com spin 1. Então, usando $\delta = 0$ em (1.5), obtemos

$$H = J_1 \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + J_2 \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}, \quad (1.6)$$

Um exemplo de antiferromagneto 1D real de spin $S = \frac{1}{2}$ com frustração é o composto $CuGeO_3$ [38, 39]. No entanto, para spin inteiro, não encontramos na literatura comprovação experimental, ou seja, compostos que possam representar um antiferromagneto 1D de spin S inteiro frustrado.

1.1.2 Funções de correlação

Na seção anterior, apresentamos alguns compostos que representam sistemas reais de magnetos quase 1D com interações de troca antiferromagnéticas entre os spins.

A forma mais direta para descrever a dinâmica de sistemas sem ordem de longo alcance LRO (de *Long-Range Order*), $\langle M \rangle = \lim_{m \rightarrow \infty} \langle \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+m} \rangle = 0$, é através da função de correlação de dois spins, dada por

$$G^{\alpha,\gamma}(r, t) = \langle S_n^\alpha(0) S_{n+m}^\gamma(t) \rangle, \quad (1.7)$$

onde α e γ são as componentes do operador de spin S . $G(r, t)$ contém a dependência de r com n e m no espaço e no tempo das correlações de spin, que é o que será discutido no Capítulo 3. A função de correlação no espaço revela a distribuição espacial

das correlações, caracterizadas no regime de curto alcance, por um comprimento de correlação, ξ , que é uma função da temperatura.

Para compararmos com o experimento é freqüentemente útil usarmos a transformada de Fourier de $G^{\alpha,\gamma}(r, t)$:

$$S^{\gamma,\alpha}(k, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle S_k^\gamma(t) S_{-k}^\alpha(0) \rangle, \quad (1.8)$$

com

$$S_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n S_n \exp(ikn),$$

e

$$\langle S_k^\gamma(t) S_{-k}^\alpha(0) \rangle = \sum_m \langle S_{n+m}^\gamma(t) S_n^\alpha(0) \rangle \exp(ikm).$$

A função de correlação (1.7) está relacionada a grandezas medidas experimentalmente através do teorema flutuação-dissipação. No Capítulo 3, calcularemos esta função usando o método do operador de projeção combinado com a teoria de onda de spin modificada.

1.1.3 Teorema flutuação-dissipação

Nesta subseção, através da definição de suscetibilidade generalizada, derivamos um resultado importante, o teorema flutuação-dissipação, que relaciona flutuações de equilíbrio com dissipação no regime linear.

Consideramos, um sistema de partículas sujeito a uma perturbação externa, que pode ser dependente do tempo. Para um sistema magnético, esta perturbação pode ser um campo magnético externo. A hamiltoniana total fica:

$$H_{tot} = H + H_{ext} \quad (1.9)$$

Assumimos que a perturbação externa acopla linearmente com a densidade:

$$H_{ext} = \int d^3x n(\mathbf{x}) \phi_{ext}(\mathbf{x}, t), \quad (1.10)$$

onde ϕ_{ext} é uma função escalar da posição e do tempo.

O sistema responde à perturbação (1.10), através de uma mudança induzida na densidade de partícula

$$\langle \delta n(\mathbf{x}, t) \rangle = \langle n(\mathbf{x}, t) \rangle_{H_{tot}} - \langle n(\mathbf{x}, t) \rangle_H. \quad (1.11)$$

O valor esperado em (1.11) é a densidade para \mathbf{x} , no tempo t , quando o sistema evoluiu de um estado de equilíbrio de H (em $t = -\infty$) com a perturbação externa ligada para todos os tempos finitos. Esse valor esperado exige um traço sobre uma matriz de densidade no equilíbrio (para $t = -\infty$) e uma modificação dos estados do sistema devido a H_{ext} . Assumimos que H_{ext} é pequeno o suficiente, que podemos tratá-lo em primeira ordem na teoria de perturbação

Supomos que temos determinado os autoestados de H , no quadro de Heisenberg e denotamos eles por $|\psi_H\rangle$. Com a perturbação ligada em $t = -\infty$, a equação de Schrödinger dependente do tempo para um estado arbitrário $|\psi\rangle$ é

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H_{tot} |\psi(t)\rangle \equiv H_{tot} \exp\left\{-\frac{iHt}{\hbar}\right\} |\psi_H(t)\rangle. \quad (1.12)$$

A dependência temporal de $|\psi_H(t)\rangle$ é devido a perturbação externa, e o estado $|\psi_H(t)\rangle$, portanto, obedece a equação diferencial

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_H(t)\rangle = H_{ext} |\psi_H(t)\rangle, \quad (1.13)$$

onde

$$H_{ext} = e^{iKt/\hbar} H_{ext} e^{-iKt/\hbar}, \quad (1.14)$$

e K é a hamiltoniana grande canônica, dada por,

$$K = H - \mu N, \quad (1.15)$$

sendo μ o potencial químico e N o número de partículas. A igualdade em (1.14) é satisfeita se a perturbação externa conserva o número de partículas (isto é, N comuta com H_{ext}). Resolvendo (1.13) para ordem mais baixa em H_{ext} , achamos

$$|\psi_H(t)\rangle = |\psi_H\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' H_{ext}(t') |\psi_H\rangle. \quad (1.16)$$

Assim

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | n(\mathbf{x}) | \psi(t) \rangle &= \langle \psi_H | n(\mathbf{x}, t) | \psi_H \rangle \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \int d^3x' \phi_{ext}(\mathbf{x}', t') \langle \psi_H | [n(\mathbf{x}, t), n(\mathbf{x}', t')] | \psi_H \rangle, \end{aligned} \quad (1.17)$$

onde usamos o fato de que operadores, tais como, $n(\mathbf{x}, t)$, com uma dependência explícita no tempo, são operadores de Heisenberg:

$$n(\mathbf{x}, t) = e^{iKt/\hbar} n(\mathbf{x}) e^{-iKt/\hbar},$$

enquanto $n(\mathbf{x})$ está no quadro de Schrödinger e $[A, B] = AB - BA$.

Como mencionado antes, o sistema estava no equilíbrio para $t = -\infty$. Portanto, calculamos a média da equação (1.17) em função da densidade de probabilidade grande canônica para obtermos finalmente,

$$\langle \delta n(\mathbf{x}, t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \int d^3x' \phi_{ext}(\mathbf{x}', t') \langle [n(\mathbf{x}', t'), n(\mathbf{x}, t)] \rangle_H. \quad (1.18)$$

É conveniente expressar a resposta do sistema em termos da função de correlação densidade, D^R , definida através de

$$D^R(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \equiv \frac{-i}{\hbar} \theta(t - t') \langle [n(\mathbf{x}, t), n(\mathbf{x}', t')] \rangle_H, \quad (1.19)$$

onde $\theta(t)$ é a função degrau de Heaviside. Esta função de correlação (também chamada um propagador ou função de Green) é independente da perturbação do potencial, e assim, pode ser usada para descrever a resposta do sistema à qualquer perturbação externa que acople linearmente com a densidade. Substituindo em (1.18), obtemos

$$\langle \delta n(\mathbf{x}, t) \rangle = \int d^3x' \int_{-\infty}^{\infty} dt' D^R(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \phi_{ext}(\mathbf{x}', t'). \quad (1.20)$$

Se o sistema não perturbado é homogêneo no espaço e no tempo, $D^R(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')$ é apenas uma função de $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$ e $t - t'$, e a integral em (1.20) é simplesmente uma convolução de quatro-dimensão. Assim, se definirmos as transformações de Fourier de acordo com,

$$\langle \delta n(\mathbf{x}, t) \rangle = \frac{1}{2\pi V} \sum_{\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \delta\rho(\mathbf{q}, \omega) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} e^{-i\omega t}, \quad (1.21)$$

$$D^R(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \frac{1}{2\pi V} \sum_{\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \chi^R(\mathbf{q}, \omega) e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} e^{-i\omega(t-t')}, \quad (1.22)$$

e

$$\phi_{ext}(\mathbf{x}', t') = \frac{1}{2\pi V} \sum_{\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \phi_{ext}(\mathbf{q}, \omega) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} e^{-i\omega t'}, \quad (1.23)$$

temos

$$\delta\rho(\mathbf{q}, \omega) = \chi^R(\mathbf{q}, \omega)\phi_{ext}(\mathbf{q}, \omega). \quad (1.24)$$

A função $\chi^R(\mathbf{q}, \omega)$ é denominada suscetibilidade generalizada.

Agora vamos expressar a transformada de Fourier dessas quantidades na segunda forma quantizada. O operador de densidade $n(\mathbf{x})$ pode ser escrito da seguinte forma

$$n(\mathbf{x}) = \psi^\dagger(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \rho(\mathbf{q})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}, \quad (1.25)$$

sendo $\rho(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger C_{\mathbf{k}}$ e onde $C_{\mathbf{k}}^\dagger$, $C_{\mathbf{k}}$ são os operadores de criação e destruição de bosons. O operador de densidade dependente do tempo, pode ser escrito na forma,

$$\begin{aligned} n(\mathbf{x}, t) &= e^{iKt/\hbar} n(\mathbf{x}) e^{-iKt/\hbar} \\ &= \frac{1}{2\pi V} \sum_{\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \rho(\mathbf{q}, \omega) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} e^{-i\omega t}, \end{aligned} \quad (1.26)$$

e $\rho(\mathbf{q}, \omega) = \int d^3\mathbf{x} \int_{-\infty}^{\infty} dt n(\mathbf{x}, t) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} e^{i\omega t}$.

Agora definimos o fator de estrutura dinâmico, $S(\mathbf{q}, \omega)$:

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \rho(\mathbf{q}, t) \rho(-\mathbf{q}, 0) \rangle. \quad (1.27)$$

A suscetibilidade generalizada $\chi^R(\mathbf{q}, \omega)$, pode ser expressada em termos dessa função como demonstraremos a seguir. Primeiro notamos que o valor esperado

$$\langle n(\mathbf{x}, t) n(\mathbf{x}', t') \rangle = \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \langle \rho(\mathbf{k}_1, t) \rho(\mathbf{k}_2, t') \rangle e^{i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{x}} e^{i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{x}'}, \quad (1.28)$$

é uma função apenas de $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$. Fazendo $\mathbf{x} = \mathbf{x}' + \mathbf{y}$ e integrando sobre \mathbf{x}' , obtemos,

$$\int d^3\mathbf{x}' \langle n(\mathbf{x}' + \mathbf{y}, t), n(\mathbf{x}', t') \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{y}} \langle \rho(\mathbf{k}, t - t') \rho(-\mathbf{k}, 0) \rangle, \quad (1.29)$$

portanto,

$$\chi^R(\mathbf{q}, \omega) = \frac{-i}{\hbar V} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \theta(\tau) \langle \rho(-\mathbf{q}, \tau) \rho(\mathbf{q}, 0) - \rho(\mathbf{q}, 0) \rho(-\mathbf{q}, \tau) \rangle. \quad (1.30)$$

uma vez que, $\frac{1}{V} \int d^3y e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{y}} = \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{q}}$.

Usando a representação para a função de Heaviside,

$$\theta(\tau) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{e^{\omega'\tau}}{\omega' - i\eta},$$

onde η é um valor infinitesimal e positivo, achamos

$$\chi^R(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi\hbar V} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{i(\omega'+\omega)\tau} \frac{\langle \rho(-\mathbf{q}, \tau)\rho(\mathbf{q}, 0) - \rho(\mathbf{q}, 0)\rho(-\mathbf{q}, \tau) \rangle}{\omega' - i\eta}. \quad (1.31)$$

Substituindo $\omega' = -\omega + \omega''$, e observando da definição dos valores esperados, que para qualquer par de operadores A, B ,

$$\langle A(0)B(t) \rangle = \langle A(-t)B(0) \rangle,$$

e, além disso, que

$$\rho(-\mathbf{k}, \tau)\rho(\mathbf{k}, 0) = \rho(\mathbf{k}, \tau)\rho(-\mathbf{k}, 0),$$

temos

$$\chi^R(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\hbar V} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{S(\mathbf{q}, \omega') - S(\mathbf{q}, -\omega')}{\omega - \omega' + i\eta}. \quad (1.32)$$

$S(\mathbf{q}, \omega)$ é real e semidefinido positivo:

$$S(\mathbf{q}, \omega) \geq 0$$

e também,

$$S(-\mathbf{q}, \omega) = S(\mathbf{q}, \omega) = e^{-\beta_0\hbar\omega} S(\mathbf{q}, -\omega), \quad (1.33)$$

onde $\beta_0 = 1/T$.

A parte imaginária da função resposta χ^R tem uma interpretação física em termos da dissipação de energia. Combinando (1.32) e (1.33) e usando

$$\frac{1}{\omega + i\eta} = P\left(\frac{1}{\omega}\right) - i\pi\delta(\omega), \quad (1.34)$$

onde P indica valor principal, obtemos o teorema flutuação-dissipação:

$$(1 - e^{-\beta_0\hbar\omega})S(\mathbf{q}, \omega) = -2\hbar V \text{Im}\chi^R(\mathbf{q}, \omega) \quad (1.35)$$

Agora consideramos o efeito de um campo externo que acopla com uma variável dinâmica arbitrária, no nosso caso, a componente de spin S_{-k}^α da equação (1.8). Assim,

$$H_{ext} = \phi_{ext} S_{-k}^\alpha. \quad (1.36)$$

A resposta de outro observável S_k^γ para esta perturbação é derivada, em analogia com a equação (1.18), para ser

$$\langle \delta S_k^\gamma(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle [S_{-k}^\alpha(t'), S_k^\gamma(t)] \rangle_H \phi_{ext}(t'), \quad (1.37)$$

e a função de Green apropriada, ou propagador, é dada por

$$D_{\gamma,\alpha}^R(t, t') = \frac{-i}{\hbar} \theta(t - t') \langle [S_k^\gamma(t), S_{-k}^\alpha(t')] \rangle_H, \quad (1.38)$$

o qual é uma generalização de (1.19). Procedendo, como antes, definimos

$$\langle \delta S_k^\gamma(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \langle \delta S_k^\gamma(\omega) \rangle e^{-i\omega t}, \quad (1.39)$$

$$D_{\gamma,\alpha}^R(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \chi_{\gamma,\alpha}^R(\omega) e^{-i\omega(t-t')}, \quad (1.40)$$

$$\phi_{ext}(t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \phi_{ext}(\omega) e^{-i\omega t'}, \quad (1.41)$$

e obtemos

$$\langle \delta S_k^\gamma(\omega) \rangle = \chi_{\gamma,\alpha}^R(\omega) \phi_{ext}(\omega). \quad (1.42)$$

Como antes, podemos expressar a função resposta em termos de uma função correlação de equilíbrio. Da seguinte forma

$$S^{\gamma\alpha}(k, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle S_k^\gamma(t) S_{-k}^\alpha(0) \rangle_H e^{i\omega t}, \quad (1.43)$$

$$S^{\alpha\gamma}(k, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle S_{-k}^\alpha(t) S_k^\gamma(0) \rangle_H e^{i\omega t}, \quad (1.44)$$

e após algumas manipulações semelhantes com as equações de (1.27)-(1.32), obtemos o resultado,

$$\chi_{\gamma\alpha}^R = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{S^{\gamma\alpha}(k, \omega') - S^{\alpha\gamma}(k, -\omega')}{\omega - \omega' + i\eta}, \quad (1.45)$$

usando argumentos semelhantes àqueles que levam para a equação (1.33), facilmente relacionamos $S^{\alpha\gamma}(k, -\omega)$ com $S^{\gamma\alpha}(k, \omega)$. O resultado após alguma álgebra fica,

$$S^{\alpha\gamma}(k, -\omega) = e^{-\beta_0 \hbar \omega} S^{\gamma\alpha}(k, \omega).$$

Para o caso em que $S_k^\gamma = (S_{-k}^\alpha)^\dagger$, vemos que $S^{\alpha\gamma}$ é real e semidefinido positivo e, usando (1.34), achamos que

$$(1 - e^{-\beta_0 \hbar \omega}) S^{\gamma\alpha}(k, \omega) = -2\pi\hbar \text{Im} \chi_{\gamma,\alpha}^R(k, \omega). \quad (1.46)$$

Capítulo 2

Propriedades estáticas da cadeia antiferromagnética de spin 1 com interações entre primeiros e segundos vizinhos

2.1 Introdução

O objeto deste estudo é o modelo de Heisenberg antiferromagnético 1D de spin 1 com interações entre primeiros e segundos vizinhos. Desta forma, começamos reescrevendo a hamiltoniana (1.6) dividindo a rede em duas subredes A e B : os operadores de spin na subrede A são designados por \mathbf{T}_{2l} , enquanto que aqueles localizados na subrede (B) são designados por (\mathbf{S}_{2l+1}). Assim, a hamiltoniana do modelo é representada por

$$H = J_1 \sum_l \left\{ (\mathbf{T}_{2l} \cdot \mathbf{S}_{2l+1} + \mathbf{S}_{2l+1} \cdot \mathbf{T}_{2l+2}) + j(\mathbf{T}_{2l} \cdot \mathbf{T}_{2l+2} + \mathbf{S}_{2l+1} \cdot \mathbf{S}_{2l+3}) \right\}, \quad (2.1)$$

onde a soma percorre todos os l 's sítios de uma sub-rede. O módulo dos spins nas duas subredes é igual, $|\mathbf{T}_{2l}| = |\mathbf{S}_{2l+1}| = S$, e os parâmetros $J_1 > 0$ e $J_2 \geq 0$ correspondem, respectivamente, às interações de troca entre primeiros e segundos vizinhos. A presença da interação entre segundos vizinhos gera o fenômeno chamado *frustração*. A intensidade da frustração é definida pela razão $j = J_2/J_1$.

Dependendo dos valores de j e do valor do spin, inteiro ou semi-inteiro, o modelo de Heisenberg descrito por (2.1) tem características diferentes, como discutido, brevemente, a seguir para os casos em que $S=1/2$ e $S=1$.

No caso de spin $S=1/2$, o cenário é o seguinte: quando $j=0$ (sem frustração), voltamos ao caso analisado por Haldane: o estado fundamental da hamiltoniana (2.1) é o estado de fluido de spin, caracterizado por um espectro de excitação sem *gap* e com a função correlação de spin espacial decaindo segundo uma lei de potência. Porém, para $j>0$, os acoplamentos de primeiros e segundos vizinhos competem um com o outro, ou seja, uma interação frustra a tendência de ordenamento da outra. Existe um valor crítico para o parâmetro da frustração, j_c , que define regiões de comportamentos diferentes para sistemas descritos pela hamiltoniana (2.1). Para $0<j<j_c$, o sistema tem o comportamento típico do caso de Haldane ($j=0$), ou seja, o estado fundamental corresponde ao estado de fluido de spin: o espectro de excitação é sem *gap* e a função de correlação decai como uma lei de potência. Para $j>j_c$, o estado fundamental do sistema é um estado dimerizado, um *gap* se desenvolve no espectro e as correlações de spin decaem exponencialmente. O valor de j_c encontrado na literatura é 0.2412 ± 0.0001 [40]. No caso particular de $j = \frac{1}{2}$, a hamiltoniana (2.1) corresponde ao hamiltoniano Majumdar-Ghosh [41].

Para spin $S=1$, temos as seguintes situações: quando $j=0$ (sem frustração), voltamos ao caso do *gap* de Haldane, ou seja, o primeiro estado excitado do sistema é separado do estado fundamental por um *gap* de energia. Para $j>0$, as propriedades do estado fundamental foram, pela primeira vez, investigadas por Tonegawa *et al.* [20]. No domínio dos valores de j trabalhados por eles ($j < 0.40$), obteve-se que a energia do estado fundamental e o *gap* aumentam com o valor de j . Por outro lado, os resultados numéricos recentes de Pati *et al.* [23] e Kolezhuk *et al.* [24] mostram que o *gap* aumenta com o aumento do parâmetro de frustração enquanto j é menor do que ≈ 0.40 ; para j maior, o *gap* diminui até atingir o valor $j = 0.73$ e depois volta a aumentar.

A razão para estudarmos o *gap* é que a frequência da onda de spin é necessária para o cálculo da dinâmica. Uma teoria de onda de spin padrão não fornece *gap* e, por isso, usamos a teoria de onda de spin modificada.

Na seção 2.2, discutimos a teoria de onda de spin convencional para justificar a necessidade de usarmos a teoria de onda de spin modificada. Existem, na literatura, procedimentos ligeiramente diferentes para implementar a teoria MSW. Em nosso trabalho, discutiremos os procedimentos usados por Takahashi [42] e Yamamoto [43]. Esses dois procedimentos são discutidos nas seções 2.3 e 2.4, respectivamente.

2.2 Teoria de onda de spin convencional e modificada.

Os estados excitados de menor energia de sistemas de spins acoplados por interações de troca são chamados de ondas de spin ou mágnons. Ondas de spin ferromagnéticas são associadas às excitações magnéticas elementares acima de um estado fundamental ferromagnético.

Ondas de spin não são excitações exclusivas de sistemas ferromagnéticos. Existe uma teoria de onda de spin que descreve as excitações de menor energia de antiferromagnetos (mágnons antiferromagnéticos), apesar do estado fundamental do antiferromagneto não ser conhecido; exceto no caso especial de uma cadeia de spin-1/2 com acoplamento entre primeiros vizinhos [44]. A base da teoria de onda de spin que descreve um antiferromagneto é supor que a ordem de longo alcance antiferromagnética existe no seu estado fundamental e que a amplitude do movimento de ponto zero de flutuações quânticas sobre o estado de Néel clássico é pequena.

Neste trabalho, partimos da hamiltoniana (2.1), para a qual o estado de vácuo do sistema corresponde a $T_{2l}^z = S$ ($S_{2l+1}^z = -S$) localizado na subrede A (B). A hamiltoniana envolve as três componentes T_{2l}^x , T_{2l}^y , T_{2l}^z de cada operador de spin \mathbf{T}_{2l} da subrede A e as três componentes S_{2l+1}^x , S_{2l+1}^y , S_{2l+1}^z de cada operador de spin \mathbf{S}_{2l+1} da subrede B . As componentes de spin de cada subrede são dependentes entre si e estão relacionadas pela identidade $\mathbf{T}_{2l} \cdot \mathbf{T}_{2l} = \mathbf{S}_{2l+1} \cdot \mathbf{S}_{2l+1} = S(S+1)$. Usando a transformação de Dyson-Maleev, expressamos as componentes de spin em termos de operadores bosônicos de criação e destruição independentes para cada subrede. Assim,

$$\begin{aligned} T_{2l}^z &= S - a_{2l}^\dagger a_{2l} ; & T_{2l}^- &= a_{2l}^\dagger ; & T_{2l}^\dagger &= (2S - a_{2l}^\dagger a_{2l}) a_{2l}, \\ S_{2l+1}^z &= -S + b_{2l+1}^\dagger b_{2l+1} ; & S_{2l+1}^- &= -b_{2l+1} ; \\ S_{2l+1}^\dagger &= -b_{2l+1}^\dagger (2S - b_{2l+1}^\dagger b_{2l+1}). \end{aligned} \quad (2.2)$$

Os operadores a_{2l} e b_{2l+1} obedecem as relações de comutação para bosons

$$[a_{2l}, a_{2l'}^\dagger] = \delta_{l,l'} \quad \text{e} \quad [b_{2l+1}, b_{2l'+1}^\dagger] = \delta_{l,l'}. \quad (2.3)$$

Todos os outros comutadores são nulos. Em termos desses operadores bosônicos, a

hamiltoniana tem agora a forma

$$H = E_0 + H_0 + H_1, \quad (2.4)$$

onde $E_0 = -2J_1NS^2(1-j)$ e N é o número de spins em cada subrede. H_0 e H_1 representam os termos na hamiltoniana envolvendo, respectivamente, produtos de dois e quatro operadores bosônicos e são dados por

$$\begin{aligned} H_0 = & J_1S \sum_l \left\{ 2b_{2l+1}^\dagger b_{2l+1} + 2a_{2l}^\dagger a_{2l} - (a_{2l} + a_{2l+2})b_{2l+1} \right. \\ & - (a_{2l}^\dagger + a_{2l+2}^\dagger)b_{2l+1} - j \left[(a_{2l+2}^\dagger - a_{2l}^\dagger)(a_{2l+2} - a_{2l}) \right. \\ & \left. \left. + (b_{2l+1}^\dagger - b_{2l+3}^\dagger)(b_{2l+1} - b_{2l+3}) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

e

$$\begin{aligned} H_1 = & \frac{J_1}{2} \sum_l \left\{ a_{2l}^\dagger (b_{2l+1}^\dagger - a_{2l})^2 b_{2l+1} \right. \\ & + a_{2l+2}^\dagger (b_{2l+1}^\dagger - a_{2l+2})^2 b_{2l+1} - j \left[a_{2l}^\dagger a_{2l+2}^\dagger (a_{2l} - a_{2l+2})^2 \right. \\ & \left. \left. + (b_{2l+1}^\dagger - b_{2l+3}^\dagger)^2 b_{2l+1} b_{2l+3} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Como vemos, usando a transformação de Dyson-Maleev, a expressão modificada para a hamiltoniana (2.1) não tem termo mais alto do que a quarta ordem, e, assim, podemos construir uma teoria auto-consistente ao invés de uma expansão $1/S$ convencional.

Na teoria de onda de spin convencional, a parte quadrática (H_0) da hamiltoniana é diagonalizada, usando a transformação de Bogoliubov, no espaço dos momentos (k), e a energia de onda de spin resultante se anula para $k = 0$. Como a contribuição que surge dos termos de quatro operadores (H_1) é também nula para $k = 0$, a teoria de onda de spin usual, não prevê *gap* no espectro de onda de spin. Portanto esta teoria, não cumpre o que é estabelecido pelo teorema de Mermin-Wagner [45]: sistemas magnéticos de baixa dimensão não possuem ordenamento de longo alcance. Desta forma, a teoria usual não é aplicável para o nosso modelo sem modificação.

Na década de 80, Takahashi [46] propôs uma modificação simples na teoria de onda de spin convencional, obtendo uma descrição excelente da termodinâmica

de temperatura baixa para ferromagnetos de baixas dimensões. Introduzindo a restrição de que a magnetização total deva ser igual a zero dentro da teoria usual, ele fez cumprir o teorema de Mermin-Wagner para estes magnetos. A restrição de magnetização total zero implica em manter finito o número de modos de ondas de spin sobre interações ferromagnéticas, mas não funciona sobre interações antiferromagnéticas. Assim, Takahashi [42] e, paralelamente, Hirsh e Tang [47] propuseram que, para antiferromagnetos, a restrição impõe que a magnetização de subrede é nula. Esta restrição, além de cumprir o teorema de Mermin-Wagner, restaura a simetria de subrede do estado fundamental de sistemas antiferromagnéticos. Em seus artigos, Takahashi [42] e Hirsch e Tang [47], estudaram o modelo de Heisenberg antiferromagnético bidimensional (2D) sem-frustração. A teoria MSW foi também estendida para o modelo de Heisenberg antiferromagnético frustrado 2D [48] para fornecer o diagrama de fase desse modelo. O método foi também aplicado, em nosso grupo, para o modelo de Heisenberg antiferromagnético 1D não frustrado [49]. Recentemente, Yamamoto [43] apresentou uma versão ligeiramente diferente da teoria MSW para o mesmo modelo de Heisenberg 1D não frustrado.

Na próxima seção, apresentamos o cálculo das propriedades estáticas do modelo usando a versão da teoria MSW para antiferromagnetos segundo dois esquemas distintos: o de Takahashi [42] e o de Yamamoto [43]. As teorias usadas nos dois esquemas são idênticas, no sentido de que os autores começam escrevendo os operadores de spin em termos de operadores bosônicos obtendo a hamiltoniana (2.4). Após algumas manipulações, a energia livre é minimizada sob a restrição de magnetização zero. Porém, os procedimentos usados na diagonalização da hamiltoniana transformada são diferentes e levam a sistemas de equações bastante diferentes. O procedimento adotado por Takahashi [42] introduz uma matriz densidade de onda de spin ideal após uma transformação de Bogoliubov: daqui por diante, nos referiremos a este procedimento como SWDM (de *Spin-Wave Density Matrix*). Nos dois procedimentos, os autores reduzem os termos envolvendo quatro operadores a produtos de apenas dois operadores usando relações de comutação padrão. Entretanto, Yamamoto [43] diagonaliza a hamiltoniana resultante impondo que o coeficiente do termo cruzado seja zero e denomina este esquema de diagonalização total da onda de spin modificada interagente que, por simplicidade, designaremos por FD (de *Full Diagonalization*).

Considerando que a MSW é uma teoria analítica simples que tem sido aplicada com sucesso para descrever as propriedades de magnetos de baixa dimensão, podemos aplicar esta teoria para estudar algumas propriedades da Hamiltoniana (2.4) e compararmos nossos resultados com alguns resultados numéricos e experimentais disponíveis na literatura. É também interessante comparar os diferentes esquemas usados no contexto da teoria MSW. Nossos cálculos para as propriedades estáticas do antiferromagneto de Heisenberg 1D com spin $S = 1$ frustrado, usando a teoria MSW, se encontra na referência [50].

2.3 O esquema SWDM

Na formulação SWDM para a teoria MSW, introduzimos o seguinte *ansatz* para a matriz de densidade do sistema, considerado como um gás ideal de bosons (ondas de spin),

$$\rho = \exp\left\{\frac{-1}{T} \sum_k \omega_k (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \beta_k^\dagger \beta_k)\right\}, \quad (2.7)$$

onde \sum_k indica um somatório sobre metade da primeira zona de Brillouin, α_k e β_k são operadores que estão relacionados aos operadores de bosons originais a_k e b_k , pela transformação de Bogoliubov

$$\begin{aligned} \alpha_k &= a_k \cosh \theta_k - b_{-k}^\dagger \sinh \theta_k, \\ \beta_k^\dagger &= -a_k \sinh \theta_k + b_{-k}^\dagger \cosh \theta_k, \end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned} a_k &= \alpha_k \cosh \theta_k + \beta_k^\dagger \sinh \theta_k, \\ b_{-k}^\dagger &= \beta_k^\dagger \cosh \theta_k + \alpha_k \sinh \theta_k. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Nas expressões acima ω_k e o ângulo θ_k são parâmetros variacionais a serem determinados. Os operadores a_k e b_{-k}^\dagger são as transformadas de Fourier dos operadores bosônicos a_{2l} e b_{2l+1}^\dagger , definidos por

$$\begin{aligned} a_k &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N e^{ik(2l-\frac{1}{2})} a_{2l}, \\ b_{-k}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N e^{-ik(2l+\frac{1}{2})} b_{2l+1}^\dagger, \end{aligned} \quad (2.9)$$

onde tomamos a constante de rede igual à unidade. Como estamos tratando de um gás ideal de bosons, temos as seguintes médias

$$\begin{aligned}\langle \alpha_k^\dagger \alpha_k \rangle &= \langle \beta_k^\dagger \beta_k \rangle = \tilde{n}_k = [e^{\beta\omega_k} - 1]^{-1}, \\ \langle \alpha_k \alpha_k^\dagger \rangle &= \langle \beta_k \beta_k^\dagger \rangle = 1 + \tilde{n}_k,\end{aligned}\tag{2.10}$$

onde α_k e β_k preservam as mesmas relações de comutação dos operadores originais, (2.3), e \tilde{n}_k é o número de ocupação de bosons.

A energia média do sistema é dada pela média térmica da hamiltoniana (2.4),

$$\mathcal{E} = \langle H \rangle.$$

Calculamos, então, as médias térmicas de $\langle \mathcal{H}_0 \rangle$ e $\langle \mathcal{H}_1 \rangle$ utilizando a definição da matriz densidade (2.7), e, depois, somamos essas médias a $\langle E_0 \rangle$. $\langle \mathcal{H}_0 \rangle$ contém as médias térmicas de dois operadores bosônicos e obtemos os seguintes termos não nulos

$$\langle b_{2l+1}^\dagger b_{2l'+1} \rangle = f(r_{2l+1} - r_{2l'+1}) - \frac{1}{2} \delta_{l,l'},\tag{2.11}$$

$$\langle a_{2l}^\dagger a_{2l'} \rangle = f(r_{2l} - r_{2l'}) - \frac{1}{2} \delta_{l,l'},\tag{2.12}$$

$$\langle a_{2l} b_{2l'+1} \rangle = \langle a_{2l}^\dagger b_{2l'+1}^\dagger \rangle = g(r_{2l} - r_{2l'+1}),\tag{2.13}$$

onde usamos as definições,

$$f(r_{2l} - r_{2l'}) = f(r_{2l+1} - r_{2l'+1}) = \frac{1}{2N} \sum_k e^{ik(2l-2l')} \cosh(2\theta_k) (2\tilde{n}_k + 1),\tag{2.14}$$

$$g(r_{2l} - r_{2l'+1}) = \frac{1}{2N} \sum_k e^{ik(2l-2l'-1)} \sinh(2\theta_k) (2\tilde{n}_k + 1).\tag{2.15}$$

$\langle \mathcal{H}_1 \rangle$ contém as médias de produtos de quatro operadores bosônicos e o desacoplamento desses termos é feito de acordo com o seguinte exemplo

$$\langle a_{2l}^\dagger b_{2l+1}^\dagger b_{2l+1}^\dagger b_{2l+1} \rangle \cong 2 \langle a_{2l}^\dagger b_{2l+1}^\dagger \rangle \langle b_{2l+1}^\dagger b_{2l+1} \rangle + \langle a_{2l}^\dagger b_{2l+1} \rangle \langle b_{2l+1}^\dagger b_{2l+1}^\dagger \rangle.\tag{2.16}$$

A energia \mathcal{E} é, então, dada por

$$\mathcal{E} = -2NJ_1 \left\{ \left[S - \left(f(0) - \frac{1}{2} - g(\delta) \right) \right]^2 - j \left[S - \left(f(0) - \frac{1}{2} - f(2\delta) \right) \right]^2 \right\}, \quad (2.17)$$

onde δ é o vetor que liga cada sítio a um de seus 2 vizinhos mais próximos. Considerando o sistema como um gás ideal de bosons, temos a entropia dada por

$$\mathcal{S} = 2 \sum_k \{ (\tilde{n}_k + 1) \ln(\tilde{n}_k + 1) - \tilde{n}_k \ln \tilde{n}_k \}. \quad (2.18)$$

A energia livre do sistema $\mathcal{F} = \mathcal{E} - T\mathcal{S}$ é, então, expressa na forma

$$\mathcal{F} = -2NJ_1 \left\{ \left[S - \left(f(0) - \frac{1}{2} - g(\delta) \right) \right]^2 - j \left[S - \left(f(0) - \frac{1}{2} - f(2\delta) \right) \right]^2 \right\} - 2T \sum_k \{ (\tilde{n}_k + 1) \ln(\tilde{n}_k + 1) - \tilde{n}_k \ln \tilde{n}_k \}. \quad (2.19)$$

Para determinar os parâmetros ω_k e θ_k , minimizamos a energia livre \mathcal{F} sob a condição de que a magnetização de cada sítio seja nula. Isto implica em exigir

$$\langle T_{2l}^z \rangle = \langle S_{2l+1}^z \rangle = 0,$$

ou

$$S + \frac{1}{2} - f(0) = 0. \quad (2.20)$$

A minimização da energia livre (2.19) sob a restrição (2.20), é feita usando o método dos multiplicadores de Lagrange, ou seja

$$\partial[\mathcal{F}/N - \mu f(0)]/\partial\theta_k = 0$$

e

$$\partial[\mathcal{F}/N - \mu f(0)]/\partial\omega_k = 0,$$

onde μ é o multiplicador de Lagrange. Resolvendo estas derivadas, obtemos

$$\begin{aligned}\tanh 2\theta_k &= \frac{\eta \cos k}{1 - \Gamma \sin^2 k}, \\ \omega_k &= \lambda [\cosh 2\theta_k - \eta \cos k \sinh 2\theta_k - \Gamma \sin^2 k \cosh 2\theta_k], \\ \lambda &= 2J_1 g(\delta) - \mu, \quad \eta = \frac{2J_1 g(\delta)}{\lambda}, \quad \Gamma = \frac{4jJ_1 f(2\delta)}{\lambda}.\end{aligned}\quad (2.21)$$

Reescrevemos essas equações de modo a obter

$$\omega_k = \lambda [(1 - \Gamma \sin^2 k)^2 - \eta^2 \cos^2 k]^{1/2}, \quad (2.22)$$

$$\begin{aligned}\cosh 2\theta_k &= \frac{1 - \Gamma \sin^2 k}{[(1 - \Gamma \sin^2 k)^2 - \eta^2 \cos^2 k]^{1/2}}, \\ \sinh 2\theta_k &= \frac{\eta \cos k}{[(1 - \Gamma \sin^2 k)^2 - \eta^2 \cos^2 k]^{1/2}}.\end{aligned}\quad (2.23)$$

Note que Γ é o parâmetro introduzido quando a interação entre segundos vizinhos é levada em consideração.

A relação de dispersão, ω_k , é obtida após os parâmetros λ , Γ , e η serem conhecidos. Esses parâmetros são obtidos ao resolvermos o seguinte grupo de equações auto-consistentes, provenientes das equações (2.20) e (2.21),

$$2S + 1 = \frac{\lambda}{N} \sum_k \frac{1 - \Gamma \sin^2 k}{\omega_k} \coth \left(\frac{\omega_k}{2T} \right), \quad (2.24)$$

$$\frac{\eta \lambda}{2J_1} = \frac{\lambda}{2N} \sum_k \frac{\eta \cos^2 k}{\omega_k} \coth \left(\frac{\omega_k}{2T} \right), \quad (2.25)$$

$$\frac{\Gamma \lambda}{4J_1} = \frac{\lambda j}{2N} \sum_k \frac{\cos 2k (1 - \Gamma \sin^2 k)}{\omega_k} \coth \left(\frac{\omega_k}{2T} \right). \quad (2.26)$$

Essas equações foram resolvidas para vários valores de j , incluindo também $j = 0$. Os resultados serão discutidos na Seção 2.5. Como será analisado posteriormente, a solução desse grupo de equações fornece $\eta < 1$ para qualquer valor de temperatura e de j investigados. Portanto, da equação (2.22), concluimos que a teoria MSW prevê um *gap* ($\omega_{k=0} \neq 0$) para o modelo de Heisenberg frustrado em concordância com trabalhos em teoria de campos [21, 22] disponíveis na literatura. A equação (2.22) poderia levar à conclusão errada de que o *gap* não depende da interação entre segundos vizinhos. Temos que lembrar, porém, que os valores dos parâmetros λ e η são determinados auto-consistentemente e, portanto, dependem de Γ .

2.4 O esquema FD

No procedimento anterior, usamos a aproximação da matriz densidade para antiferromagnetos. Os parâmetros ω_k e θ_k foram determinados através do cálculo variacional, ao minimizarmos a energia livre do sistema. A restrição de magnetização de subrede zero é cumprida através de um multiplicador de Lagrange, que é introduzido na energia livre. O esquema FD é um pouco diferente, como mostramos a seguir.

Começamos aplicando as transformações de Bogoliubov e de Fourier, definidas em (2.8) e (2.9), nas hamiltonianas H_0 e H_1 . A expressão obtida para H_0 é dada por

$$H_0 = E_1 + J_1 \sum_k \left\{ \omega_k^0 \left(\alpha_k^\dagger \alpha_k + \beta_k^\dagger \beta_k \right) + \gamma_k^0 \left(\alpha_k^\dagger \beta_k^\dagger + \alpha_k \beta_k \right) \right\}, \quad (2.27)$$

onde

$$E_1 = 4J_1SN [(1-j)\Gamma_1 - \Gamma_2 + j\Gamma_3], \quad (2.28)$$

$$\omega_k^0 = 2S(1 - 2j \sin^2 k) \cosh 2\theta_k - 2S \cos k \sinh 2\theta_k, \quad (2.29)$$

$$\gamma_k^0 = 2S \cos k \cosh 2\theta_k - 2S(1 - 2j \sin^2 k) \sinh 2\theta_k. \quad (2.30)$$

Note que, aqui, os termos cruzados $\alpha_k \beta_k$ e $\alpha_k^\dagger \beta_k^\dagger$ estão ainda presentes (compare com a equação 2.7). E_1 representa uma primeira correção para a energia do estado fundamental e exige as seguintes definições,

$$\Gamma_1 = \frac{1}{2N} \sum_k (\cosh 2\theta_k - 1), \quad (2.31)$$

$$\Gamma_2 = \frac{1}{2N} \sum_k \cos k \sinh 2\theta_k, \quad (2.32)$$

$$\Gamma_3 = \frac{1}{2N} \sum_k \cos 2k \cosh 2\theta_k. \quad (2.33)$$

No esquema FD, os termos envolvendo quatro operadores, presentes na hamiltoniana H_1 , são, aproximadamente, reduzidos a produtos de apenas dois operadores ao usarmos as relações de comutação padrão. Isto produz a seguinte expressão para H_1 ,

$$H_1 = E_2 - J_1 \sum_k \left\{ \omega_k^1 \left(\alpha_k^\dagger \alpha_k + \beta_k^\dagger \beta_k \right) - \gamma_k^1 \left(\alpha_k^\dagger \beta_k^\dagger + \alpha_k \beta_k \right) \right\}, \quad (2.34)$$

onde

$$E_2 = -2J_1N(\Gamma_1 - \Gamma_2)^2 + 2jJ_1N(\Gamma_1 - \Gamma_3)^2, \quad (2.35)$$

$$\begin{aligned} \omega_k^1 &= 2\Gamma_1 \cosh 2\theta_k + 2\Gamma_2 \cos k \sinh 2\theta_k - 2\Gamma_1 \cos k \sinh 2\theta_k \\ &\quad - 2\Gamma_2 \cosh 2\theta_k - 4j(\Gamma_1 - \Gamma_3) \sin^2 k \cosh 2\theta_k, \end{aligned} \quad (2.36)$$

$$\begin{aligned} \gamma_k^1 &= 2\Gamma_1 \sinh 2\theta_k + 2\Gamma_2 \cos k \cosh 2\theta_k - 2\Gamma_1 \cos k \cosh 2\theta_k \\ &\quad - 2\Gamma_2 \sinh 2\theta_k - 4j(\Gamma_1 - \Gamma_3) \sin^2 k \sinh 2\theta_k. \end{aligned} \quad (2.37)$$

A correção para a energia do estado fundamental devida a H_1 é dada por E_2 .

Como antes, a diagonalização da hamiltoniana (2.4) produz os resultados da teoria de onda de spin convencional: a divergência no número de modos de ondas de spin e, conseqüentemente, da magnetização de subrede. Além disso, no estado fundamental, a simetria de subrede é quebrada: spins na subrede A apontam predominantemente para cima e, na subrede B, predominantemente para baixo. No esquema FD, para eliminarmos esta divergência e restaurarmos a simetria de subrede, a energia livre é minimizada sujeita à restrição de que a magnetização de cada subrede seja nula, ou seja

$$\sum_l T_{2l}^z = \sum_l S_{2l+1}^z = 0,$$

ou

$$\sum_l a_{2l}^\dagger a_{2l} = \sum_l b_{2l+1}^\dagger b_{2l+1} = SN. \quad (2.38)$$

As equações acima são, obviamente, equivalentes a (2.20). Para cumprir a restrição (2.38), um multiplicador de Lagrange λ_{FD} é introduzido e a nova hamiltoniana \tilde{H} é dada por

$$\tilde{H} = H + 2J_1\lambda_{FD}(1-j)\sum_k (a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k). \quad (2.39)$$

Em termos dos operadores α_k e β_k , temos

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= H + 2J_1(1-j)\lambda_{FD} \sum_k \left\{ 2 \sinh^2 \theta_k + \cosh 2\theta_k (\alpha_k^\dagger \alpha_k \right. \\ &\quad \left. + \beta_k^\dagger \beta_k) - \sinh 2\theta_k (\alpha_k^\dagger \beta_k^\dagger + \alpha_k \beta_k) \right\}, \end{aligned} \quad (2.40)$$

A diagonalização de \tilde{H} dá a expressão para o parâmetro θ_k presente na transformação de Bogoliubov, que é determinado pela equação

$$\gamma_1(k) + \gamma_0(k) - 2J_1\lambda_{FD}(1-j) \sinh(2\theta_k) = 0, \quad (2.41)$$

ou seja

$$\tanh(2\theta_k) = \frac{(\Gamma_2 - \Gamma_1 + S) \cos(k)}{\Gamma_2 - \Gamma_1 + S + \lambda_{FD}(1-j) + 2\sin^2(k)j(\Gamma_1 - \Gamma_3 - S)}. \quad (2.42)$$

Reunindo as expressões transformadas para H_0 e H_1 , obtemos as expressões para a energia do estado fundamental, E_{GS} (de *Ground State Energy*), e a relação de dispersão, ω_k ,

$$E_{GS} = E_0 + E_1 + E_2 + 4J_1\lambda_{FD}N(1-j)\Gamma_1, \quad (2.43)$$

$$\omega_k = \omega_k^0 - \omega_k^1 + 2\lambda_{FD}(1-j) \cosh 2\theta_k. \quad (2.44)$$

Para a energia do sistema, temos

$$\mathcal{E} = \langle \tilde{H} \rangle = J_1 \sum_k \omega_k [\tilde{n}_1(k) + \tilde{n}_2(k)], \quad (2.45)$$

onde ω_k é dado por (2.44) e $\tilde{n}_1(k) = \langle \alpha_k^\dagger \alpha_k \rangle$ e $\tilde{n}_2(k) = \langle \beta_k^\dagger \beta_k \rangle$ são, respectivamente, os números de ocupação de bosons na subrede A e na subrede B.

A entropia do sistema é dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{S} = k_B \sum_k [& (\tilde{n}_1(k) + 1) \ln(\tilde{n}_1(k) + 1) - \tilde{n}_1(k) \ln(\tilde{n}_1(k)) \\ & + (\tilde{n}_2(k) + 1) \ln(\tilde{n}_2(k) + 1) - \tilde{n}_2(k) \ln(\tilde{n}_2(k))], \end{aligned} \quad (2.46)$$

e a expressão para a energia livre, \mathcal{F} , do sistema é

$$\begin{aligned} \mathcal{F} = J_1 \sum_k \omega_k [\tilde{n}_1(k) + \tilde{n}_2(k)] - k_B T \sum_k [& (\tilde{n}_1(k) + 1) \ln(\tilde{n}_1(k) + 1) \\ & - \tilde{n}_1(k) \ln(\tilde{n}_1(k)) + (\tilde{n}_2(k) + 1) \ln(\tilde{n}_2(k) + 1) - \tilde{n}_2(k) \ln(\tilde{n}_2(k))] \end{aligned} \quad (2.47)$$

Como o parâmetro θ_k é determinado por (2.42), a minimização da energia livre depende, agora, das derivadas parciais

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \tilde{n}_1(k)} = 0 \quad e \quad \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \tilde{n}_2(k)} = 0,$$

e resulta na otimização das funções de distribuição térmica

$$\langle \alpha_k^\dagger \alpha_k \rangle = \langle \beta_k^\dagger \beta_k \rangle \equiv \tilde{n}_k.$$

O multiplicador de Lagrange, λ_{FD} , é determinado auto-consistentemente pela condição

$$\sum_l T_{2l}^z - \sum_l S_{2l+1}^z = 0,$$

ou

$$\sum_k [a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k] = 2SN. \quad (2.48)$$

Tomando a média térmica de (2.48), e, lembrando que $\langle \alpha_k \beta_k \rangle = \langle \alpha_k^\dagger \beta_k^\dagger \rangle = 0$ e $\langle \alpha_k^\dagger \alpha_k \rangle = \langle \beta_k^\dagger \beta_k \rangle \equiv \tilde{n}_k$ é o número de ocupação boson usual, chegamos a

$$2S + 1 = \frac{1}{N} \sum_k (2n_k + 1) \cosh 2\theta_k. \quad (2.49)$$

Assim, o esquema FD exige a determinação de quatro parâmetros, λ_{FD} , Γ_1 , Γ_2 e Γ_3 , definidos pelas equações (2.31-2.33) e (2.49).

2.5 Resultados

Começamos comparando os resultados obtidos através da aplicação dos procedimentos SWDM e FD para o modelo de Heisenberg não frustrado, porque existem mais dados - teóricos e experimentais - disponíveis para este modelo. A teoria MSW não é um método de expansão para spin-grande e, assim, podemos esperar que ela possa ser aplicada para modelos com valor de spin pequeno. Neste trabalho, consideraremos apenas o caso de spin $S = 1$.

2.5.1 O modelo de Heisenberg 1D não frustrado

Na Tabela 2.1, apresentamos os resultados obtidos para a energia do estado fundamental, E_{GS} , do modelo de Heisenberg 1D não frustrado com spin $S = 1$, calculada através das aproximações FD e SWDM e comparamos esses dados com estimativas numéricas obtidas pelo uso das técnicas de Monte-Carlo quântico [51] (QMC), grupo de renormalização da matriz densidade [52] (DMRG), e diagonalização exata [53]. Observamos que a estimativa do esquema FD para E_{GS} está ligeiramente mais próxima das estimativas numéricas do que a SWDM. A terceira coluna da Tabela 2.1 dá as estimativas destas aproximações, SWDM e FD, para o *gap* na temperatura zero, Δ_0 : esses valores estão próximos um do outro, mas são, ambos, muito menores

Tabela 2.1: Energia do estado fundamental, E_{GS} , e o *gap* na temperatura zero para $j = 0$, Δ_0 .

	$E_{GS}/(J_1 S^2)$	$\Delta_0/(J_1 S^2)$
SWDM	-1.49014	0.08506
FD	-1.39461	0.08523
QMC	-1.401481(4)	0.41048(6)
DMRG	-1.401484038971(4)	0.41050(2)
ED	-1.401485(2)	0.41049(2)

do que as estimativas numéricas. Devemos enfatizar, porém, que, até o presente momento, nenhuma outra aproximação analítica é realmente capaz de prever o módulo de Δ_0 , em função de parâmetros microscópicos. Normalmente, o que se obtém é um grupo de expressões para temperaturas finitas envolvendo razões como T/Δ_0 . Portanto, para comparar a previsão teórica para a dependência da temperatura do *gap* com dados numéricos e/ou experimentais é habitual comparar o comportamento da razão do *gap* calculado na temperatura T , $\Delta(T)$, pelo *gap* na temperatura zero, Δ_0 , em função de T/Δ_0 , como mostrado na Figura 2.1. Nessa figura, as curvas contínuas e pontilhadas correspondem, respectivamente, aos resultados FD e SWDM. É fácil perceber que essas duas aproximações dão essencialmente o mesmo resultado para temperaturas pequenas. Para $T/\Delta_0 > 1.0$, a estimativa obtida pelo esquema FD é um pouco menor do que a do esquema SWDM. Os dados experimentais obtidos para os compostos Y_2BaNiO_5 [9] e $NiNiAZ$ [8] e os dados numéricos obtidos através do método de Monte-Carlo quântico [54] são também mostrados na Figura 2.1.

Vemos que os resultados FD e SWDM estão em bom acordo com os dados de Monte Carlo quântico. Observando o comportamento das curvas teóricas com a temperatura vemos que a comparação com os dados experimentais é ligeiramente melhor para o composto Y_2BaNiO_5 . Os dados para o composto $NiNiAZ$ [8] mostram um aumento menor de $\Delta(T)/\Delta_0$ com a temperatura do que o resultado previsto pela teoria MSW. É importante salientar que as barras de erro de ($\sim 10\%$) para os dados experimentais do Y_2BaNiO_5 [9] não foram incluídas na Figura 2.1 e sua inclusão pode levar para um comportamento semelhante ao do composto $NiNiAZ$. Contudo, deve ser lembrado que o composto Y_2BaNiO_5 é uma melhor realização [9] da Hamil-

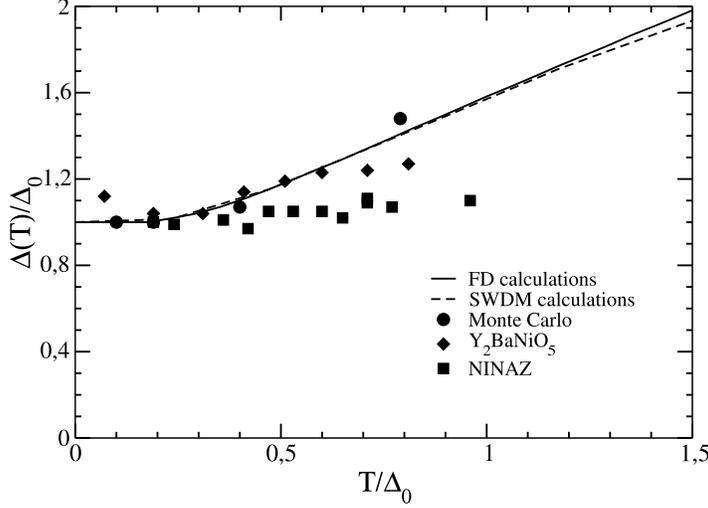


Figura 2.1: Gap normalizado, $\Delta(T)/\Delta_0$, em função da temperatura normalizada, T/Δ_0 , para $j = 0$. Os resultados da teoria MSW (linhas contínuas e pontilhadas) são comparados com os dados de Monte Carlo [54], e os dados experimentais obtidos para os compostos Y_2BaNiO_5 [9] e NINAZ [8].

toniana isotrópica (1.6) do que o composto *NINAZ*, porque existe uma anisotropia maior neste último composto.

Embora estejamos, aqui, restringindo nossa discussão para o caso $S = 1$, é importante mencionar que a teoria MSW prevê que o valor do *gap* na temperatura zero diminui com o aumento do valor de S . Para obter este resultado, fazemos $j = \Gamma = 0$ nas equações (2.24-2.26) e $\Gamma = 0$ na equação (2.22) obtendo

$$S + \frac{1}{2} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{2(1 - \eta^2 \cos^2 k)^{1/2}} \coth\left(\frac{\omega_k}{2T}\right), \quad (2.50)$$

$$\frac{\eta^2 \lambda}{2J_1} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\eta^2 \cos^2 k}{2(1 - \eta^2 \cos^2 k)^{1/2}} \coth\left(\frac{\omega_k}{2T}\right). \quad (2.51)$$

Nas expressões acima, $\omega_k = \lambda(1 - \eta^2 \cos^2 k)^{1/2}$ e, como antes, temos um *gap* em $k = 0$, para qualquer temperatura, uma vez que $\eta < 1$. Para $T = 0$, as equações

(2.50) e (2.51), na forma contínua ($\frac{1}{N} \sum_k \rightarrow \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2}$), são escritas como

$$S + \frac{1}{2} = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{dk}{(1 - \eta^2 \cos^2 k)^{1/2}}, \quad (2.52)$$

$$\frac{\eta^2 \lambda}{2J_1} = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{\eta^2 \cos^2 k}{(1 - \eta^2 \cos^2 k)^{1/2}}. \quad (2.53)$$

Os integrandos de (2.52) e (2.53) correspondem, respectivamente, às integrais elípticas de primeiro e segundo tipo,

$$K(\eta) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{dk}{(1 - \eta^2 \cos^2 k)^{1/2}},$$

e

$$E(\eta) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{\eta^2 \cos^2 k}{(1 - \eta^2 \cos^2 k)^{1/2}}.$$

Em termos destas integrais, as equações (2.52) e (2.53) adquirem a seguinte forma

$$S + \frac{1}{2} = \frac{1}{\pi} K(\eta), \quad (2.54)$$

$$\frac{\eta^2 \lambda}{2J_1} = S + \frac{1}{2} - \frac{E(\eta)}{\pi}. \quad (2.55)$$

As equações (2.54) e (2.55) são exatamente as equações obtidas por Arovas e Auerbach [55] ao usarem uma teoria de integral funcional. As expressões assintóticas para $K(\eta)$ e $E(\eta)$ são dadas por

$$\begin{aligned} K(\eta) &= \ln \frac{4}{(1 - \eta^2)^{1/2}} + \\ &\quad \frac{1}{4}(1 - \eta^2) \times \left[\ln \frac{4}{(1 - \eta^2)} - 1 \right] + \dots, \\ E(\eta) &= 1 + \frac{1}{2}(1 - \eta^2) \times \left[\ln \frac{4}{(1 - \eta^2)^{1/2}} - 1 \right] + \dots, \end{aligned}$$

que são válidas para $|1 - \eta| \ll 1$. Usando estas expansões assintóticas, obtemos

$$\begin{aligned} S + \frac{1}{2} &\cong \frac{1}{\pi} \ln \frac{4}{(1 - \eta^2)^{1/2}}, \\ (1 - \eta^2)^{1/2} &= 4e^{-\frac{\pi}{2} - \pi S}, \end{aligned} \quad (2.56)$$

e

$$\lambda \cong 2 \left(S + \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \right), \quad (2.57)$$

da equação (2.55), onde substituímos $\eta^2 \cong 1$, $K(\eta) \cong \ln \frac{4}{(1-\eta^2)^{1/2}}$ e $E(\eta) \cong 1$. Assim, através da definição do *gap* na temperatura zero e usando (2.56) e (2.57), obtemos

$$\Delta_0 \cong 8e^{-\frac{\pi}{2}} \left(S + \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \right) \times e^{-\pi S}, \quad (2.58)$$

que é a expressão previamente obtida por Pires e Gouvêa [49]. No caso do modelo σ não linear, o grupo de renormalização com acoplamento fraco leva a um resultado muito semelhante, $\Delta_0 = CS^2 \exp(-\pi S)$, onde C é um fator multiplicativo independente de S . Então, vemos que duas teorias bem distintas - teoria MSW e grupo de renormalização - prevêem comportamento semelhante para Δ_0 em função de S .

Concluimos esta subseção notando que a comparação entre os resultados da teoria MSW e os dados de Monte Carlo quântico permite dizer que a teoria MSW é capaz de descrever o comportamento do *gap* normalizado como uma função de T/Δ_0 e que as duas aproximações da teoria MSW investigadas aqui dão resultados semelhantes/equivalentes, apesar da diferença considerável no grupo de equações auto-consistentes a ser resolvido em cada uma delas.

2.5.2 O modelo de Heisenberg 1D frustrado

Para $j = 0$, o estado fundamental do modelo clássico é o estado de Néel. O acoplamento J_2 introduz frustração no problema e o estado de Néel não pode ser o estado fundamental para valores grandes de J_2 . Na região em que J_2 é grande, podemos esperar que cada subrede tenha algum tipo de alinhamento “espiral”, isto é, um estado que pode ser obtido do estado de Néel ao aplicarmos uma torção uniforme ao longo da direção da cadeia. No limite $S \rightarrow \infty$, um tratamento clássico mostra que o estado fundamental está na fase-Néel para $J_2 < 1/4$ e em uma fase espiral para $J_2 > 1/4$. Portanto, não podemos esperar que nossos cálculos sejam válidos para toda região $0 \leq j \leq 1$, porque o tratamento apresentado aqui parte da transformação de bosons definida em (2.2), considerando apenas desvios pequenos da ordem de Néel.

Para o modelo de Heisenberg antiferromagnético unidimensional de spin 1 frustrado não conhecemos resultados experimentais ou de Monte Carlo quântico que possam servir para uma comparação. A comparação de nossos resultados se limitará aos dados numéricos obtidos por Tonegawa *et al.* [20]: a energia do estado

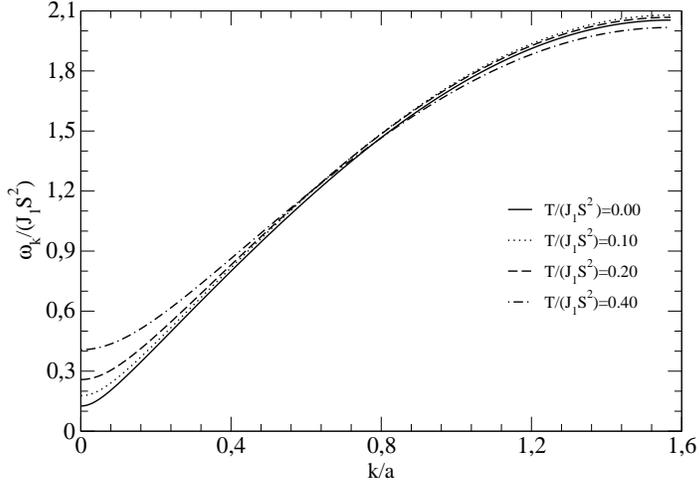


Figura 2.2: Esquema SWDM. Relação de dispersão em função de k/a .

fundamental em função do parâmetro j e o gap na temperatura zero, $\Delta(T = 0)$, normalizado pelo gap na temperatura zero para $j = 0$, Δ_0 , em função de j .

As Figuras 2.2 e 2.3 mostram o comportamento da relação de dispersão ω_k em função de k/a , para $j = 0.10$, para diferentes valores da temperatura. A Figura 2.2, corresponde ao procedimento SWDM e a Figura 2.3, ao FD. Observando estas figuras, vemos que o gap para o modelo em discussão aumenta com a temperatura.

A energia do estado fundamental é obtida pela equação (2.17) no procedimento SWDM e por (2.43) na aproximação FD. Os resultados são mostrados na Figura 2.4, onde também os comparamos com os resultados obtidos numericamente por Tonegawa *et al.* [20]. Em seu trabalho, Tonegawa e colaboradores aplicaram o método de diagonalização exata para investigar algumas propriedades do estado fundamental, incluindo a energia e o gap para sistemas de tamanho finito de até 16 sítios. A extrapolação dos resultados para o limite $N \rightarrow \infty$ mostrou que os resultados com $N = 16$ são suficientes para discutir satisfatoriamente bem as propriedades do estado fundamental. Analisando o comportamento da função correlação de dois spins, aqueles autores [20] observaram um caráter comensurável para $j \leq 0.38$ e um caráter incomensurável para $j > 0.38$. Assim, eles restringiram seus cálculos à região $j < 0.40$, como pode ser visto na Figura 2.4. É fácil observar que nossos resultados

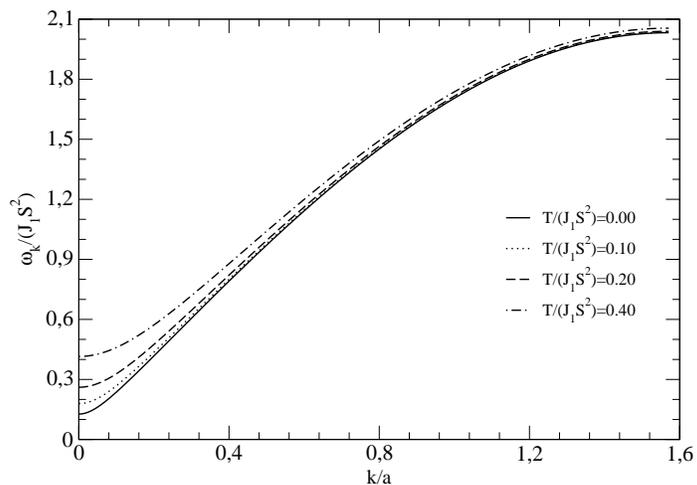


Figura 2.3: Esquema FD. Relação de dispersão em função de k/a .

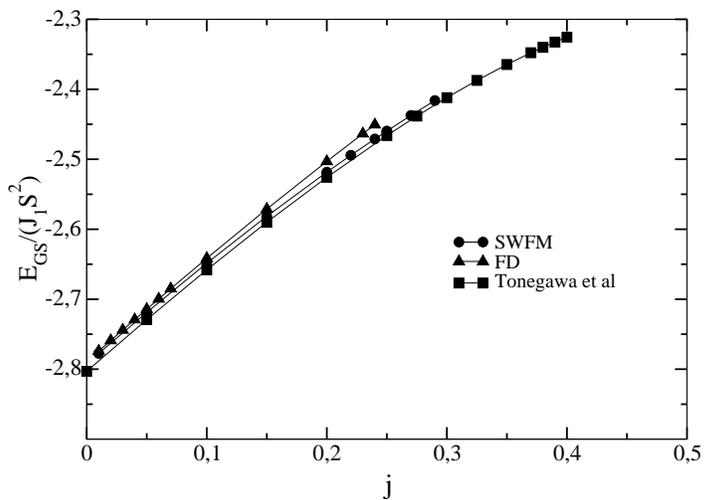


Figura 2.4: Energia do estado fundamental, E_{GS} , em função de j . Os resultados dos esquemas FD (triângulos) e SWDM (círculos) são comparados com os dados numéricos disponíveis na literatura [20] (quadrados).

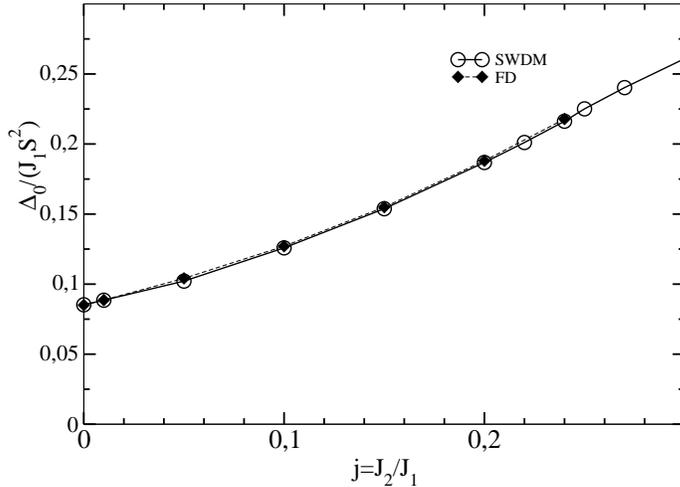


Figura 2.5: Gap na temperatura zero, Δ_0 , em função de j obtido das duas aproximações: FD (losângulos cheios) e SWDM (círculos abertos).

estão em excelente acordo com os resultados obtidos por Tonegawa *et al.* No entanto, observando a Figura 2.4, vemos que os resultados do esquema FD (triângulos) cobrem apenas a região $j < 0.25$, enquanto os dados do esquema SWDM chegam até $j \approx 0.30$. Isto acontece porque não pudemos encontrar uma solução para o grupo de equações auto-consistentes (2.31-2.32) e (2.49) para $j > 0.25$ na aproximação FD e para $j > 0.30$ (Eqs. 2.24-2.26) na aproximação SWDM. Nossa interpretação para essa ausência de solução para o conjunto de equações auto-consistentes é que ela é devida ao limite de validade de cada procedimento sugerindo, assim, uma mudança na estrutura do estado fundamental, como discutido acima. É interessante observar que quando as soluções para o sistema de equações podem ser encontradas, os resultados obtidos pelas duas aproximações são quase idênticos.

O *gap* na temperatura zero, Δ_0 , em função do parâmetro de frustração, j , é mostrado na Figura 2.5 onde vemos que, outra vez, as aproximações FD e SWDM dão resultados idênticos. Podemos também verificar que a competição entre as interações nn e nnn antiferromagnéticas estabiliza o *gap* uma vez que Δ_0 aumenta com j . Este resultado está em acordo qualitativo com aquele encontrado por Tonegawa *et al.* [20]. Outro tratamento analítico [56], prevê um *gap* no sistema que

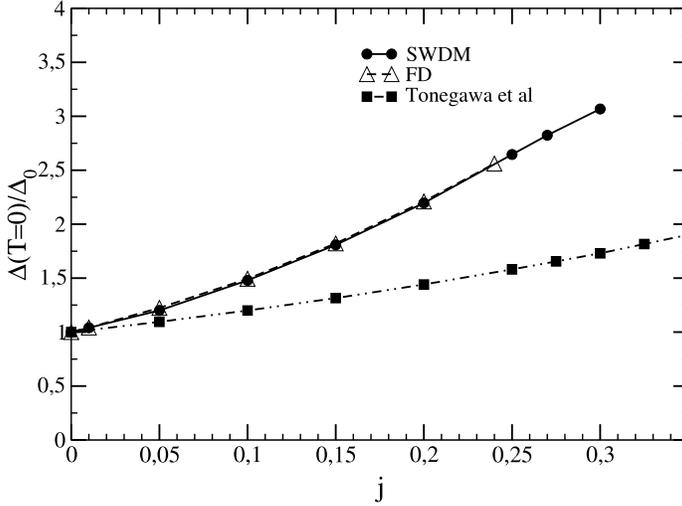


Figura 2.6: Gap na temperatura zero, $\Delta(T = 0)$, normalizado pelo *gap* na temperatura zero para $j = 0$, Δ_0 , em função de j . Os resultados da MSWT (triângulos abertos \rightarrow FD e círculos cheios \rightarrow SWDM) são comparados com os resultados numéricos obtidos por Tonegawa et al [20] (quadrados cheios).

diminui com o aumento de j . Porém, como argumentado pelos autores daquele trabalho, Shimaoka e Kuboki, a diferença entre os resultados por eles obtidos e os numéricos [20] pode ser devida ao fato de que o diagrama de fase obtido em [56] não é suficientemente preciso. O diagrama de fase do estado fundamental e algumas propriedades de baixa energia do antiferromagneto de Heisenberg frustrado 1D foram também investigadas por Pati *et al.* [23] e por Kolezhuk *et al.* [24] usando o método do grupo de renormalização da matriz densidade. Os resultados obtidos por esses autores para o comportamento do *gap* em função de j mostram que Δ_0 aumenta com o parâmetro de frustração para j menor do que ≈ 0.4 ; para j entre 0.4 e 0.73 o *gap* diminui. Tomando em conta que nossa teoria é válida para j pequeno, e que, nesta região, o comportamento obtido para o *gap* em função de j concorda qualitativamente bem com o obtido numericamente [20, 23], concluímos que a teoria MSW prevê o comportamento correto.

Para compararmos nossos resultados com os dados numéricos obtidos nas referências [20] e [23], obtemos o *gap* “normalizado”, isto é, o *gap* obtido para um dado valor de j na temperatura zero, dividido pelo *gap* para $j = 0$ em $T = 0$, Δ_0 ,

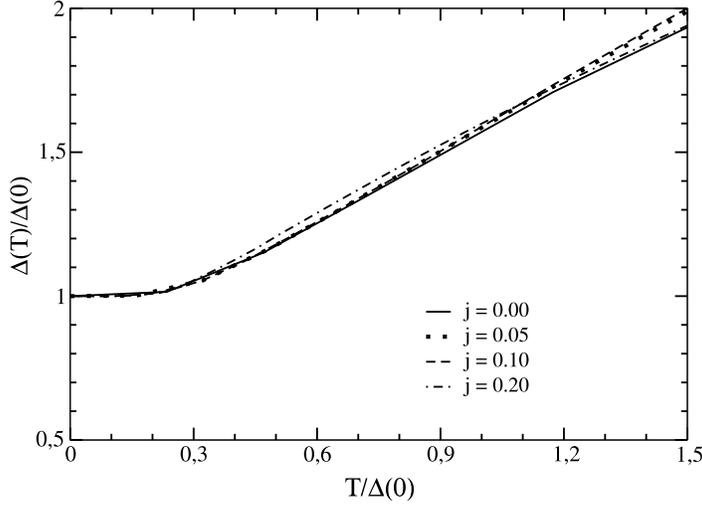


Figura 2.7: Gap na temperatura T , $\Delta(T)$, normalizado pelo valor do *gap* na temperatura zero para cada valor de j , $\Delta(0)$, em função da temperatura normalizada, $T/\Delta(0)$, para $j = 0.00, 0.05, 0.10$, e 0.20 .

para vários valores de j . O resultado está mostrado na Figura 2.6. A normalização é necessária porque a estimativa da teoria MSW para o *gap* é consideravelmente menor do que as estimativas numéricas. Como dissemos antes, nenhum procedimento analítico prevê o valor do *gap* em termos de parâmetros microscópicos. A Figura 2.6 mostra que o comportamento obtido para $\Delta(T = 0)/\Delta_0$ aumenta mais rapidamente com j nos cálculos via teoria MSW do que nos resultados numéricos obtidos por Tonegawa *et al.*

Na Figura 2.7, mostramos o comportamento do *gap* normalizado para vários valores de j , em função da temperatura. Nesta figura, apresentamos apenas os resultados obtidos no esquema SWDM uma vez que os resultados anteriores e, em especial, a Figura 2.6, mostram que os dois procedimentos, FD e SWDM, fornecem resultados idênticos. É interessante notar que $\Delta(T = 0)/\Delta_0$ aumenta com T da mesma forma para todo j : na região investigada, o grau de frustração, j , não afeta a dependência do *gap* normalizado com a função da temperatura.

Vamos, agora, discutir o comportamento da função de correlação entre dois spins. A expressão para o produto de dois operadores de spin depende da subrede,

A ou B, em que cada operador se encontra. Dessa forma, temos

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{2l} \cdot \mathbf{S}_{2l'+1} &= -S^2 + S(a_{2l}^\dagger a_{2l} + b_{2l'+1}^\dagger b_{2l'+1} - a_{2l} b_{2l'+1} \\ &\quad - a_{2l}^\dagger b_{2l'+1}^\dagger) + \frac{1}{2} a_{2l}^\dagger (b_{2l'+1}^\dagger - a_{2l})^2 b_{2l'+1}, \end{aligned} \quad (2.59)$$

para $\mathbf{T}_{2l} \in A$ e $\mathbf{S}_{2l'+1} \in B$,

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{2l} \cdot \mathbf{T}_{2l'} &= S^2 - S(a_{2l} - a_{2l'})(a_{2l}^\dagger - a_{2l'}^\dagger) \\ &\quad - \frac{1}{2} a_{2l}^\dagger a_{2l+2}^\dagger (a_{2l} - a_{2l+2})^2, \end{aligned} \quad (2.60)$$

para \mathbf{T}_{2l} e $\mathbf{T}_{2l'} \in A$, $l \neq l'$, e

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{2l+1} \cdot \mathbf{S}_{2l'+1} &= S^2 - S(b_{2l+1}^\dagger - b_{2l'+1}^\dagger)(b_{2l+1} - b_{2l'+1}) \\ &\quad - \frac{1}{2} (b_{2l+1}^\dagger - b_{2l'+1}^\dagger)^2 b_{2l+1} b_{2l'+1}, \end{aligned} \quad (2.61)$$

para \mathbf{S}_{2l+1} e $\mathbf{S}_{2l'+1} \in B$, $l \neq l'$.

Desacoplando os termos de quatro operadores de acordo com o exemplo dado pela equação (2.16), o valor esperado para estes produtos é dado por

$$\langle \mathbf{T}_{2l} \cdot \mathbf{S}_{2l'+1} \rangle = - \left[S + \frac{1}{2} - f(0) - g(r_{2l} - r_{2l'+1}) \right]^2, \quad (2.62)$$

para $\mathbf{T}_{2l} \in A$ e $\mathbf{S}_{2l'+1} \in B$, e

$$\langle \mathbf{T}_{2l} \cdot \mathbf{T}_{2l'} \rangle = \langle \mathbf{S}_{2l+1} \cdot \mathbf{S}_{2l'+1} \rangle = - \left[S + \frac{1}{2} - f(0) + f(r_{2l} - r_{2l'}) \right]^2, \quad (2.63)$$

onde $l \neq l'$ e os spins pertencem à mesma subrede, A ou B. Nas equações acima, usamos $f(r_{2l} - r_{2l'}) = f(r_{2l+1} - r_{2l'+1})$. As funções $f(r)$ e $g(r)$ foram definidas em (2.14) e (2.15).

Usando a condição (2.20), o valor esperado para o produto de dois spins localizados em subredes diferentes, é dado por

$$\langle \mathbf{T}_{2l} \cdot \mathbf{S}_{2l'+1} \rangle = -g^2(r_{2l} - r_{2l'+1}), \quad (2.64)$$

e para spins na mesma subrede,

$$\langle \mathbf{T}_{2l} \cdot \mathbf{T}_{2l'} \rangle = \langle \mathbf{S}_{2l+1} \cdot \mathbf{S}_{2l'+1} \rangle = f^2(r_{2l} - r_{2l'}), \quad (2.65)$$

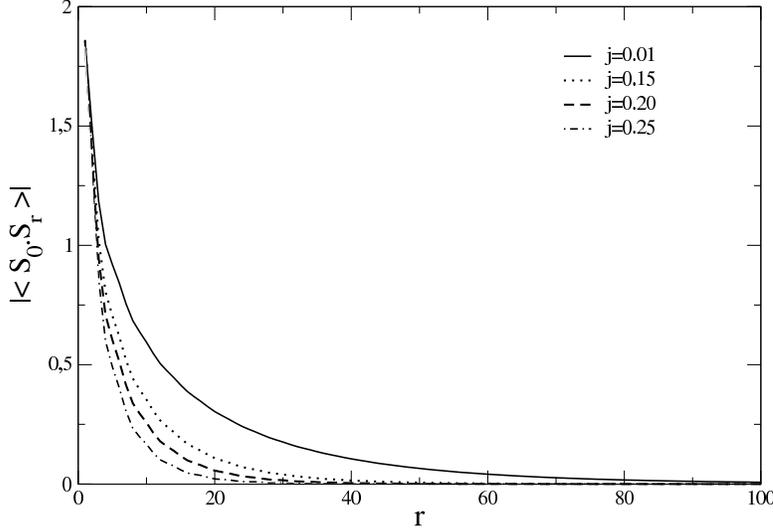


Figura 2.8: Função correlação $|\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_r \rangle|$ em função da distância r , para vários valores de j .

Das equações (2.14) e (2.15), obtemos $f(r) = 0$ para $(-1)^r = -1$ e $g(r) = 0$ para $(-1)^r = 1$. Assim, usando as equações (2.64) e (2.65), podemos obter a expressão geral para a função de correlação, $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle$.

$$\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle = -g^2(r_i - r_j) + f^2(r_i - r_j) - \frac{1}{4}\delta_{i,j}. \quad (2.66)$$

A expressão 2.66 vale para spins nas duas subredes. O primeiro termo vem da correlação entre spins localizados em subredes diferentes enquanto o segundo vem da correlação entre dois spins localizados numa mesma subrede.

O comportamento de $|\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle|$, para $T = 0$, em função da distância entre os spins é mostrado na Figura 2.8: a função correlação decai muito rápido quando j aumenta, como esperado. De fato, verificamos que o decaimento mostrado na Figura 2.8 é bem ajustado pela função $\exp(-r/\xi)/\sqrt{r}$, com o parâmetro ξ - identificado como o comprimento de correlação - diminuindo quando j aumenta. A Figura 2.9 mostra o ponto, r_f , no qual nossos resultados numéricos começam a concordar com a expansão assintótica, em função do parâmetro de frustração j .

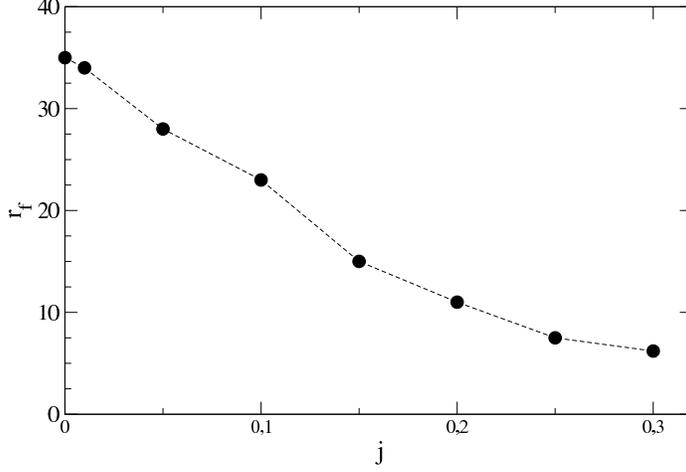


Figura 2.9: O ponto r_f , para o qual nossos resultados começam a concordar com a expansão assintótica, em função do parâmetro de frustração j .

A transformada de Fourier da função correlação (2.66) é

$$\begin{aligned}
 \mathbf{S}(q) &= \sum_r \exp(iqr) \langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_r \rangle \\
 &= \sum_r \exp(iqr) \left[f^2(r) - g^2(r) - \frac{1}{4} \delta_{0,r} \right] \\
 &= -\frac{1}{4} + \frac{1}{N} \sum_k \cosh(2\theta_{k-q} - 2\theta_k) \left(\tilde{n}_{k-q} + \frac{1}{2} \right) \left(\tilde{n}_k + \frac{1}{2} \right), \quad (2.67)
 \end{aligned}$$

onde $\cosh(2\theta_k)$ e $\sinh(2\theta_k)$ são definidos na equação (2.23) e \tilde{n}_k é dado por (2.11).

O fator de estrutura, $S(q = \pi)$, é então dado por

$$\begin{aligned}
 S(\pi) &= \frac{1}{N} \sum_k \cosh(2\theta_{k-\pi} - 2\theta_k) \left(\tilde{n}_{k-\pi} + \frac{1}{2} \right) \left(\tilde{n}_k + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{4}, \\
 &= \frac{1}{N} \frac{1}{4} \sum_k \frac{(1 - \Gamma \sin^2 k)^2 + \eta^2 \cos^2 k}{(1 - \Gamma \sin^2 k)^2 - \eta^2 \cos^2 k} - \frac{1}{4}. \quad (2.68)
 \end{aligned}$$

No limite termodinâmico, $S(\pi)$ está relacionada ao quadrado médio da magnetização “staggered” m por $Nm^2 = S(\pi)$. A solução das equações (2.24-2.26) mostra que, quando j varia na região de validade da aproximação aqui usada, η não varia apreciavelmente (de 0.999349 em $j = 0$ e 0.993872 em $j = 0.30$), enquanto Γ aumenta,

aproximando do valor 0,50 quando $j \rightarrow j_{max}$. É fácil perceber que, para $\Gamma \rightarrow 0.5$, a equação (2.68) fornece um valor pequeno, sinalizando que a ordem de longo alcance sumirá neste limite. De fato, para $\Gamma = 0.5$, a equação (2.24) não tem uma solução, justificando a ausência de uma solução para o conjunto de equações auto-consistente para $j > j_{max}$.

2.6 Conclusões

Neste capítulo, usamos a teoria de MSW para investigar a energia do estado fundamental e o *gap* do modelo de Heisenberg antiferromagnético 1D frustrado com $S = 1$. Este modelo tem atraído o interesse de vários trabalhos numéricos que investigam as propriedades de temperatura baixa e o diagrama de fase do modelo. Nosso objetivo foi mostrar que uma teoria analítica simples como a teoria MSW fornece resultados confiáveis para o comportamento do sistema a baixa temperatura.

Nossos resultados mostram que a teoria MSW dá boas estimativas da energia do estado fundamental e prevê um comportamento qualitativamente correto para o *gap* em função do parâmetro de frustração. Porém, o *gap* obtido via teoria MSW aumenta com j mais rapidamente do que o encontrado em outros trabalhos numéricos. Contudo é interessante ressaltar que o método de bosonização [56] aplicado ao mesmo modelo prevê um *gap* que diminui com o aumento de j , em desacordo com os resultados numéricos. A teoria MSW, apesar de sua simplicidade, pode prever um comportamento qualitativamente correto. Comparamos, também, dois procedimentos para implementar a teoria MSW; aqui referimo-nos a essas aproximações como FD e SWDM. Os resultados dados por cada receita são bem semelhantes, exceto pelo valor máximo de j que permite a solução do grupo de equações auto-consistentes produzidas em cada procedimento: no esquema FD, $j_{max} = 0.25$ enquanto $j_{max} = 0.30$ no SWDM.

Kolezhuk, Roth e Schollwöck [57], [58] identificaram um ponto de desordem em $j_D = 0.284$ para esse modelo. Este ponto de desordem surge se o sistema tem duas fases diferentes a temperatura baixa, isto é, uma fase com ordem antiferromagnética e uma fase espiral com um número de onda que é, usualmente, incomensurável. Uma transição de fase semelhante existe para o modelo de Heisenberg antiferromagnético unidimensional frustrado clássico. Para $j < j_c = 0.25$, a cadeia está antiferromag-

neticamente ordenada, enquanto que para $j > 0.25$ existe uma ordem espiral com um vetor de onda dado por $q(j) = \cos^{-1}(-0.25j)$. Somos levados, a sugerir que a falha da teoria MSW em resolver as equações auto-consistentes, para $j > j_{max}$ está de, alguma forma, relacionada à existência deste ponto de desordem.

Capítulo 3

Dinâmica de spin da cadeia de Heisenberg antiferromagnética de spin 1 com interações entre primeiros e segundos vizinhos

3.1 Introdução

Neste capítulo, apresentamos nossos resultados para a função de correlação dinâmica do modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin 1 unidimensional com interações entre primeiros e segundos vizinhos, por meio da combinação da abordagem da equação de movimento com o método do operador de projeção, como originalmente proposto por Reiter [59, 60] e depois sistematizado por outros autores [61, 62]. O procedimento adotado é válido no limite de temperatura baixa e o método do operador de projeção inclui até processos de dois mágnons. Vale dizer que, embora exista um número apreciável de trabalhos tratando de propriedades como energia do estado fundamental, comportamento do *gap* em função da temperatura e do parâmetro de frustração - como visto no capítulo anterior - não existem trabalhos dedicados ao comportamento dinâmico desse sistema. Nosso cálculo para a dinâmica desse sistema se encontra publicado na referência [63].

O método empregado tem sido bem sucedido no estudo dos modelos clássicos e quânticos de Heisenberg em uma [64] e duas dimensões [65, 66], mostrando um bom acordo com os dados experimentais, simulações de Dinâmica de Spin, e, também, com outras teorias [67].

Reiter [68] aplicou esta técnica ao estudo dos antiferromagnetos de Heisenberg quânticos unidimensionais com valores grandes de S , mas seus cálculos partiram da teoria de onda de spin convencional e, por essa razão, a relação de dispersão não apresenta um *gap* em $q = 0$, como esperado [2, 3].

Devemos também comentar que uma primeira tentativa para estudar as propriedades dinâmicas de (2.1) poderia ser feita, com simplicidade maior, nos moldes da teoria de onda de spin, calculando quantidades como $\langle S_i(t)S_j(0) \rangle$ e suas transformadas: esse procedimento foi aplicado por muitos autores para obter informação sobre o comportamento dinâmico de outros sistemas de spin. Apesar de sua simplicidade, este último procedimento - que será chamado aqui como método da dinâmica de onda de spin usual - tem algumas desvantagens quando comparado ao método adotado em nosso trabalho. Por exemplo, espalhamento de mágnons não são incluídos no procedimento mais simples e, portanto, nosso cálculo é, neste sentido, mais avançado. Uma discussão interessante a respeito das semelhanças e diferenças entre a dinâmica de onda de spin usual e os métodos do operador de projeção, pode ser encontrada nas Refs. [69] e [70] onde os autores comentam os resultados obtidos aplicando cada um desses dois métodos para ferromagnetos de Heisenberg 1D e 2D.

O cálculo da função de correlação dinâmica de spin, de modo geral, exige o conhecimento das correlações estáticas $\langle S_0 S_n \rangle$ para n variando entre 0 e ∞ . Porém, no método de Reiter, a função de correlação dinâmica é escrita em termos da função memória que depende apenas de correlações entre primeiros e segundos vizinhos. Dessa forma, o método exige apenas ordem local. Embora o antiferromagneto de Heisenberg 1D quântico não exiba ordem de Néel, mesmo em $T = 0$, ele apresenta uma ordem local, em uma distância da ordem do comprimento de correlação ξ . Essa mesma hipótese, de ordem de curto alcance com caráter de Néel, é também usada quando fazemos um mapeamento para o modelo sigma não linear.

Para S grande, ξ torna-se maior do que o espaçamento de rede, e, então, uma teoria de onda de spin e uma aproximação contínua são, de fato, apropriadas. Porém, o comprimento de correlação é apreciável mesmo para $S = 1$ ($\xi \approx 7$). De acordo com Reiter [59, 60] e de Raedt [61, 62], podemos calcular as funções de correlação de operadores combinados em quantidades rotacionalmente invariantes envolvendo spins localizados dentro de uma distância menor ou da ordem de um comprimento de correlação. Obtemos, assim, o termo principal dentro de uma

expansão da temperatura exatamente.

Uma das vantagens do método de Reiter é que ele nos permite fazer cálculos para todos os valores do comprimento de onda q . Por outro lado, o modelo $NL\sigma$ (de *sigma não-linear*) só pode ser usado no limite de comprimento de onda longo, isto é, $q \rightarrow 0$.

Para usarmos o método de Reiter, necessitamos conhecer a frequência dos modos de onda de spin. A teoria MSW, apresentada no Capítulo 2, fornece esta informação. Assim, neste trabalho, o *gap* é incluído no cálculo da dinâmica de uma forma consistente porque combinamos o método do operador de projeção com a teoria MSW. Como mostramos, no capítulo anterior, que os procedimentos SWDM e FD são equivalentes, passamos, neste capítulo, a utilizar apenas a aproximação SWDM para as correlações estáticas necessárias para o cálculo da função de correlação dinâmica no contexto do método do operador de projeção.

3.2 O método do operador de projeção

Em antiferromagnetos, ondas de spin têm dois “ramos”, um associado à magnetização convencional, $M_q^\alpha = S_q^\alpha + T_q^\alpha$, e outro à magnetização “*staggered*”, $\mathcal{R}_q^\alpha = S_q^\alpha - T_q^\alpha$, com $\alpha = x, y, z$. Para baixas temperaturas, a função de correlação associada à magnetização “*staggered*”, \mathcal{R}_q^α , é a contribuição principal para o fator de estrutura na vizinhança do vetor de onda antiferromagnético [19, 66]. Neste trabalho, estaremos envolvidos, então, com o cálculo da função de correlação relacionada a \mathcal{R}_q^α . O cálculo da função M_q^α pode também ser feito seguindo o mesmo procedimento, mas não foi o objetivo deste trabalho.

Enfatizamos que apenas quantidades rotacionalmente invariantes como $\mathcal{R}_q = \frac{1}{3}(\mathcal{R}_q^x + \mathcal{R}_q^y + \mathcal{R}_q^z)$ devem ser calculadas no formalismo adotado. Devido à característica isotrópica da hamiltoniana (2.1), cada uma das três componentes de spin dá a mesma contribuição para o comportamento dinâmico do modelo. No entanto, a transformação de Dyson-Maleev quebra a simetria do espaço de spin, atribuindo um papel privilegiado à componente z . Dessa forma, a simetria do modelo é restaurada quando computamos quantidades rotacionalmente invariantes. No que segue, descrevemos os passos principais que levam ao cálculo da função de correlação dinâmica. Uma descrição detalhada do procedimento pode ser encontrada nas Refs.

[59, 60, 61, 62].

A transformada de Fourier da função relaxação é dada por

$$R(q, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \frac{(\mathcal{R}_q(t), \mathcal{R}_q(0))}{(\mathcal{R}_q, \mathcal{R}_q)}. \quad (3.1)$$

Na expressão acima, (A, B) é o produto interno de Kubo de dois operadores A e B definido por [71],

$$(A, B) = \frac{1}{\beta_0} \int_0^{\beta_0} \langle e^{\lambda H} A^\dagger e^{-\lambda H} B \rangle d\lambda, \quad (3.2)$$

onde $\langle \dots \rangle$ designa a média sobre o ensemble canônico com temperatura $T = 1/k_B\beta_0$.

Se A denota uma variável dinâmica hermitiana, como, por exemplo, cada componente de spin S_q^α ($\alpha = x, y, z$) de ambas subredes para o nosso sistema anti-ferromagnético, então, a evolução no tempo de A é formalmente dada por

$$A(t) = e^{iHt} A e^{-iHt}, \quad (3.3)$$

que leva à equação de movimento

$$\frac{dA(t)}{dt} = \dot{A}(t) = iLA(t) = -i[A(t), H], \quad (3.4)$$

onde H é a hamiltoniana do sistema e $L = -id/dt$ é o operador de Liouville.

A função de correlação dinâmica é escrita como

$$\mathfrak{R}_q(t) = (\mathcal{R}_q(t), \mathcal{R}_q(0)), \quad (3.5)$$

e sua transformada de Laplace é dada por

$$\mathfrak{R}_q(\mathfrak{z}) = -i \int_0^{\infty} dt e^{i\mathfrak{z}t} \mathcal{R}_q(t); \quad \mathfrak{z} = \omega + i\epsilon. \quad (3.6)$$

Usando a técnica do operador de projeção desenvolvida por Mori [71, 72], escrevemos a transformada de Laplace da função correlação dinâmica (3.6) na forma de uma fração continuada

$$\mathfrak{R}_q(\mathfrak{z}) = \mathfrak{R}_q(0) \left\{ \mathfrak{z} - \frac{\langle \omega_q^2 \rangle}{[\mathfrak{z} + \Sigma_q(\mathfrak{z})]} \right\}^{-1}, \quad (3.7)$$

onde

$$\langle \omega_q^2 \rangle = \frac{(L\mathcal{R}_q, L\mathcal{R}_q)}{(\mathcal{R}_q, \mathcal{R}_q)} = \frac{(\dot{\mathcal{R}}_q, \dot{\mathcal{R}}_q)}{(\mathcal{R}_q, \mathcal{R}_q)}, \quad (3.8)$$

é o segundo momento de frequência e $\Sigma_q(t)$, a função memória de segunda ordem no espaço tempo, dada por

$$\Sigma_q(t) = -\frac{\mathcal{M}_q(t)}{(\dot{\mathcal{R}}_q, \dot{\mathcal{R}}_q)}, \quad (3.9)$$

sendo

$$\mathcal{M}_q(t) = (QL^2\mathcal{R}_q, e^{-iQLQt}QL^2\mathcal{R}_q).$$

Na expressão acima, $Q=1-P$ e P é um operador de projeção que projeta no subespaço ortogonal a \mathcal{R}_q e $\dot{\mathcal{R}}_q$. Reiter [59, 60] mostrou que, em primeira ordem em temperatura, o operador de projeção Q que aparece no expoente da exponencial na equação anterior pode ser desprezado e podemos aproximar $\mathcal{M}_q(t)$ escrevendo

$$\mathcal{M}_q(t) = (QL^2\mathcal{R}_q, e^{-iLt}QL^2\mathcal{R}_q). \quad (3.10)$$

Pode-se mostrar que

$$QL^2\mathcal{R}_q = L^2\mathcal{R}_q - \langle\omega_q^2\rangle\mathcal{R}_q = \ddot{\mathcal{R}}_q - \langle\omega_q^2\rangle\mathcal{R}_q, \quad (3.11)$$

onde usamos a equação de movimento (3.4). O fator de estrutura dinâmico $R(q, \omega)$ é a parte imaginária de $\mathfrak{R}_q(\mathfrak{z})$ e é dado pela expressão

$$R(q, \omega) = \mathfrak{R}_q(t=0) \frac{\langle\omega_q^2\rangle\Sigma_q''(\omega)}{[\omega^2 - \langle\omega_q^2\rangle + \omega\Sigma_q'(\omega)]^2 + [\omega\Sigma_q''(\omega)]^2}, \quad (3.12)$$

onde $\Sigma_q'(\omega)$ e $\Sigma_q''(\omega)$ são, respectivamente, as partes real e imaginária de $\Sigma_q(\mathfrak{z})$.

De agora em diante, precisamos das expressões que definem S_q^α , \dot{S}_q^α , \ddot{S}_q^α e T_q^α , \dot{T}_q^α , \ddot{T}_q^α para as duas subredes para determinar cada componente do operador magnetização “staggered”, \mathcal{R}_q^α , e de suas derivadas de primeira, $\dot{\mathcal{R}}_q^\alpha$, e segunda, $\ddot{\mathcal{R}}_q^\alpha$, ordem em relação ao tempo.

As transformadas de Fourier dos operadores de spin são dadas por

$$S_q^\alpha = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{iq(2l+\frac{1}{2})} S_{2l+1}^\alpha, \quad T_q^\alpha = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{iq(2l-\frac{1}{2})} T_{2l}^\alpha. \quad (3.13)$$

Em nosso trabalho, estaremos interessados nos termos que contribuem para a função de correlação dinâmica com até quatro operadores. Assim, mantemos apenas os termos de primeira ordem para os operadores de bosons na transformação Dyson-Maleev para os operadores T_{2l}^+ e S_{2l+1}^+ . Desta forma, as transformadas de Fourier das componentes x e y dos spins são dadas por

$$T_q^x = \sqrt{\frac{S}{2}} [a_q + a_{-q}^\dagger], \quad T_q^y = -i\sqrt{\frac{S}{2}} [a_q - a_{-q}^\dagger], \quad (3.14)$$

$$S_q^x = \sqrt{\frac{S}{2}}[b_q^\dagger + b_{-q}], \quad S_q^y = -i\sqrt{\frac{S}{2}}[b_q^\dagger - b_{-q}], \quad (3.15)$$

e a transformada da componente z dos spins é

$$T_q^z = S\delta_{q,0}\sqrt{N} - \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k a_k^\dagger a_{q+k}, \quad S_q^z = -S\delta_{q,0}\sqrt{N} + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k b_k^\dagger b_{k-q}. \quad (3.16)$$

A expressão para a hamiltoniana (2.1) no espaço dos vetores de onda é

$$H = \sum_k \{2J_1 \cos(k)\vec{T}_k \cdot \vec{S}_{-k} + J_2 \cos(2k)[\vec{T}_k \cdot \vec{T}_{-k} + \vec{S}_k \cdot \vec{S}_{-k}]\}, \quad (3.17)$$

onde usamos a transformada de Fourier (3.13).

A primeira e a segunda derivada no tempo são obtidas diretamente da definição do operador de Liouville e da equação (3.17). As expressões que obtemos para a derivada no tempo são as seguintes:

$$\dot{S}_q^x = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k \{2J_1 \cos(k)(T_k^y S_{q-k}^z - T_k^z S_{q-k}^y) + 2J_2 \cos(2k)(S_k^y S_{q-k}^z - S_{q-k}^y S_k^z)\}, \quad (3.18)$$

$$\dot{T}_q^x = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k \{2J_1 \cos(k)(T_{q-k}^z S_k^y - T_{q-k}^y S_k^z) + 2J_2 \cos(2k)(T_k^y T_{q-k}^z - T_{q-k}^y T_k^z)\}, \quad (3.19)$$

$$\dot{S}_q^y = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k \{2J_1 \cos(k)(T_k^z S_{q-k}^x - T_k^x S_{q-k}^z) + 2J_2 \cos(2k)(S_k^z S_{q-k}^x - S_{q-k}^z S_k^x)\}, \quad (3.20)$$

$$\dot{T}_q^y = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k \{2J_1 \cos(k)(T_{q-k}^x S_k^z - T_{q-k}^z S_k^x) + 2J_2 \cos(2k)(T_k^z T_{q-k}^x - T_{q-k}^z T_k^x)\}, \quad (3.21)$$

$$\dot{S}_q^z = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k \{2J_1 \cos(k)(T_k^x S_{q-k}^y - T_k^y S_{q-k}^x) + 2J_2 \cos(2k)(S_k^x S_{q-k}^y - S_{q-k}^x S_k^y)\}, \quad (3.22)$$

$$\dot{T}_q^z = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k \{2J_1 \cos(k)(T_{q-k}^y S_k^x - T_{q-k}^x S_k^y) + 2J_2 \cos(2k)(T_k^x T_{q-k}^y - T_{q-k}^x T_k^y)\}. \quad (3.23)$$

Nas expressões para a primeira derivada temporal das componentes x e y , substituímos as componentes z dos spins pelos termos de primeira ordem que aparecem

na equação (3.16); os outros termos contribuirão com seis operadores para o produto interno $(\dot{\mathcal{R}}_q, \dot{\mathcal{R}}_q)$. Procedendo desse modo, ficamos com as seguintes expressões:

$$\dot{S}_q^x = -2J_1 S[\cos(q)T_q^y + S_q^y] + 2J_2 S[S_q^y - \cos(2q)S_q^y] \quad (3.24)$$

$$\dot{T}_q^x = 2J_1 S[\cos(q)S_q^y + T_q^y] + 2J_2 S[\cos(2q)T_q^y - T_q^y] \quad (3.25)$$

$$\dot{S}_q^y = 2J_1 S[\cos(q)T_q^x + S_q^x] + 2J_2 S[\cos(2q)S_q^x - S_q^x] \quad (3.26)$$

$$\dot{T}_q^y = -2J_1 S[\cos(q)S_q^x + T_q^x] + 2J_2 S[T_q^x - \cos(2q)T_q^x]. \quad (3.27)$$

As derivadas segundas das componentes em x e y são dadas por

$$\ddot{S}_q^x = g(q)S_q^x, \quad (3.28)$$

$$\ddot{T}_q^x = g(q)T_q^x, \quad (3.29)$$

$$\ddot{S}_q^y = g(q)S_q^y, \quad (3.30)$$

e

$$\ddot{T}_q^y = g(q)T_q^y, \quad (3.31)$$

sendo $g(q) = -4J_1^2 S^2 \sin^2(q)[1 - 4j(1 - j \sin^2(q))]$. Para \ddot{S}_q^z e \ddot{T}_q^z , temos

$$\begin{aligned} \ddot{S}_q^z &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k [C_1(q, k)(T_k^x S_{q-k}^x + T_k^y S_{q-k}^y) + C_2(q, k)(S_k^x S_{q-k}^x + S_k^y S_{q-k}^y) \\ &\quad + C_3(q, k)(T_k^x T_{q-k}^x + T_k^y T_{q-k}^y)], \end{aligned} \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned} \ddot{T}_q^z &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k [C_1(q, k)(T_{q-k}^x S_k^x + T_{q-k}^y S_k^y) + C_2(q, k)(T_k^x T_{q-k}^x + T_k^y T_{q-k}^y) \\ &\quad + C_3(q, k)(S_{q-k}^x S_k^x + S_{q-k}^y S_k^y)], \end{aligned} \quad (3.33)$$

onde

$$C_1(q, k) = 8J_1^2 S \cos k [1 - 2j \sin^2(q - k)],$$

$$C_2(q, k) = 4J_1^2 S [\cos^2(k) + 2j^2 \cos(2k) [\sin^2(k) - \sin^2(q - k)]],$$

$$C_3(q, k) = 4J_1^2 S \cos k \cos(q - k).$$

Agora, aplicamos a transformação de Bogoliubov (2.8) para os operadores de bosons $a_q(a_q^\dagger)$, $b_q(b_q^\dagger)$ nas expressões (3.14)-(3.16), obtendo,

$$T_q^x = \sqrt{\frac{S}{2}} \left[u_q (\alpha_q + \alpha_{-q}^\dagger) - v_q (\beta_{-q} + \beta_q^\dagger) \right], \quad (3.34)$$

$$T_q^y = -i\sqrt{\frac{S}{2}} \left[u_q (\alpha_q - \alpha_{-q}^\dagger) - v_q (\beta_q^\dagger - \beta_{-q}) \right], \quad (3.35)$$

$$S_q^x = \sqrt{\frac{S}{2}} \left[u_q (\beta_{-q} + \beta_q^\dagger) - v_q (\alpha_q + \alpha_{-q}^\dagger) \right], \quad (3.36)$$

$$S_q^y = -i\sqrt{\frac{S}{2}} \left[u_q (\beta_q^\dagger - \beta_{-q}) - v_q (\alpha_q - \alpha_{-q}^\dagger) \right], \quad (3.37)$$

$$T_q^z = S\delta_{q,0}\sqrt{N} - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \left[u_k u_{q+k} \alpha_k^\dagger \alpha_{q+k} - u_k v_{q+k} \alpha_k^\dagger \beta_{q+k}^\dagger - u_{q+k} v_k \alpha_{q+k} \beta_k + v_k v_{q+k} \beta_k \beta_{q+k}^\dagger \right], \quad (3.38)$$

$$S_q^z = -S\delta_{q,0}\sqrt{N} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \left[u_k u_{k-q} \beta_k^\dagger \beta_{k-q} - u_k v_{k-q} \beta_k^\dagger \alpha_{k-q}^\dagger - v_k u_{k-q} \alpha_k \beta_{k-q} + v_k v_{k-q} \alpha_k \alpha_{k-q}^\dagger \right], \quad (3.39)$$

onde $u_k = \cosh \theta_k$ e $v_k = \sinh \theta_k$.

No passo seguinte, escrevemos as expressões para cada componente da magnetização “*staggered*”, $\mathcal{R}_q = S_q - T_q$, bem como para suas derivadas com relação ao tempo, $\dot{\mathcal{R}}_q = \dot{S}_q - \dot{T}_q$ e $\ddot{\mathcal{R}}_q = \ddot{S}_q - \ddot{T}_q$. Fazendo uso das equações (3.34)-(3.39), obtemos:

$$\mathcal{R}_q^x = \sqrt{\frac{S}{2}} (u_q + v_q) \left[\beta_{-q} + \beta_q^\dagger - \alpha_q - \alpha_{-q}^\dagger \right], \quad (3.40)$$

$$\mathcal{R}_q^y = i\sqrt{\frac{S}{2}} (u_q + v_q) \left[\alpha_q + \beta_{-q} - \alpha_{-q}^\dagger - \beta_q^\dagger \right], \quad (3.41)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_q^z = & -2S\delta_{q,0}\sqrt{N} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \{ u_k u_{q+k} (\alpha_k^\dagger \alpha_{q+k} + \beta_{q+k}^\dagger \beta_k) \\ & + v_k v_{k-q} (\alpha_k \alpha_{k-q}^\dagger + \beta_{k-q} \beta_k^\dagger) - u_{k-q} v_k (\alpha_k \beta_{k-q} + \alpha_{k-q}^\dagger \beta_k^\dagger) \\ & - u_{q+k} v_k (\alpha_{q+k} \beta_k + \alpha_k^\dagger \beta_{q+k}^\dagger) \}, \end{aligned} \quad (3.42)$$

para as três componentes do operador \mathcal{R}_q . Para as componentes de $\dot{\mathcal{R}}_q$, temos

$$\dot{\mathcal{R}}_q^x = -2J_1 S [(1 + \cos(q)) - j(1 - \cos(2q))] [S_q^y + T_q^y], \quad (3.43)$$

$$\dot{\mathcal{R}}_q^y = 2J_1 S [(1 + \cos(q)) - j(1 - \cos(2q))] [S_q^x + T_q^x], \quad (3.44)$$

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{R}}_q^z = & \frac{-i2S}{\sqrt{N}} \sum_k \{A_1(q, k)[\alpha_{k-q}^\dagger \beta_k^\dagger - \alpha_k \beta_{k-q}] + A_2(q, k)[\alpha_k^\dagger \beta_{q+k}^\dagger - \alpha_{q+k} \beta_k] \\ & + B_1(q, k)[\alpha_k \alpha_{k-q}^\dagger - \beta_{k-q} \beta_k^\dagger] + B_2(q, k)[\beta_{q+k}^\dagger \beta_k - \alpha_k^\dagger \alpha_{q+k}]\}, \end{aligned} \quad (3.45)$$

onde

$$A_1(q, k) = J_1 \cos k [u_k u_{q-k} - v_k v_{q-k}] + J_2 \cos 2k [u_k v_{q-k} - u_{q-k} v_k],$$

$$A_2(q, k) = J_1 \cos k [u_k u_{q+k} - v_k v_{q+k}] + J_2 \cos 2k [u_k v_{q+k} - u_{q+k} v_k],$$

$$B_1(q, k) = J_1 \cos k [u_k v_{q-k} - u_{q-k} v_k] + J_2 \cos 2k [u_k u_{q-k} - v_k v_{q-k}],$$

$$B_2(q, k) = J_1 \cos k [u_k v_{q+k} - u_{q+k} v_k] + J_2 \cos 2k [u_k u_{q+k} - v_k v_{q+k}].$$

Finalmente, para as três componentes do operador $\ddot{\mathcal{R}}_q$,

$$\ddot{\mathcal{R}}_q^x = -g(q) \mathcal{R}_q^x, \quad (3.46)$$

$$\ddot{\mathcal{R}}_q^y = -g(q) \mathcal{R}_q^y, \quad (3.47)$$

e

$$\begin{aligned} \ddot{\mathcal{R}}_q^z = & \frac{S}{\sqrt{N}} \sum_k \{ \gamma_1(q, k) [\alpha_k \beta_{k-q} + \alpha_{k-q}^\dagger \beta_k^\dagger] + \gamma_1(q, -k) [\alpha_{q+k} \beta_k + \alpha_k^\dagger \beta_{q+k}^\dagger] \\ & + \gamma_2(q, k) [\alpha_k \alpha_{k-q}^\dagger + \beta_{k-q} \beta_k^\dagger] + \gamma_2(q, -k) [\alpha_k^\dagger \alpha_{q+k} + \beta_{q+k}^\dagger \beta_k] \}, \end{aligned} \quad (3.48)$$

sendo

$$\gamma_1(q, k) = C_1(q, k) [u_k u_{q-k} + v_k v_{q-k}] - (C_2(q, k) + C_3(q, k)) [u_k v_{q-k} + u_{q-k} v_k],$$

$$\gamma_2(q, k) = (C_2(q, k) + C_3(q, k)) [u_k u_{q-k} + v_k v_{q-k}] - C_1(q, k) [u_k v_{q-k} + u_{q-k} v_k].$$

Calculando explicitamente a expressão (3.11), para cada componente do operador $QL^2 \mathcal{R}_q$, temos

$$QL^2 \mathcal{R}_q^x = [g(q) + \langle \omega_q^2 \rangle] \sqrt{\frac{S}{2}} (u_q + v_q) [\alpha_q + \alpha_{-q}^\dagger - \beta_{-q} - \beta_q^\dagger], \quad (3.49)$$

$$QL^2 \mathcal{R}_q^y = i [g(q) + \langle \omega_q^2 \rangle] \sqrt{\frac{S}{2}} (u_q + v_q) [\alpha_{-q}^\dagger + \beta_q^\dagger - \alpha_q - \beta_{-q}], \quad (3.50)$$

$$\begin{aligned}
QL^2\mathcal{R}_q^z &= 2S\delta_{q,0}\sqrt{N}\langle\omega_q^2\rangle + \\
&+ \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k\{[\gamma_1(q,k) + \langle\omega_q^2\rangle u_{k-q}v_k][\alpha_k\beta_{k-q} + \alpha_{k-q}^\dagger\beta_k^\dagger] \\
&\quad + [\gamma_1(q,-k) + \langle\omega_q^2\rangle u_{q+k}v_k][\alpha_{q+k}\beta_k + \alpha_k^\dagger\beta_{q+k}^\dagger] \\
&\quad + [\gamma_2(q,k) - \langle\omega_q^2\rangle v_{k-q}v_k][\alpha_k\alpha_{k-q}^\dagger - \beta_{k-q}\beta_k^\dagger] \\
&\quad + [\gamma_2(q,-k) - \langle\omega_q^2\rangle u_{q+k}u_k][\alpha_k^\dagger\alpha_{q+k} + \beta_{q+k}^\dagger\beta_k]\}. \quad (3.51)
\end{aligned}$$

A evolução temporal do operador $QL^2\mathcal{R}_q$ é dada por

$$e^{-iLt}QL^2\mathcal{R}_q = e^{-iLt}\ddot{\mathcal{R}}_q - \langle\omega_q^2\rangle e^{-iLt}\mathcal{R}_q.$$

Como mostrado por Reiter [59, 60], podemos, para primeira ordem na temperatura, substituir a evolução no tempo e^{-iLt} pela evolução harmônica no tempo, isto é

$$\begin{aligned}
\alpha_q(t) &= e^{-i\omega_q t}\alpha_q(0), \\
\alpha_q^\dagger(t) &= e^{i\omega_q t}\alpha_q^\dagger(0), \quad (3.52)
\end{aligned}$$

e expressões semelhantes para $\beta_q(t)$ e $\beta_q^\dagger(t)$. Assim os valores esperados em $\mathcal{M}_q(t)$ são tomados usando a hamiltoniana de onda de spin e obtemos vários produtos de Kubo de quatro operadores bosônicos que podem ser desacoplados, segundo procedimentos usuais.

A expressão geral para o segundo momento de frequência que aparece nas equações (3.49)-(3.51) é

$$\langle\omega_q^2\rangle = \frac{(\dot{\mathcal{R}}_q^x, \dot{\mathcal{R}}_q^x) + (\dot{\mathcal{R}}_q^y, \dot{\mathcal{R}}_q^y) + (\dot{\mathcal{R}}_q^z, \dot{\mathcal{R}}_q^z)}{(\mathcal{R}_q^x, \mathcal{R}_q^x) + (\mathcal{R}_q^y, \mathcal{R}_q^y) + (\mathcal{R}_q^z, \mathcal{R}_q^z)}. \quad (3.53)$$

Para a função memória de segunda ordem no espaço tempo, temos

$$\Sigma_q(t) = -\frac{(QL^2\mathcal{R}_q^x, e^{-iLt}QL^2\mathcal{R}_q^x) + (QL^2\mathcal{R}_q^y, e^{-iLt}QL^2\mathcal{R}_q^y) + (QL^2\mathcal{R}_q^z, e^{-iLt}QL^2\mathcal{R}_q^z)}{(\dot{\mathcal{R}}_q^x, \dot{\mathcal{R}}_q^x) + (\dot{\mathcal{R}}_q^y, \dot{\mathcal{R}}_q^y) + (\dot{\mathcal{R}}_q^z, \dot{\mathcal{R}}_q^z)}. \quad (3.54)$$

Em relação às componentes x e y de $QL^2\mathcal{R}_q$, \mathcal{R}_q e $\dot{\mathcal{R}}_q$, temos os seguintes produtos internos, necessários para o cálculo de (3.53) e (3.54)

$$(QL^2\mathcal{R}_q^x, e^{-iLt}QL^2\mathcal{R}_q^x) = \frac{2S \cos(\omega_q t)}{\beta_0\omega_q} [g(q) + \langle\omega_q^2\rangle]^2 [u_q + v_q]^2 [e^{\beta_0\omega_q} - 1] \tilde{n}_q, \quad (3.55)$$

$$(\mathcal{R}_q^x, \mathcal{R}_q^x) = \frac{S}{2\beta_0\omega_q}(u_q + v_q)^2[e^{\beta_0\omega_q} - 1]\tilde{n}_q, \quad (3.56)$$

$$(\dot{\mathcal{R}}_q^x, \dot{\mathcal{R}}_q^x) = \frac{-Sf^2(q)}{2\beta_0\omega_q}(u_q - v_q)^2[e^{\beta_0\omega_q} - 1]\tilde{n}_q, \quad (3.57)$$

com $f(q) = 4S[J_1 \cos^2(\frac{q}{2}) - J_2 \sin^2(q)]$ e \tilde{n}_q é, como antes, o número de ocupação de bósons. Além disso,

$$\begin{aligned} (\mathcal{R}_q^y, \mathcal{R}_q^y) &= -(\mathcal{R}_q^x, \mathcal{R}_q^x), \\ (\dot{\mathcal{R}}_q^y, \dot{\mathcal{R}}_q^y) &= -(\dot{\mathcal{R}}_q^x, \dot{\mathcal{R}}_q^x) \end{aligned}$$

e

$$(QL^2\mathcal{R}_q^y, e^{-iLt}QL^2\mathcal{R}_q^y) = -(QL^2\mathcal{R}_q^x, e^{-iLt}QL^2\mathcal{R}_q^x).$$

Devido a estes resultados, a soma dos produtos internos que envolvem as componentes x e y no denominador e numerador das equações (3.53) e (3.54), se cancelam e, desta forma, somente sobra o produto interno envolvendo a componente z . Assim, para o modelo em questão, o cálculo das equações (3.53) e (3.54), se reduz ao cálculo de

$$\langle \omega_q^2 \rangle = \frac{(\dot{\mathcal{R}}_q^z, \dot{\mathcal{R}}_q^z)}{(\mathcal{R}_q^z, \mathcal{R}_q^z)}, \quad (3.58)$$

para o segundo momento de frequência, e,

$$\Sigma_q(t) = -\frac{(QL^2\mathcal{R}_q^z, e^{-iLt}QL^2\mathcal{R}_q^z)}{(\dot{\mathcal{R}}_q^z, \dot{\mathcal{R}}_q^z)}, \quad (3.59)$$

para a função memória de segunda ordem no espaço tempo.

Após um cálculo longo, mas simples, obtemos para (3.59),

$$\Sigma_q(t) = \frac{2}{N} \sum_k [\mathcal{A}_-(q, k) \cos(\Omega_- t) + \mathcal{A}_+(q, k) \cos(\Omega_+ t)]. \quad (3.60)$$

Na expressão acima, Ω_{\pm} é definido como

$$\Omega_{\pm} = \omega_k \pm \omega_{q-k}, \quad (3.61)$$

e \mathcal{A}_- e \mathcal{A}_+ são dados por

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_-(q, k) &= \frac{[\Gamma_1(q, k)]^2}{(\dot{\mathcal{R}}_q^z, \dot{\mathcal{R}}_q^z)} \times \frac{(e^{\beta\omega_k} - e^{\beta\omega_{q-k}})}{\beta\Omega_-} n_k n_{q-k}, \\ \mathcal{A}_+(q, k) &= \frac{[\Gamma_2(q, k)]^2}{(\dot{\mathcal{R}}_q^z, \dot{\mathcal{R}}_q^z)} \times \frac{(e^{\beta\Omega_+} - 1)}{\beta\Omega_+} n_k n_{q-k}. \end{aligned} \quad (3.62)$$

Nas definições de \mathcal{A}_\pm , usamos

$$\begin{aligned}\Gamma_1(q, k) &= D_1(q, k)[u_k v_{q-k} + u_{q-k} v_k] - D_2(q, k)[u_k u_{q-k} + v_{q-k} v_k], \\ \Gamma_2(q, k) &= D_1(q, k)[u_k u_{q-k} + v_{q-k} v_k] - D_2(q, k)[u_k v_{q-k} + u_{q-k} v_k],\end{aligned}\quad (3.63)$$

onde

$$\begin{aligned}D_1(q, k) &= 8J_1^2 S^2 \{ \cos(k)[1 - 2j \sin^2(q - k)] + \cos(q - k)[1 - 2j \sin^2(q - k)] \}, \\ D_2(q, k) &= 4J_1^2 S^2 \{ [\cos(k) + \cos(q - k)]^2 + 2j^2 [\cos(2k) \\ &\quad - \cos(2q - 2k)] \times [\sin^2(k) - \sin^2(q - k)] \} + \langle \omega_q^2 \rangle.\end{aligned}$$

A expressão para $(\dot{\mathcal{R}}_q^z, \dot{\mathcal{R}}_q^z)$ é também necessária para o cálculo do segundo momento que, de acordo com (3.58), é dado pela razão das expressões abaixo:

$$\begin{aligned}(\dot{\mathcal{R}}_q^z, \dot{\mathcal{R}}_q^z) &= \frac{8(J_1 S)^2}{N} \sum_k \left\{ F_1^2(q, k) \frac{(e^{\beta\omega_k} - e^{\beta\omega_{q-k}})}{\beta\Omega_-} \right. \\ &\quad \left. + F_2^2(q, k) \frac{(e^{\beta\Omega_+} - 1)}{\beta\Omega_+} \right\} n_k n_{q-k},\end{aligned}\quad (3.64)$$

e

$$\begin{aligned}(\mathcal{R}_q^z, \mathcal{R}_q^z) &= \frac{2}{N} \sum_k \left\{ \frac{(e^{\beta\omega_k} - e^{\beta\omega_{q-k}})}{\beta\Omega_-} [u_k u_{q-k} + v_k v_{q-k}]^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{(e^{\beta\Omega_+} - 1)}{\beta\Omega_+} [u_k v_{q-k} + u_{q-k} v_k]^2 \right\} n_k n_{q-k}.\end{aligned}\quad (3.65)$$

Em (3.64), usamos

$$\begin{aligned}F_1(q, k) &= [\cos(k) + \cos(q - k)][u_k v_{q-k} - u_{q-k} v_k] \\ &\quad + j[\cos(2k) - \cos(2q - 2k)][u_k u_{q-k} - v_k v_{q-k}], \\ F_2(q, k) &= [\cos(k) + \cos(q - k)][u_k u_{q-k} - v_k v_{q-k}] \\ &\quad + j[\cos(2k) - \cos(2q - 2k)][u_k v_{q-k} - u_{q-k} v_k].\end{aligned}$$

Após tomarmos a transformada de Laplace de (3.60), obtemos $\Sigma_q(\mathfrak{z})$, que é dado por

$$\Sigma_q(\mathfrak{z}) = \frac{1}{\pi} \int dk \left[\mathcal{A}_+(q, k) \left(\frac{1}{\mathfrak{z} + \Omega_+} + \frac{1}{\mathfrak{z} - \Omega_+} \right) + \mathcal{A}_-(q, k) \left(\frac{1}{\mathfrak{z} + \Omega_-} + \frac{1}{\mathfrak{z} - \Omega_-} \right) \right].$$

E, então, aplicando a fórmula de Cauchy

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\omega \pm \Omega + i\epsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{\omega \pm \Omega} - i\pi \delta(\omega \pm \Omega),$$

onde \mathcal{P} significa valor principal, obtemos, finalmente, $\Sigma_q(\omega) = \Sigma'_q(\omega) - i\Sigma''_q(\omega)$. As partes real e imaginária de $\Sigma_q(\omega)$ são dadas pelas seguintes expressões

$$\Sigma'_q(\omega) = \frac{1}{2\pi^2} \mathcal{P} \int \left\{ \frac{\mathcal{A}_-(q, k)}{\omega + \Omega_-} + \frac{\mathcal{A}_-(q, k)}{\omega - \Omega_-} + \frac{\mathcal{A}_+(q, k)}{\omega + \Omega_+} + \frac{\mathcal{A}_+(q, k)}{\omega - \Omega_+} \right\}, \quad (3.66)$$

e

$$\begin{aligned} \Sigma''_q(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int dk \left\{ \mathcal{A}_-(q, k) [\delta(\omega + \Omega_-) + \delta(\omega - \Omega_-)] \right. \\ \left. + \mathcal{A}_+(q, k) [\delta(\omega + \Omega_+) + \delta(\omega - \Omega_+)] \right\}. \end{aligned} \quad (3.67)$$

Se a função delta tem como argumento uma função $f(x)$ da variável independente x , ela pode ser transformada de acordo com a regra,

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{1}{\left| \frac{df(x_i)}{dx} \right|} \delta(x - x_i),$$

onde $f(x)$ assume apenas zeros simples, localizados em $x = x_i$. Aplicando esta regra, a parte imaginária da função memória (3.67) adquire a seguinte forma,

$$\begin{aligned} \Sigma''_q(\omega) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k_i} \left\{ \frac{\mathcal{A}_-(q, k)}{|d\Omega_-/dk|_{k_1}} [\delta(\omega + \Omega_-) + \delta(\omega - \Omega_-)] \right. \\ \left. + \frac{\mathcal{A}_+(q, k)}{|d\Omega_+/dk|_{k_2}} [\delta(\omega + \Omega_+) + \delta(\omega - \Omega_+)] \right\}, \end{aligned} \quad (3.68)$$

onde k_i , com $i = 1, 2$, corresponde às raízes de $\omega = |\Omega_-(q, k_1)|$ e $\omega = |\Omega_+(q, k_2)|$. O somatório é realizado sobre metade da primeira zona de Brillouin.

3.2.1 Discussão dos resultados numéricos

O método empregado aqui é válido apenas para o regime de temperatura baixa, isto é, $T \ll J$, mas, como discutido por Reiter [59, 60], ele é exato em primeira ordem na temperatura. Em relação ao vetor de onda, a região de validade do método

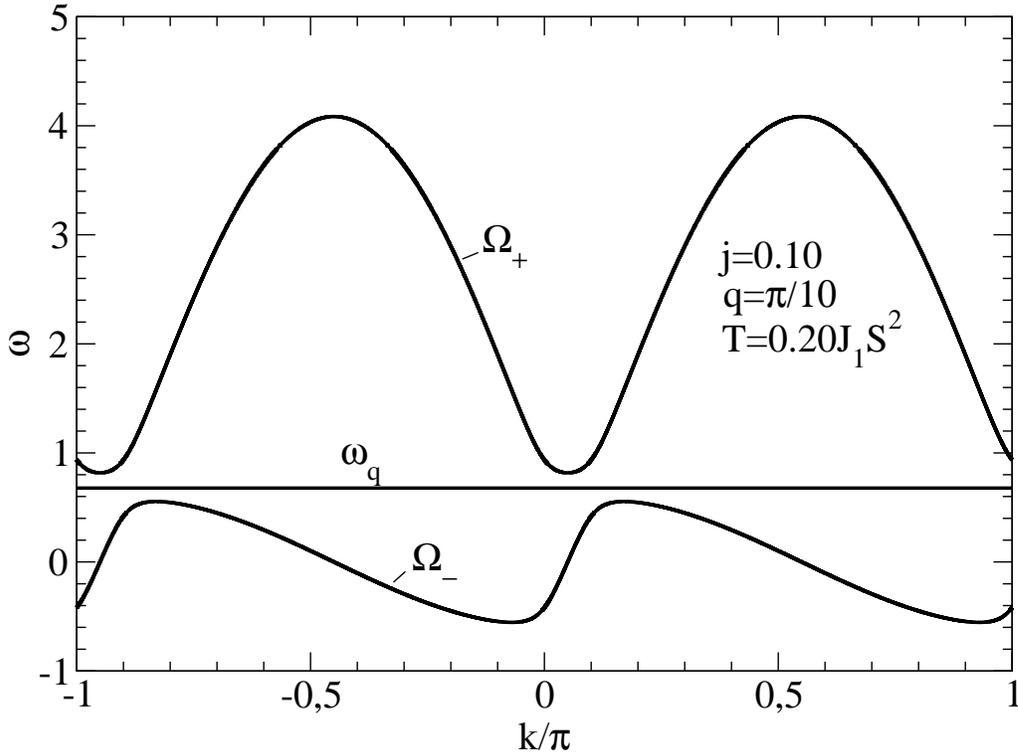


Figura 3.1: Ω_- e Ω_+ em função de k/π para $j = 0.10$, $q = \pi/10$ e $T = 0.20J_1S^2$. A linha horizontal corresponde à energia de onda de spin ω_q .

depende da precisão das expressões que são usadas para calcular as quantidades estáticas exigidas pelo formalismo. Se tivéssemos expressões exatas para as correlações estáticas $\langle S_0 S_n \rangle$ e para o segundo momento, a técnica poderia ser usada para todos os valores do vetor de onda. Porém, como as correlações e o segundo momento são calculados no contexto da teoria MSW, ficamos limitados ao mesmo domínio de validade desta teoria, isto é, $q > \xi^{-1}$, onde ξ é o comprimento de correlação. Nos próximos parágrafos, discutimos nossos resultados numéricos para a função de correlação dinâmica calculados das expressões anteriores. Esses resultados estão publicados em [63].

Muitos detalhes da função de correlação dinâmica podem ser entendidos ao analisarmos as funções Ω_+ e Ω_- , devido à relação entre essas duas funções e as partes real e imaginária da função memória, dadas pela equações (3.66) e (3.68). As

funções Ω_+ e Ω_- para $j = 0.10$, $q = \pi/10$ e $T = 0.20J_1S^2$ em função do vetor de onda k são mostradas na Figura 3.1. A linha horizontal desta figura representa a energia de onda de spin, ω_q , para os parâmetros escolhidos.

Um exame da equação (3.68) nos leva a esperar divergências nos máximos e mínimos de Ω_{\pm} , ou seja, para os vetores de onda onde a densidade de estados de dois mágnons

$$n_{\pm} = \left| \frac{dk}{d\Omega_{\pm}(q, k)} \right| \quad (3.69)$$

diverge. Observando a Figura 3.1 esperamos que Σ'' tenha divergência em três valores de frequência: no valor $\omega = \Omega_1$, que corresponde ao valor absoluto dos pontos de máximo e de mínimo de Ω_- , e nos valores $\omega = \Omega_2$ e $\omega = \Omega_3$ que correspondem aos pontos de mínimo e de máximo de Ω_+ . Nesta figura, o comportamento de Ω_{\pm} em função de k/π para $T = 0.20J_1S^2$ pode ser comparado com aquele obtido para o caso não frustrado [19]: a principal diferença é que, para o caso frustrado ($j = 0.1$), o intervalo de frequência, $\Delta\omega = \Omega_2 - \Omega_1$, é maior ($0.26J_1S^2$) do que o encontrado no caso não frustrado ($0.20J_1S^2$) [19]. Como discutiremos abaixo, esta diferença está intimamente relacionada ao *gap* de energia em $q = 0$ que, como mostrado no Capítulo 2, aumenta com j .

As curvas para Ω_+ e Ω_- nunca se cruzam e, portanto, devido às funções delta de Dirac em (3.68), o amortecimento receberá contribuições de Ω_- para $\omega \leq |\Omega_1|$, ou de Ω_+ na região de frequência $\Omega_1 \leq \omega \leq \Omega_2$. As contribuições de Ω_- correspondem à absorção e reemissão de um magnon - chamado processo de diferença - enquanto as contribuições de Ω_+ correspondem à criação de dois magnons - processo de soma. Concluimos, assim, que, para $\Omega_1 < \omega < \Omega_2$, nenhum desses dois processos contribui para o amortecimento, isto é, $\Sigma''(q, \omega) = 0$ nesta faixa de frequência, e, conseqüentemente, $R(q, \omega) = 0$ nesta região. A energia de onda de spin ω_q está aproximadamente centrada aí. Este fato é uma conseqüência da existência de um *gap* na relação de dispersão da onda de spin ($\Delta\omega \propto \omega_{q=0}$) e estará sempre presente dentro de uma teoria que inclua apenas processos de dois magnons.

As partes real e imaginária da função memória para $j = 0.10$, $q = \pi/10$, e $T = 0.20J_1S^2$ são mostradas na Figura 3.2. $R(q, \omega)$, para os mesmos parâmetros, e também para $T = 0.04J_1S^2$, é mostrada na Figura 3.3. Na Figura 3.2, vemos que a divergência de Σ'' em Ω_3 (a frequência mais alta) não é tão visível quanto

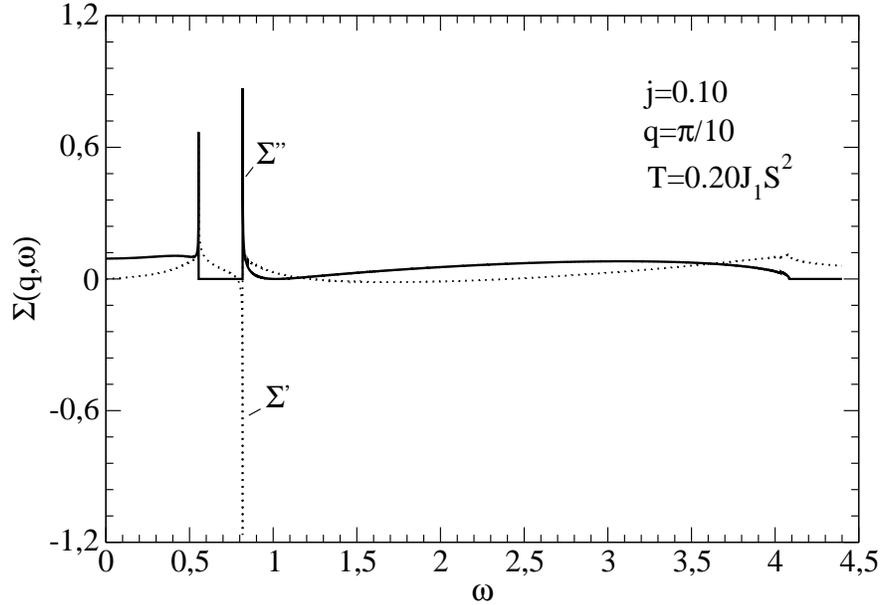


Figura 3.2: Σ''_q (linha contínua) e Σ'_q (linha pontilhada) em função de ω para $j = 0.10$, $q = \pi/10$ e $T = 0.20J_1S^2$.

é em Ω_1 e Ω_2 . Obviamente, em um cálculo numérico, as divergências de (3.68), somente serão encontradas se apontamos exatamente para o valor preciso do vetor de onda que satisfaz $d\Omega_{\pm}/dk = 0$. Por isso, não encontraremos um resultado realmente divergente para Σ'' . Os valores obtidos dependem dos valores (pequenos) das derivadas ($d\Omega_{\pm}/dk$) na vizinhança do ponto crítico e, também, do numerador, \mathcal{A}_{\pm} , dado pelas equações (3.62). As funções \mathcal{A}_{\pm} dependem dos números de ocupação que são pequenos em temperaturas altas ($T = 0.2J_1S^2$) e frequências altas: por esta razão, em Σ'' (Figura 3.2), o efeito da divergência em Ω_3 não é tão pronunciado como em Ω_1 e Ω_2 .

Para vetores de onda maiores como, por exemplo, $q = \pi/4$, achamos que Ω_+ tem um valor de máximo absoluto (Ω_3) e um valor de máximo local para um valor de frequência próximo de Ω_2 . Isto significa que esperamos um comportamento pronunciado para Σ'' em uma quarta frequência; aquela correspondendo ao máximo local de Ω_+ . O efeito desta quarta frequência é visto na Figura 3.4, onde mostramos $R(q, \omega)$ para $q = \pi/4$, $j = 0.10$ e duas temperaturas $T/J_1S^2 = 0.04$ e 0.12 : comparando com

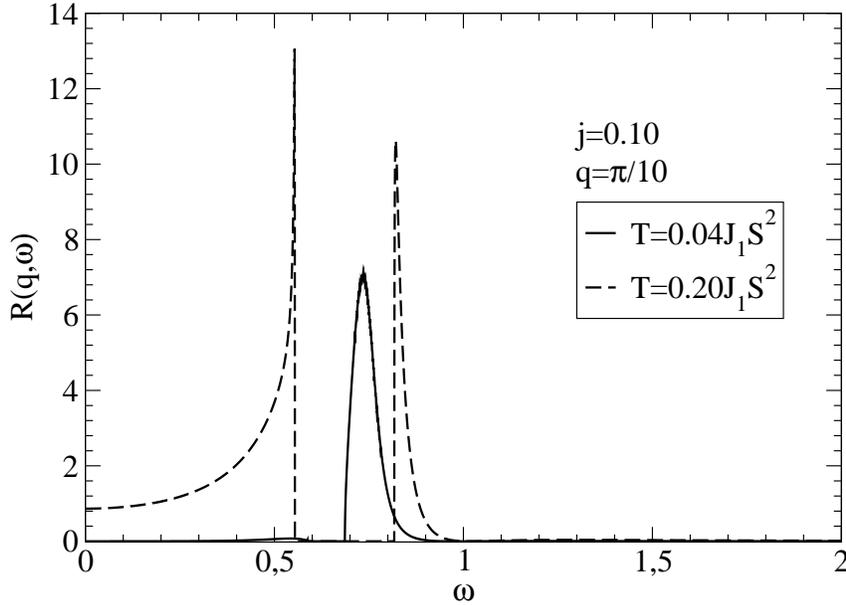


Figura 3.3: $R(q, \omega)$ em função de ω para $j = 0.10$, $q = \pi/10$ e $T = 0.04J_1S^2$ (linha contínua) e $T = 0.20J_1S^2$ (linha pontilhada).

o resultado mostrado na Figura 3.2, vemos que a contribuição devido ao processo de soma tem uma estrutura mais rica na Figura 3.4. Nos próximos parágrafos, discutiremos nossos resultados para $R(q, \omega)$ para um vetor de onda pequeno, $q = \pi/10$, e para um vetor de onda moderadamente grande, $q = \pi/4$.

Para $q = \pi/10$, $j = 0.10$ e temperatura baixa ($T/J_1S^2 = 0.04$), a função de correlação dinâmica exibe um único pico, como pode ser visto na Figura 3.3: este pico corresponde à contribuição de Ω_+ . Quando a temperatura é aumentada (Figura 3.3 para $T/J_1S^2 = 0.20$), o número de mágnons no sistema aumenta e o pico relacionado com Ω_- se destaca. A região de frequência, $\Delta\omega$, onde $R(q, \omega)$ é nulo torna-se mais ampla com o aumento da temperatura e a distância entre os dois picos fica maior: para $T/J_1S^2 = 0.20$, os dois picos estão bem definidos e separados.

Um comportamento típico para $R(q, \omega)$ na região de vetor de onda grande é esboçada na Figura 3.4, onde apresentamos a função de correlação dinâmica para $q = \pi/4$, $j = 0.10$, $T/J_1S^2 = 0.04, 0.12, e 0.20$. Note que, na região de temperatura representada, existe basicamente um pico único que é devido à contribuição de Ω_- ,

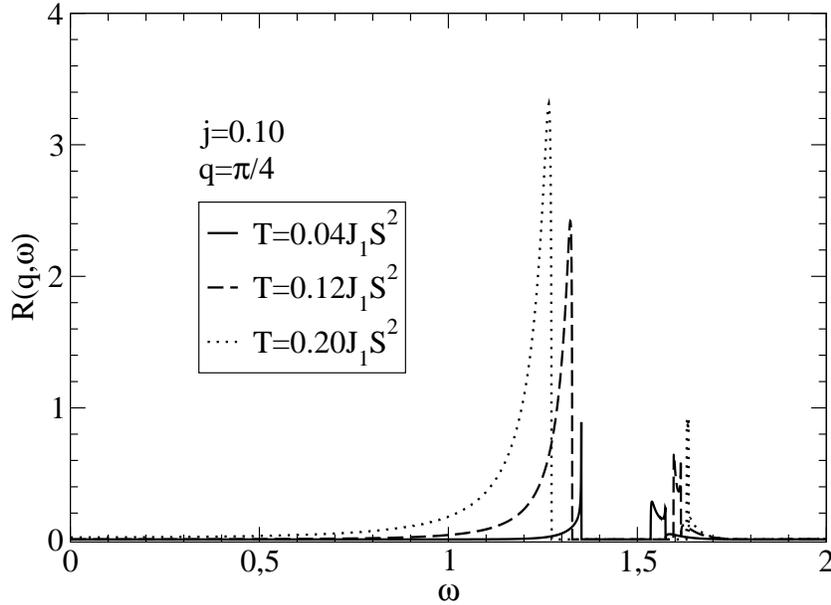


Figura 3.4: $R(q, \omega)$ em função de ω para $j = 0.10$, $q = \pi/4$, para três valores de T .

ou melhor, ao processo de absorção e reemissão de um magnon. O pico devido à contribuição de Ω_+ tem intensidade pequena e é também estreito (tornando-se mais estreito à medida que T aumenta) para ser experimentalmente observável. A explicação para este comportamento é que magnons com vetores de onda grandes exigem uma quantidade grande de energia para serem criados e, então, o processo de diferença tem possibilidade maior de ocorrer.

Discutimos, agora, o efeito de aumentarmos a frustração no sistema. O efeito do parâmetro de frustração, em $T/J_1S^2 = 0.04$ e 0.20 , para $q = \pi/10$ e $q = \pi/4$, é mostrado nas Figuras (3.5)-(3.8) para $j = 0.05, 0.10, 0.15$ e 0.20 . Uma característica comum nessas figuras é que o aumento de j faz com que o parâmetro Γ fique grande e, portanto, a energia de onda de spin, equação (2.22), para um vetor de onda específico diminui. Isto explica porque os picos relacionados às contribuições das funções Ω_+ e Ω_- se movem para frequências menores quando j aumenta. Da mesma forma, quando j aumenta, a energia do *gap* e, portanto, $\Delta\omega$ torna-se maior, aumentando a distância entre os dois picos em $R(q, \omega)$.

Para um vetor de onda menor, por exemplo, $q = \pi/10$, para todos os valores

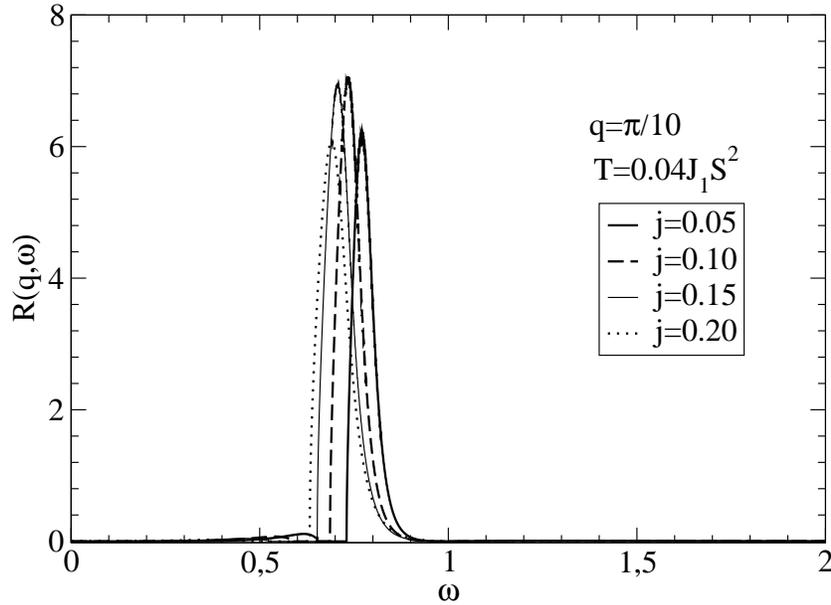


Figura 3.5: $R(q, \omega)$ em função de ω para $q = \pi/10$, $T = 0.04J_1S^2$ para vários valores de j .

de j investigados e para as temperaturas mostrados nas Figuras 3.5 e 3.6, não observamos outras mudanças significativas devido à variação de j : para $T/J_1S^2 = 0.04$, existe basicamente um único pico - relacionado com Ω_+ - cuja intensidade não varia apreciavelmente. Para temperaturas mais altas, $T/J_1S^2 = 0.20$, o pico relacionado com o processo de diferença se desenvolve e, quando j aumenta, a intensidade em frequências baixas torna-se mais alta. Porém, de modo qualitativo, podemos dizer que as áreas sobre cada um dos dois picos não sofrem variações bruscas. Concluímos, então, que para vetores de onda pequenos temos um único pico em temperaturas baixas e um pico duplo para temperatura mais alta: quando T e j aumentam a distância entre os dois picos torna-se maior.

Uma investigação da Figura 3.7, para $q = \pi/4$ e $T/J_1S^2 = 0.04$, mostra que o pico principal em $R(q, \omega)$ (o relacionado com Ω_-) é bem pequeno e diminui apreciavelmente quando j aumenta: isto sugere que, para temperaturas baixas, magnons com vetores de onda tão altos, têm uma chance pequena de serem encontrados no sistema e a contribuição devido ao processo de dois magnons para a função de cor-

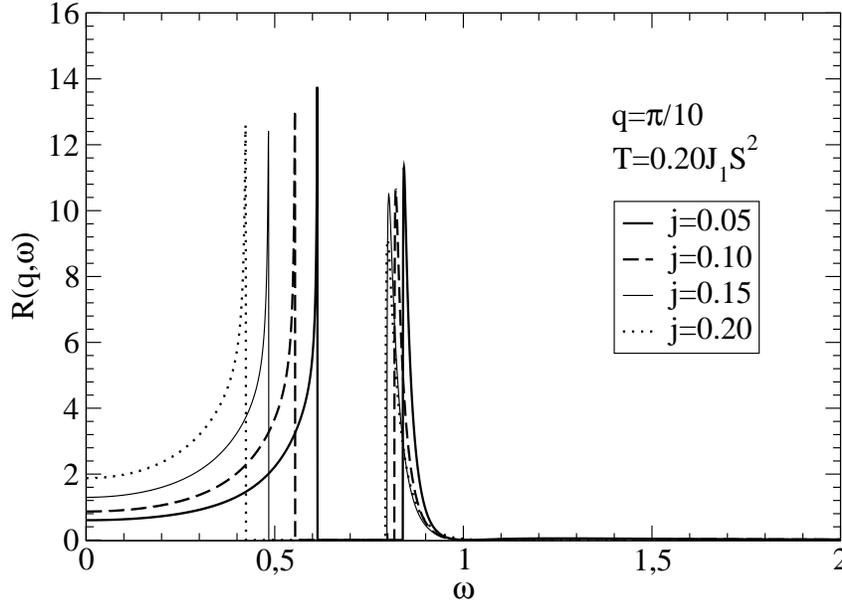


Figura 3.6: $R(q, \omega)$ em função de ω para $q = \pi/10$, $T = 0.20J_1S^2$ para vários valores de j .

relação dinâmica é muito pequena. Como é esperado, para temperatura mais alta, $T/J_1S^2 = 0.20$, até mesmo magnons mais energéticos podem ser criados e o pico em $R(q, \omega)$ para $q = \pi/4$ torna-se significativo.

3.2.2 Conclusões

Neste capítulo, foram investigadas as propriedades dinâmicas da cadeia de Heisenberg antiferromagnética de spin 1 frustrada, combinando a teoria MSW com o formalismo da função memória. A teoria MSW foi usada para obtermos quantidades estáticas como: a energia do estado fundamental, a dependência do *gap* com a temperatura e o parâmetro de frustração, a relação de dispersão de onda de spin e o comportamento da função de correlação spin-spin.

A função de correlação dinâmica foi obtida para vários valores de j , para temperaturas baixa ($T/J_1S^2 = 0.04$) e moderadamente alta (0.20): mostramos que existem dois comportamentos distintos a respeito da dependência com o vetor de onda. Para q pequeno e temperatura baixa, $R(q, \omega)$ apresenta um pico único corres-

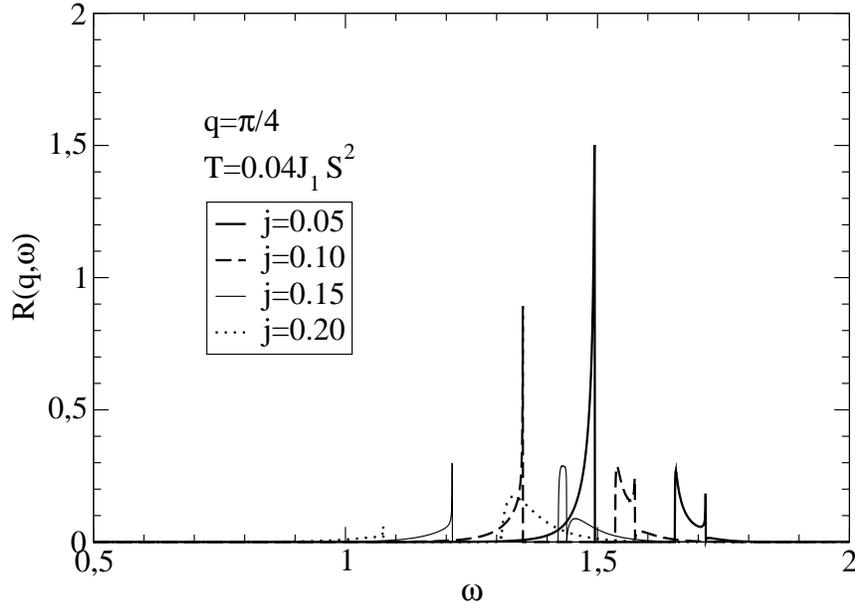


Figura 3.7: $R(q, \omega)$ em função de ω para $q = \pi/4$, $T = 0.04J_1S^2$ para vários valores de j .

pondendo ao processo de criação de dois magnons: quando a temperatura aumenta, um segundo pico, aquele relacionado às contribuições de absorção e reemissão de um magnon se desenvolve. Este segundo pico está bem separado do primeiro e é difícil supor que a inclusão de processos de ordem mais alta (como, por exemplo, espalhamento de três magnons) no cálculo de $R(q, \omega)$ preencherá a região que os separa.

Para vetores de onda maiores, a contribuição de Ω_- é sempre dominante. Porém, se a temperatura não é alta o suficiente para viabilizar a presença de magnons de energia alta, a contribuição desses para $R(q, \omega)$ pode ser desprezível. Portanto, para q grande, esperamos apenas um único pico para uma temperatura moderadamente alta.

O procedimento adotado neste trabalho para calcular a função de correlação dinâmica tem sido bem sucedido na região de temperatura baixa. Portanto, como esta é a primeira tentativa de obter o comportamento dinâmico da cadeia de Heisenberg antiferromagnética frustrada, esperamos que nossos resultados possam esti-

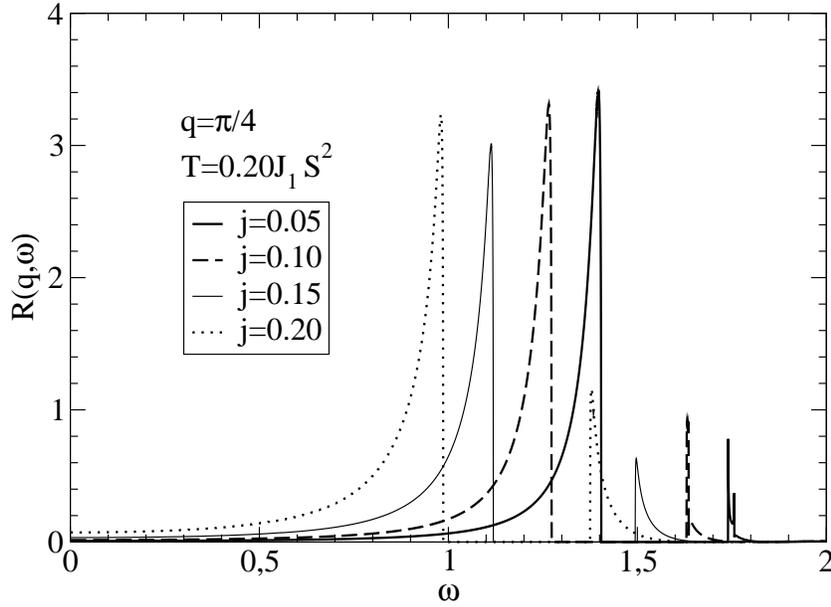


Figura 3.8: $R(q, \omega)$ em função de ω para $q = \pi/4$, $T = 0.20J_1 S^2$ para vários valores de j .

mular o desenvolvimento de investigações numéricas e experimentais a respeito da dinâmica do modelo. A região $\Delta\omega$ ao redor da energia de onda de spin, dando um resultado nulo para a correlação dinâmica nesta região, não é, como poderia ser pensado, um resultado espúrio do método: esta característica será sempre compartilhada por qualquer teoria incluindo apenas processos de dois magnons.

Capítulo 4

Conclusões finais

Apresentamos neste trabalho os resultados obtidos para o modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin-1 com interações entre primeiros e segundos vizinhos. Para este modelo, investigamos o comportamento de algumas de suas propriedades estáticas e também obtivemos o seu comportamento dinâmico através do cálculo da função de correlação dinâmica, a baixa temperatura.

Na primeira parte do trabalho, usamos a teoria de ondas de spin modificada para o cálculo de algumas propriedades estáticas do modelo. Nossos resultados mostraram que essa teoria dá boas estimativas para a energia do estado fundamental. Com relação ao comportamento do *gap*: nossos resultados mostram, em acordo com outros trabalhos, que ele aumenta à medida que a temperatura aumenta e à medida que o parâmetro de frustração aumenta até $j \leq j_{max}$. Pela primeira vez, foram comparadas duas formas diferentes de implementarmos a teoria MSW: os procedimentos SWDM e FD. Concluímos que apesar das diferenças entre as equações a serem resolvidas dentro de cada procedimento, os resultados dados por ambos são equivalentes/semelhantes, exceto pelo valor previsto de j_{max} , o valor máximo de j acessível em cada tratamento.

Na segunda parte do trabalho, relatamos o cálculo para a função de correlação dinâmica. Novamente, destacamos que foi realizado, pela primeira vez, um estudo sob a dinâmica do antiferromagneto 1D de Heisenberg de spin-1 com interações entre primeiros e segundos vizinhos.

Empregamos a combinação de um método de operador de projeção, dentro da aproximação originalmente desenvolvida por Reiter, e a teoria de ondas de spin modificada. Dependendo dos valores do parâmetro de frustração j , do vetor de onda

e da temperatura, uma estrutura de dois picos para a função de correlação dinâmica pode desenvolver-se. A função de correlação dinâmica foi obtida para vários valores de j , para temperaturas baixa e moderadamente alta: mostramos, através dos resultados, que existem dois comportamentos distintos a respeito da dependência com o vetor de onda. Para q pequeno e temperatura baixa, $R(q, \omega)$ apresenta um pico único correspondendo ao processo de criação de dois magnons: quando a temperatura aumenta, um segundo pico, aquele relacionado às contribuições de absorção e reemissão de um magnon se desenvolve. Apesar da presente teoria conter apenas processos de dois magnons, é difícil prever que a inclusão de processos de ordem mais alta, no cálculo de $R(q, \omega)$, preencherá a região que separa o primeiro do segundo pico. Devemos enfatizar que a distância separando esses dois picos é devida à existência de um *gap* no espectro de onda de spin. Para vetores de onda maiores, a contribuição de Ω_- é sempre dominante, e neste caso podemos esperar apenas a presença de um único pico para uma temperatura moderadamente alta.

Bibliografia

- [1] H. T. Diep. *Magnetic Systems with Competing Interactions (Frustrated Spin Systems)*. World Scientific, 1994.
- [2] F. D. M. Haldane. *Phys. Lett. A*, 93:464–468, 1983.
- [3] F. D. M. Haldane. *Phys. Rev. Lett.*, 50:1153–1156, 1983.
- [4] W. J. L. Buyers, R. M. Morra, R. L. Armstrong, M. J. Hogan, P. Gerlach, and K. Hirakawa. *Phys. Rev. Lett.*, 56:371–374, 1986.
- [5] M. Steiner, K. Kakurai, J. K. Kjems, D. Petitgrand, and R. Pynn. *J. Applied Phys.*, 61:3953–3955, 1987.
- [6] J. P. Renard, M. Verdaguer, L. P. Regnault, W. A. C. Erkelens, J. Rossat-Mignod, and W. G. Stirling. *Europhysics Letters*, 15:945–951, 1987.
- [7] K. Katsumata, H. Hori, T. Takeuchi, M. Date, A. Yamagishi, and J. P. Renard. *Phys. Rev. Lett.*, 63:86–88, 1989.
- [8] A. Zheludev, S. E. Nagler, S. M. Shapiro, L. K. Chou, D. R. Talham, and M. W. Meisel. *Phys. Rev. B*, 53:15004–15009, 1996.
- [9] T. Sakaguchi, K. Kakurai, T. Yokoo, and J. Akimitsu. *J. Phys. Soc. Jpn*, 65:3025–3031, 1996.
- [10] Steven R. White and Ian Affleck. *Phys. Rev. B*, 54:9862–9869, 1996.
- [11] M. P. Nightingale and H. W. J. Blöte. *Phys. Rev. B*, 33:659–661, 1986.
- [12] Minoru Takahashi. *Phys. Rev. Lett.*, 62:2313–2316, 1989.

-
- [13] J. B. Parkinson and J. C. Bonner. *Phys. Rev. B*, 32:4703–4724, 1985.
- [14] Tôru Sakai and Minoru Takahashi. *Phys. Rev. B*, 42:1090–1092, 1990.
- [15] Takahiro Fukui and Norio Kawakami. *Phys. Rev. B*, 55:R14709–R14712, 1997.
- [16] Takahiro Fukui and Norio Kawakami. *Phys. Rev. B*, 56:8799–8806, 1997.
- [17] Sergio M. Rezende. *Phys. Rev. B*, 42:2589–2590, 1990.
- [18] S. Yamamoto and H. Hori. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 72:769–772, 2003.
- [19] A. S. T. Pires and M. E. Gouvêa. *J. of Magn. and Magnetic Materials*, 241:315–326, 2002.
- [20] T. Tonegawa, M. Kaburagi, N. Ichikawa, and I. Harada. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 61:2890–2900, 1992.
- [21] S. Rao and D. Sen. *Nucl. Phys. B*, 424:547–566, 1994.
- [22] D. Allen and D. Sénéchal. *Phys. Rev. B*, 51:6394–6401, 1995.
- [23] S. Pati, R. Chitra, D. Sen, and H. R. Krishnamurthy. *Europhys. Lett.*, 33:707–712, 1996.
- [24] A. K. Kolezhuk and U. Schollwöck. *Phys. Rev. B*, 65:100401–100404, 2002.
- [25] V. Gadet, M. Verdaguer, V. Briois, A. Gleizes, J. P. Renard, P. Beauvillain, C. Chappert, T. Goto, K. Le Dang, and P. Veillet. *Phys. Rev. B*, 44:705–712, 1991.
- [26] R. Botet and R. Jullien. *Phys. Rev. B*, 27:613–615, 1983.
- [27] Ian Affleck. *Phys. Rev. Lett.*, 62:474–477, 1989.
- [28] Tôru Sakai and Minoru Takahashi. *Phys. Rev. B*, 42:4537–4543, 1990.
- [29] S. Yamamoto. *Phys. Rev. B*, 69:0644261–0644269, 2004.
- [30] S. Yamamoto, S. Brehmer, and H. J. Mikeska. *Phys. Rev. B*, 57:13610–13616, 1998.

- [31] S. Yamamoto and T. Fukui. *Phys. Rev. B*, 57:R14008–R14011, 1998.
- [32] A. Gleizes and M. Verdaguer. *J. Am. Chem. Soc.*, 103:7373–7374, 1981.
- [33] A. Gleizes and M. Verdaguer. *J. Am. Chem. Soc.*, 106:3727–3737, 1984.
- [34] Y. Pei, M. Verdaguer, O. Kahn, J. Sletten, and J. P. Renard. *Inorg. Chem.*, 26:138–143, 1987.
- [35] O. Kahn, Y. Pei, M. Verdaguer, J. P. Renard, and J. Sletten. *J. Am. Chem. Soc.*, 110:782–789, 1988.
- [36] P. J. Van Koningsbruggen, O. Kahn, K. Nakatani, Y. Pei, and J. P. Renard. *Inorg. Chem.*, 29:3325–3331, 1990.
- [37] M. Hajiwara, K. Minami, Y. Narumi, K. Tatani, and K. Kindo. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 67:2209–2211, 1998.
- [38] Masashi Hase, Ichiro Terasaki, and Kunimitsu Uchinokura. *Phys. Rev. Lett.*, 70:3651–3654, 1993.
- [39] G. Castilla, S. Chakravarty, and V. J. Emery. *Phys. Rev. Lett.*, 75:1823–1826, 1995.
- [40] G. Castilla, S. Chakravarty, and V. J. Emery. *Phys. Rev. Lett.*, 75:1823–1826, 1995.
- [41] C.K. Majumdar and D.K. Ghosh. *J. Math. Phys.*, 10:1388–1398, 1969.
- [42] Minoru Takahashi. *Phys. Rev. B*, 40:2494–2501, 1989.
- [43] S. Yamamoto and H. Hori. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 72:769–772, 2003.
- [44] H. Bethe. *Z. Physik*, 74:205–226, 1931.
- [45] N. D. Mermin and H. Wagner. *Phys. Rev. Lett.*, 17:1133–1136, 1966.
- [46] Minoru Takahashi. *Phys. Rev. Lett.*, 58:168–170, 1987.
- [47] J. E. Hirsch and Sanyee Tang. *Phys. Rev. B*, 40:4769–4772, 1989.

- [48] J. H. Xu and C. S. Ting. *Phys. Rev. B*, 42:6861–6864, 1990.
- [49] A. S. T. Pires and M. E. Gouvêa. *J. Mag. Magn. Mat.*, 241:315–326, 2002.
- [50] G. M. Rocha-Filho, A. S. Pires, and M. E. Gouvêa. *Eur. Phys. J. B*, 56:7–14, 2007.
- [51] S. Todo and K. Kato. *Phys. Rev. Lett.*, 87:047203–1–047203–4, 2001.
- [52] Steven R. White and David A. Huse. *Phys. Rev. B*, 48:3844–3852, 1993.
- [53] O. Golinelli, Th. Jolicoeur, and R. Lacaze. *Phys. Rev. B*, 50:3037–3044, 1994.
- [54] J. Deisz, M. Jarrell, and D. L. Cox. *Phys. Rev. B*, 48:10227–10239, 1993.
- [55] Daniel P. Arovas and Assa Auerbach. *Phys. Rev. B*, 38:316–332, 1988.
- [56] H. Shimaoka and K. Kuboki. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 62:3257–3265, 1993.
- [57] A. Kolezhuk, R. Roth, and U. Schollwöck. *Phys. Rev. Lett.*, 77:5142–5145, 1996.
- [58] A. K. Kolezhuk, R. Roth, and U. Schollwöck. *Phys. Rev. B*, 55:8928–8939, 1997.
- [59] G. Reiter and A. Sjölander. *Phys. Rev. Lett.*, 39:1047–1050, 1977.
- [60] G. Reiter and A. Sjölander. *J. Phys. C: Solid St. Phys.*, 13:3027–3055, 1980.
- [61] B. De Raedt, H. De Raedt, and J. Fizez. *Phys. Rev. B*, 23:4597–4607, 1981.
- [62] B. De Raedt, H. De Raedt, and J. Fizez. *Phys. Rev. Lett.*, 46:786–788, 1981.
- [63] G. M. Rocha-Filho, M. E. Gouvêa, and A. S. T. Pires. *J. Phys.: Condens. Matter*, 19:1–16, 2007.
- [64] M. E. Gouvêa and A. S. T. Pires. *J. Phys. C: Solid St. Phys.*, 20:2431–2443, 1987.
- [65] S. L. Menezes, A. S. T. Pires, and M. E. Gouvêa. *Phys. Rev. B*, 47:12280–12283, 1993.

-
- [66] A. F. Albuquerque, A. S. T. Pires, and M. E. Gouvêa. *Phys. Rev. B*, 72:1744231–1744239, 2005.
- [67] A. S. T. Pires and M. E. Gouvêa. *Brazilian Journal of Physics*, 34:1189–1192, 2004.
- [68] G. Reiter. *Phys. Rev. B*, 21:5356–5363, 1980.
- [69] G. Reiter. *Phys. Rev. B*, 47:8335–8335, 1993.
- [70] M. Takahashi. *Phys. Rev. B*, 47:8336–8336, 1993.
- [71] H. Mori. *Prog. Theor. Phys.*, 34:399–416, 1965.
- [72] A. S. T. Pires. *Helv. Phys. Acta*, 61:988–1006, 1988.