

**Estudo da dinâmica de alguns modelos
antiferromagnéticos unidimensionais**

Leonardo dos Santos Lima

Leonardo dos Santos Lima

**Estudo da dinâmica de alguns modelos
antiferromagnéticos unidimensionais**

TESE DE DOUTORADO

Belo Horizonte, MG, Brasil
2008

Estudo da dinâmica de alguns modelos antiferromagnéticos unidimensionais

Leonardo dos Santos Lima

Orientador: Prof. Antônio Sérgio T. Pires

Tese apresentada ao curso de doutorado em Física da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para a obtenção do grau de doutor em ciências (Física).

Belo Horizonte, MG, Brasil

2008

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Antônio Sérgio T. Pires pelas discussões.

À FAPEMIG por financiar este trabalho.

RESUMO

Apresentamos as propriedades dinâmicas em baixa temperatura do modelo de Heisenberg para o antiferromagneto quântico unidimensional de spin inteiro com interação de spin-fônon, interação de Moriya-Dzyaloshinskii e levando em conta processos de três mágnons.

Primeiramente, apresentamos as propriedades dinâmicas do antiferromagneto de Heisenberg de spin inteiro acoplado com fônons. O cálculo da função relaxação é efetuado usando uma combinação do formalismo da função memória com a teoria de onda de spin modificada. O procedimento inclui processos de dois mágnons e processos de mágnon-fônon. Mostramos que o acoplamento mágnon-fônon suaviza a estrutura de duplo pico obtida para o modelo na ausência de fônons quando o vetor de onda q move de π .

Em seguida, apresentamos um cálculo do fator de estrutura dinâmico no plano para o antiferromagneto unidimensional de spin inteiro com uma interação de Moriya-Dzyaloshinskii usando a teoria de campo médio dos bósons de Schwinger.

Então apresentamos a dinâmica do antiferromagneto unidimensional de spin inteiro levando em conta processos de três mágnons. Calculamos a função correlação no tempo usando a teoria de onda de spin modificada sendo que o procedimento aqui inclui processos de dois e três mágnons. Mostramos que a estrutura de duplo pico, que foi obtida para modelo levando em conta processos de dois mágnons, não é destruída nem suavizada quando levamos em conta também processos de três mágnons.

ABSTRACT

We present the low-temperature dynamic properties of the quantum one-dimensional Heisenberg antiferromagnet with integer Spin S with spin-phonon interaction, Dzyaloshinskii-Moriya interaction and taking into account three magnon processes.

First, we present the low-temperature dynamic properties of the quantum one-dimensional Heisenberg antiferromagnet with integer spin S coupled to phonons. The calculation of the relaxation function is performed using the combination of the memory function formalism with the modified spin-wave theory. The procedure includes up to two-magnon and magnon-phonon processes. We show that the magnon-phonon coupling smooths the double-peak structure obtained for the model in the absence of phonons, when the wavevector q moves from $q = \pi$.

After that, we present a calculation of the in-plane dynamical structure factor for the $S = 1$ one-dimensional antiferromagnet with a Dzyaloshinskii-Moriya interaction using the Schwinger boson mean-field theory.

Then, we present the dynamical properties of the Heisenberg antiferromagnet taking into account three magnon processes. We calculate the correlation function in time using the modified spin-wave theory. The procedure here includes up to two and three-magnon processes. We show that the double peak structure obtained for the model taking into account two-magnon processes is not smoothed when we take account three-magnon processes too.

Índice

1	Introdução	1
1.1	Antiferromagneto unidimensional	1
1.2	Interações no antiferromagneto unidimensional	4
1.2.1	O termo de interação de troca	4
1.2.2	Interação spin-fônon	6
1.2.3	Interação de Dzyaloshinskii-Moriya	7
1.2.4	Anisotropia de íon simples	9
2	Teoria da dinâmica	11
2.1	Resposta linear	12
2.2	Função relaxação	13
2.3	Propriedades da suscetibilidade	18
2.4	Teorema da flutuação e dissipação	19
2.5	Funções de Green	20
2.6	Relaxação do sistema depois de uma perturbação	21
2.7	Diferença entre transformada de Fourier e Laplace temporal	22
2.8	Exemplo simples	22
2.8.1	Função de Green	24
2.8.2	Resumo	25
2.9	Casos reais	25

3	Dinâmica do antiferromagneto quântico de Heisenberg unidimensional de spin inteiro acoplado com fônons	28
3.1	Introdução	28
3.2	Dinâmica	29
3.2.1	Método do operador de projeção	32
3.2.2	Teoria de onda de spin modificada	33
3.2.3	Determinação da função memória	35
3.3	Resultados numéricos	36
3.4	Conclusão	38
4	Teoria de campo médio dos bósons de Schwinger	46
5	Dinâmica de spin no antiferromagneto unidimensional $S=1$ com interação de Dzyaloshinskii-Moriya	52
5.1	Introdução	52
5.2	Formalismo	53
5.3	Dinâmica de spin	55
5.4	Conclusão	57
6	Processos de três mágnons no antiferromagneto unidimensional de spin inteiro	61
6.1	Introdução	61
6.2	Formalismo e resultados analíticos	62
6.3	Resultados numéricos	65
6.4	Conclusão	65
7	Conclusões	70

Lista de Figuras

1.1	Gap de Haldane. ω_q é a energia do mágnon.	2
1.2	(a) Representação do estado de Néel para o estado fundamental do antiferromagneto de spin 1/2, (b) Um mágnon, (c) Um sóliton ou kink.	3
2.1	Seção de choque de espalhamento inelástico de nêutrons para o antiferromagneto unidimensional $CuCl_2 \cdot 2N(C_5D_5)$, para diferentes temperaturas e valores de vetor de onda q . As linhas sólidas são os resultados obtidos pelo método de Monte Carlo quântico e entropia máxima e os círculos sólidos são os resultados experimentais.	17
2.2	Esboço do comportamento de $R(q, \omega)$ em função de ω , com $q = q_0$ fixo, indicando a posição do pico ω_p e a meia largura, Γ_q , denominada também de amortecimento.	26
3.1	Espectro de energia de mágnon para diferentes valores de α , $Energia = \sqrt{[\omega_q^2 - \omega_q \sum_q(\omega_q)]}$	39
3.2	Fator de estrutura dinâmico para $\alpha = 0$ e $q = 3\pi/4, 2\pi/3$ e $5\pi/6$	40
3.3	Fator de estrutura dinâmico para valores de vetores de onda $q = 2\pi/3, 3\pi/4, 5\pi/6$ com $\alpha = 0.1$ e $K/m = 0.2$ fixos.	41
3.4	Largura média em função do vetor de onda q com os parâmetros $\alpha = 0.1$, $T = 0.1J$ e $K/m = 0.2$ fixos.	42
3.5	Largura média em função do vetor de onda q com os parâmetros $\alpha = 0.005$, $T/J = 0.1$ e $K/m = 0.2$ fixos.	43
3.6	Largura média em função do acoplamento spin-fônon α para diferentes valores do vetor de onda q e com $T = 0.1J$, $K/m = 0.2$ fixos.	44
3.7	Variação da largura média com T para diferentes valores de q com $\alpha = 0.1$ e $K/m = 0.2$ fixos.	45

5.1	Fator de estrutura dinâmico para valores de vetor de onda $q = \pi/2, \pi/4, \pi/16$ com $T/J = 0.1$ ($J=1$) e $D = 0.8$ fixos.	58
5.2	Dependência de Γ (meia largura) com q para os parâmetros $T/J = 0.1$ ($J=1$) e $D = 0.8$ fixo.	59
5.3	Comportamento de $\omega = \Omega(q, k)$ em função de k para os valores fixos de $q = \pi/2, \pi/4, \pi/8$ e $\pi/16$	60
6.1	Fator de estrutura dinâmico para os valores dos vetores de onda $q = \pi/2, \pi/4$ e $\pi/6$ com $T/J = 0.1$ ($J = 1$).	66
6.2	Dependência de Γ (meia largura) com q para o valor do parâmetro $T/J = 0.1$ ($J = 1$) fixo.	67
6.3	Comportamento de $\Omega_+(q, k)$ para os valores de $q = \pi/2, \pi/4$ e $\pi/16$	68
6.4	Dependência de Γ (meia largura) com T/J ($J = 1$) para os valores dos vetores de onda $q = \pi/2, \pi/4, \pi/6, \pi/8$ e $\pi/16$	69

Capítulo 1

Introdução

O estudo da dinâmica de modelos magnéticos em baixa temperatura inclui métodos analíticos e métodos numéricos. Os métodos analíticos são: teoria de onda de spin modificada [1], formulação de bósons de Schwinger [2, 3, 4], expansão em fração continuada da transformada de Laplace da função relaxação [5, 6] e o método das funções de Green [7]. A teoria de onda de spin modificada de Takahashi *et al.*[1] é equivalente à teoria de bósons de Schwinger [8]. O método da fração continuada e o método das funções de Green são métodos mais sofisticados que dão uma informação mais detalhada sobre o sistema em estudo. Todos esses métodos em geral consideram apenas processos de dois mágnons onde temos processos de soma e diferença como será explicado posteriormente no capítulo 2 em diante.

Um modelo importante em magnetismo quântico é a cadeia de spin de Heisenberg. Seu estudo começa com a célebre solução exata do caso de spin $S = 1/2$ obtida por Bethe em 1931. Na década de 50, a teoria de onda de spin desenvolvida por Anderson e Kubo previu para magnetos tridimensionais, por exemplo, a existência de um estado fundamental ordenado e excitações de onda de spin sem gap acima dele, os *modos de Goldstone*. Porém cálculos revelaram que em baixa dimensão (dimensão 1D e 2D) o estado fundamental ordenado é destruído pelas ondas de spin e portanto novos conceitos são necessários. Esta representação foi moldada após o *ansatz de Bethe*, assumindo ordem de quase longo alcance quando há excitações sem gap no sistema, mesmo se o estado fundamental não suporta um verdadeiro parâmetro de ordem.

1.1 Antiferromagneto unidimensional

O estudo do modelo de Heisenberg antiferromagnético unidimensional é um problema interessante em física da matéria condensada. O caso de spin semi-inteiro foi estudado usando vários métodos: Ansatz de Bethe, representação de Jordan-Wigner, bosonização, etc. Neste caso, sabemos que o espectro magnético não tem gap. No caso do antiferromagneto unidimensional de spin inteiro podemos mapear no modelo sigma não linear $O(3)$. Neste caso, foi demonstrado por Haldane [9], [10] usando argumentos topológicos que o espectro de energia magnética tem um gap, o *gap de Haldane*, o qual é mostrado na

figura 1.1. O surgimento deste gap no espectro, num estado desordenado, é um fenômeno puramente quântico sem analogia clássica.

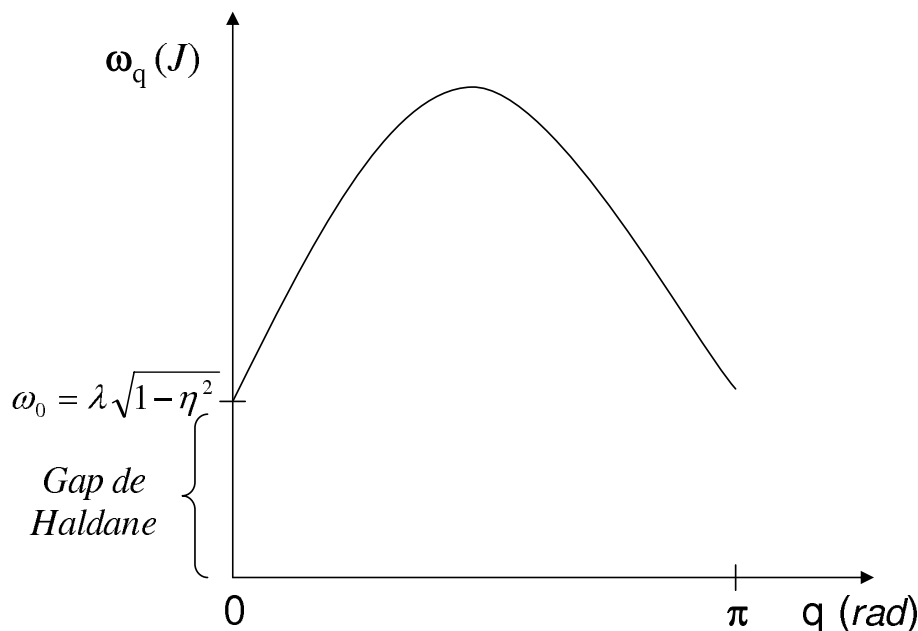


Figura 1.1: Gap de Haldane. ω_q é a energia do mágnon.

Sabemos que as excitações magnéticas acima de um estado fundamental, que pode ser ferromagnético ou antiferromagnético, são denominadas *mágns*; porém, no caso do antiferromagneto de spin 1/2 as excitações magnéticas elementares não são mágns e sim *spinons* (partículas sem carga e de spin 1/2). Podemos fazer uma representação pictográfica destas excitações considerando o estado fundamental antiferromagnético unidimensional de spin 1/2 representado na figura 1.2 (a), o qual é chamado de estado de Néel. Um mágnon é formado girando um único spin (flip) do estado de Néel como mostra a figura 1.2 (b). Neste caso dizemos que criamos um mágnon de spin $S = 1$ (diferença entre $S = +1/2$ e $S = -1/2$). Porém esta não é a excitação de energia mais baixa. A excitação de energia mais baixa ocorre quando os spins da metade da cadeia são girados de π . Neste caso temos um *sóliton* ou *domínio*, figura 1.2 (c). A energia de criação do *sóliton* é J , menor que a do mágnon e portanto ele é a excitação elementar neste caso. Os *sólitons* (*Kinks*) são também *spinons*. Um mágnon pode ser considerado também constituído por dois *spinons* cada um com spin $S = 1/2$.

A representação dada pelo estado de Néel não deve ser tomada literalmente uma vez que na realidade o estado fundamental antiferromagnético é bastante complicado. Tal

configuração de spins teria uma entropia muito pequena. Além disso, a interação entre os dipolos magnéticos é uma interação de longo alcance, ao contrário da interação de troca elétrica que é a responsável pelo antiferromagnetismo. Assim, para curtas distâncias, a interação dipolar magnética pode ser desprezada em comparação com a elétrica, mas não quando são consideradas distâncias maiores. Nesse caso, a configuração em que todos os spins são paralelos é energeticamente desfavorável do ponto de vista termodinâmico. Para minimizar a energia livre de Helmholtz, o material se divide em várias regiões chamadas de *domínios magnéticos* onde cada domínio apresenta os spins orientados numa certa direção, de modo que neles existe um momento magnético resultante. Porém na amostra como um todo os spins estão orientados aleatoriamente, o que faz com que a magnetização macroscópica seja muito pequena ou nula.

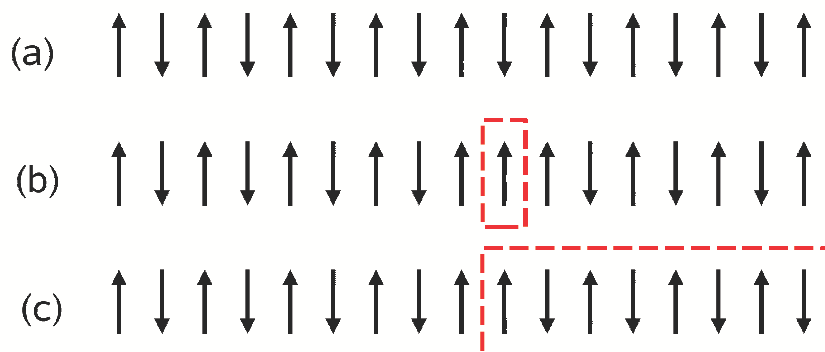


Figura 1.2: (a) Representação do estado de Néel para o estado fundamental do antiferromagneto de spin $1/2$, (b) Um mágnon, (c) Um sóliton ou kink.

Assim, desde a conjectura de Haldane [9], [10] em 1983 que o antiferromagnetismo quântico em uma dimensão se tornou um campo de estudo muito interessante. A existência do gap no espectro de excitação e de um comprimento de correlação finito no antiferromagneto de Heisenberg unidimensional de spin inteiro é bem estabelecido teoricamente, numericamente e experimentalmente e hoje a existência do gap em cadeias de spin inteiro é geralmente aceita. Argumentos não triviais porém foram necessários para mostrar a sua não existência em cadeias de spin semi-inteiro. Mais tarde, foi mostrado que o teorema de Lieb-Shultz-Mattis, o qual estabeleceu a não existência de gap em cadeias de spin $S = 1/2$, para um estado fundamental degenerado, falha para cadeias de spin inteiro.

Um grande número de trabalhos teóricos e experimentais tem sido feito para a compreensão das propriedades do antiferromagneto de baixa dimensão quando efeitos tais como acoplamento entre cadeias, anisotropias e campos externos são incluídos no modelo.

1.2 Interações no antiferromagneto unidimensional

1.2.1 O termo de interação de troca

A interação de troca, consequência do princípio de exclusão de Pauli, é a responsável pelo antiferromagnetismo. O modelo de Heisenberg dado por:

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

é capaz de simular esta interação, onde J_{ij} é a *integral de troca* ("exchange"), sendo dada por:

$$J_{ij} = \int \int \phi_{k'}^*(\vec{r}_i) \phi_{k'}^*(\vec{r}_j) \frac{e^2}{r_{ij}} \phi_k(\vec{r}_i) \phi_k(\vec{r}_j) d\vec{r}_i d\vec{r}_j. \quad (1.2)$$

$\phi_k(\vec{r}_i)$ and $\phi_k(\vec{r}_j)$ e os complexos conjugados são as autofunções de um sistema de elétrons interagentes, dado pelo Hamiltoniano:

$$H = H_0 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}} + H', \quad (1.3)$$

onde $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$, H_0 é o Hamiltoniano do sistema de elétrons livres, o segundo termo é a energia de interação entre os elétrons e H' representa a energia de interação entre os elétrons e os núcleos. Este é o Hamiltoniano resultante do sistema após ser feita

a *aproximação de Born-Oppenheimer* a qual considera o movimento dos elétrons numa configuração onde os núcleos estão em posições fixas (devido ao fato da massa dos núcleos ser muito maior do que a massa dos elétrons). As autofunções de H são denominadas de *orbitais*, sendo ortogonais entre si. Uma função de onda total para o sistema pode ser dada pelo produto:

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \phi_1(\vec{r}_1)\phi_1(\vec{r}_2) \cdots \phi_N(\vec{r}_N). \quad (1.4)$$

Tal função de onda é denominada de *produto de Hartree*. Ela porém não satisfaz a condição da antissimetria da função de onda total dada pelo princípio de exclusão de Pauli. A função que satisfaz esta condição é dada por uma *antissimetriação* do produto de Hartree sendo dada pelo *determinante de Slater*:

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\vec{r}_1) & \phi_1(\vec{r}_2) & \dots & \phi_1(\vec{r}_N) \\ \phi_2(\vec{r}_1) & \phi_2(\vec{r}_2) & \dots & \phi_2(\vec{r}_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_N(\vec{r}_1) & \phi_N(\vec{r}_2) & \dots & \phi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix}. \quad (1.5)$$

Para se obter a energia do estado fundamental de um sistema de elétrons interagentes, um procedimento é iniciar com uma função de onda tentativa, dada por um determinante de Slater, na equação de Schrödinger. Utilizando-se então do *princípio variacional*, minimiza-se a energia total com a função de onda tentativa dada pelo determinante de Slater sob a condição de vínculo que os orbitais, denominados de *spins orbitais*, sejam ortonormais, $\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}$. Quando fazemos isto a equação de Schrödinger se converte numa equação íntegro-diferencial, autoconsistente, pois depende de suas próprias autofunções, denominada de *equação de Hartree-Fock*. O estudo detalhado da teoria de Hartree-Fock não é o propósito do presente texto.

A energia total do sistema pode ser expressa como:

$$\varepsilon = \int \int \dots \int \Psi^* H \Psi d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N. \quad (1.6)$$

Devido a linearidade de H podemos escrever

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \varepsilon_{ij} + \varepsilon', \quad (1.7)$$

onde ε_i é a energia dos elétrons livres, ε_{ij} é a energia de interação elétron-elétron e ε' é a energia de interação elétron-núcleo. A energia de interação elétron-elétron é dada por:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{k'k=1}^N \varepsilon_{k'k} &= \frac{1}{2} \sum_{k'k=1}^N \int \int |\phi_{k'}(\vec{r}_i)|^2 \frac{e^2}{r_{ij}} |\phi_k(\vec{r}_j)|^2 d\vec{r}_i d\vec{r}_j \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{k'k=1}^N \int \int \phi_{k'}^*(\vec{r}_i) \phi_{k'}^*(\vec{r}_j) \frac{e^2}{r_{ij}} \phi_k(\vec{r}_i) \phi_k(\vec{r}_j) d\vec{r}_i d\vec{r}_j. \end{aligned}$$

O primeiro termo recebe o nome de *integral de Coulomb*, o qual fornece a probabilidade de encontrar o elétron na região $(\vec{r}_i, \vec{r}_i + \Delta\vec{r}_i)$. O segundo termo é a *integral de troca*, o qual é a constante J_{ij} do Hamiltoniano de spins (1.1), sendo dada por (1.2). Este último termo envolve a superposição das funções de onda e seu valor depende da distância entre os íons.

Ao longo do nosso trabalho, como forma de simplificar os cálculos, estaremos considerando o sistema de unidades onde a constante $J = J_{ij} = 1$, onde consideramos também $\hbar = 1$ e $k_B = 1$, sendo \hbar e k_B as constantes de Planck e Boltzmann respectivamente. Como consequência disso, a energia, frequência e temperatura serão dadas em unidades de J .

1.2.2 Interação spin-fônon

O acoplamento spin-fônon, principalmente em materiais com fortes correlações eletrônicas, vem recebendo considerável atenção nos últimos anos. Resultados experimentais indicam que um forte acoplamento spin-fônon gera instabilidades estruturais em baixa temperatura em compostos de Cr e Zn como no $ZnCr_2S_4$. Estas distorções estruturais resultam em frustações de ligação caracterizadas por interações de troca ferromagnéticas e antiferromagnéticas de forças quase iguais. O acoplamento spin-fônon tem um papel importante também no modelo de Heisenberg antiferromagnético unidimensional de $S = 1/2$ o qual gera uma frustação da cadeia gerando termos de interação de troca alternada, J_1 e J_2 . O Hamiltoniano do modelo fica então:

$$H = J_1 \sum_n \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} + J_2 \sum_n \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+2}. \quad (1.8)$$

Neste caso temos o chamado efeito spin-Peirels.

Para estudar o antiferromagneto unidimensional com a interação spin-fônon, iniciamos dividindo a rede em duas subredes A e B, onde na subrede A consideramos todos os spins orientados para cima e na subrede B todos os spins orientados para baixo. \mathbf{x}_l , \mathbf{y}_l e \mathbf{S}_l , \mathbf{T}_l são os operadores deslocamento em relação às posições de equilíbrio e operadores de spins das subredes A e B respectivamente. O Hamiltoniano do sistema levando em consideração

o acoplamento com fônons é dado então por:

$$H = H_S + H_{SP} + H_P, \quad (1.9)$$

onde H_S , H_{SP} e H_P são respectivamente, os Hamiltonianos de spin, spin-fônon e fônons. Sendo os dois primeiros termos, H_S e H_{SP} , obtidos da expansão da integral de troca J , dada por (1.2), em potências dos deslocamentos atômicos:

$$J(\mathbf{x}_l - \mathbf{y}_{l+1}) = J(|\mathbf{x}_l - \mathbf{y}_{l+1}|) + (\mathbf{x}_l - \mathbf{y}_{l+1}) \cdot \nabla J(|\mathbf{x}_l - \mathbf{y}_{l+1}|) + O((\mathbf{x}_l - \mathbf{y}_{l+1})^2).$$

O termo de interação spin-fônon H_{SP} é obtido do segundo termo da expansão acima e os termos de ordem superior $O((\mathbf{x}_l - \mathbf{y}_{l+1})^2)$ são desprezados. H_P descreve os modos normais de vibração do sólido e é o Hamiltoniano de fônons. Assim:

$$H_S = J \sum_{l=1}^N [\mathbf{S}_l \cdot \mathbf{T}_{l+1} + \mathbf{T}_{l-1} \cdot \mathbf{S}_l] \quad (1.10)$$

$$H_{SP} = \alpha \sum_{l=1}^N [(\mathbf{x}_l - \mathbf{y}_{l+1}) \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{T}_{l+1} + (\mathbf{y}_{l-1} - \mathbf{x}_l) \mathbf{T}_{l-1} \cdot \mathbf{S}_l] \quad (1.11)$$

$$H_P = \sum_{l=1}^N \left\{ \frac{m}{2} (\dot{\mathbf{x}}_l^2 + \dot{\mathbf{y}}_l^2) + \frac{k}{2} [(\mathbf{x}_l - \mathbf{y}_{l+1})^2 + (\mathbf{y}_{l-1} - \mathbf{x}_l)^2] \right\}, \quad (1.12)$$

J é a integral de troca dada em (1.2) e α é a constante de acoplamento spin-fônon dada por:

$$\alpha = \frac{dJ}{dr_{ij}}, \quad (1.13)$$

sendo também k a constante elástica e m a massa do íon magnético. No capítulo 2 retomaremos este modelo.

1.2.3 Interação de Dzyaloshinskii-Moriya

O fraco ferromagnetismo de alguns cristais antiferromagnéticos, representados por $\alpha - Fe_2O_3$ e os carbonatos de Mn e Co , era um problema a ser explicado até que Néel [11] propôs uma explicação para o fenômeno baseado em efeitos de impurezas. Mais tarde Li [12] propôs uma explicação diferente baseada em termos de domínios magnéticos. Porém a formação dos domínios antiferromagnéticos não é energeticamente favorável e

deve ser possível apenas quando algumas imperfeições de natureza química e estrutural estabilizam estes. Além disso, destes mecanismos de impurezas, esperava-se uma mudança nas propriedades magnéticas de amostra a amostra dependendo do tipo de impurezas presentes. Foi então que Dzyaloshinskii, usando primeiros princípios, propôs que no antiferromagneto além do termo usual deveria haver um outro termo, de interação de troca de spin antissimétrico, que favorecia o fraco ferromagnetismo, sendo que este termo é dado por:

$$\vec{D} \cdot (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2), \quad (1.14)$$

onde \vec{D} é um vetor constante sendo que no material $\alpha - Fe_2O_3$, \vec{D} é paralelo ao eixo trigonal. Sua teoria, porém, não clarificou como esta interação surgiu e nem como \vec{D} é calculado. Uma teoria geral sobre este mecanismo de interação foi desenvolvida, mais tarde, por Moriya usando a teoria de perturbação no qual ele levou em conta as correções relativísticas do acoplamento spin-órbita na interação de troca. A correção de segunda ordem para a energia do estado fundamental obtida por ele é dada por:

$$E_{1,2} = \sum_{m \neq n} \left[\frac{\langle n | \lambda \mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{S}_1 | m \rangle 2J \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2}{\epsilon_n - \epsilon_m} + \frac{2J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) \langle m | \lambda \mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{S}_1 | n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} \right] \\ + \sum_{m' \neq n'} \left[\frac{\langle n' | \lambda \mathbf{L}_2 \cdot \mathbf{S}_2 | m' \rangle 2J \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2}{\epsilon_{n'} - \epsilon_{m'}} + \frac{2J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) \langle m' | \lambda \mathbf{L}_2 \cdot \mathbf{S}_2 | n' \rangle}{\epsilon_{n'} - \epsilon_{m'}} \right],$$

onde J é a integral de troca dada em (1.2), \mathbf{L} e \mathbf{S} são respectivamente os operadores momento angular orbital e spin, $|n\rangle$ e $|n'\rangle$ são os autoestados do Hamiltoniano de spin sem acoplamento spin-órbita. Quando o estado orbital não é degenerado podemos escrever a equação acima como:

$$E_{1,2} = 2\lambda \sum_{m \neq n} \frac{J}{\epsilon_n - \epsilon_m} \langle n | \mathbf{L}_1 | m \rangle \cdot [\mathbf{S}_1, (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)] + 2\lambda \sum_{m' \neq n'} \frac{J}{\epsilon_{n'} - \epsilon_{m'}} \langle n' | \mathbf{L}_2 | m' \rangle \cdot [\mathbf{S}_2, (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)]$$

e conseqüentemente:

$$E_{1,2} = 2i\lambda \left(\sum_{m \neq n} \frac{J \langle n | \mathbf{L}_1 | m \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} - \sum_{m' \neq n'} \frac{J \langle n' | \mathbf{L}_2 | m' \rangle}{\epsilon_{n'} - \epsilon_{m'}} \right) \cdot (\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2), \quad (1.15)$$

o que é equivalente a (1.14). Os termos de ordem superior na perturbação da energia podem gerar, por exemplo, formas biquadráticas do acoplamento de spin, $(S_i \cdot S_j)^2$. Assim, independentemente da presença ou não de impurezas ou defeitos no sistema, este mecanismo de interação sempre existe como uma propriedade intrínseca do material. Um outro tipo de interação também presente e que também é responsável pelo fraco

ferromagnetismo é a energia de anisotropia de íon simples como ocorre, por exemplo, no composto NiF_2 . Este mecanismo de interação será explicado na próxima seção.

Há materiais, como $\alpha - Fe_2O_3$, em que a interação de Moriya-Dzyaloshinskii é a responsável pelo fraco ferromagnetismo e em outros materiais, como o NiF_2 , é a anisotropia de íon simples que é a responsável. Há compostos em que ambos os tipos de interações são importantes. A importância de cada tipo de interação depende da *temperatura de Néel* e da simetria cristalina. A interação de Moriya-Dzyaloshinskii é importante em cristais de baixa simetria sendo nula em cristais de alta simetria. O mesmo acontecendo com a anisotropia de íon simples. Há uma tendência de que, quando a temperatura de Néel é alta, a interação de Moriya-Dzyaloshinskii seja mais importante e quando a temperatura de Néel for baixa a anisotropia é a mais importante. Isto é uma consequência do fato que o termo de Moriya-Dzyaloshinskii ser aproximadamente proporcional à interação de troca enquanto que o termo de anisotropia independe da interação de troca.

1.2.4 Anisotropia de íon simples

O termo de anisotropia de íon simples tem a sua origem microscópica na influência do potencial elétrico da rede cristalina sobre o acoplamento spin-órbita. Relembrando, o termo de acoplamento spin-órbita é dado por:

$$\Delta E = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \quad (1.16)$$

esta equação foi deduzida por Thomas em 1926. \mathbf{L} é o momento angular orbital, \mathbf{S} é o momento angular intrínseco (spin) e $V(r)$ é a energia potencial de interação elétron-núcleo. Da teoria de perturbação temos que este termo de acoplamento spin-órbita gera um termo adicional no Hamiltoniano de spins (1.1) dado por:

$$H_a = D \sum_i^N (S_i^z)^2. \quad (1.17)$$

Se o coeficiente D for negativo, o eixo z é de fácil magnetização sendo denominado de *eixo fácil*. O termo de anisotropia induz a orientação dos spins nesta direção. Se este coeficiente for positivo, o eixo z é de difícil magnetização. Como mencionado anteriormente, a influência deste termo de anisotropia sobre a energia depende muito da simetria cristalina produzindo uma contribuição relevante apenas quando há baixa simetria cristalina.

Além de todos os termos discutidos aqui, há também a influência do campo magnético externo que gera um torque sobre os spins do sistema o qual resulta no termo de Zeeman

do Hamiltoniano:

$$H_z = g\mu_b \sum_i^N \vec{H} \cdot \vec{S}_i, \quad (1.18)$$

onde g é o fator de Landé e μ_B é o *magnéton de Bohr*, $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$. \vec{H} é o campo magnético externo.

O plano deste trabalho é o seguinte: no capítulo 2 apresentamos a teoria da dinâmica, no capítulo 3 a dinâmica do modelo de Heisenberg quântico unidimensional para o antiferromagneto de spin inteiro e acoplado com fônons. No capítulo 4, a teoria de campo médio dos bósons de Schwinger e seu emprego no estudo do modelo XY bidimensional anisotrópico é apresentada. No capítulo 5, apresentamos a dinâmica do modelo de Moriya-Dzyaloshinskii, usando a teoria de bósons de Schwinger, e por fim, no capítulo 6, usando a teoria de onda de spin modificada, apresentamos a dinâmica do modelo de Heisenberg do antiferromagneto unidimensional de spin inteiro levando em conta processos de dois e três mágnons e em seguida, no capítulo 7, as conclusões.

Capítulo 2

Teoria da dinâmica

A maioria dos experimentos em física é descrita em termos de funções correlações. Nos sistemas estatísticos que estão próximos do equilíbrio térmico elas fornecem toda a informação necessária sobre as flutuações estatísticas intrínsecas. Quando um físico investiga processos dinâmicos em um sistema de muitas partículas, ele usualmente emprega como ferramenta uma força externa que perturba ligeiramente o sistema do equilíbrio e então ele mede a resposta linear dependente do tempo a esta força. Nestes experimentos, o que ele investiga é o comportamento dinâmico de flutuações espontâneas em torno do estado de equilíbrio (que presumivelmente é conhecido). De acordo com a teoria da resposta linear essas flutuações podem ser descritas rigorosamente em termos de funções correlações dependentes do tempo: produto de pares de certas variáveis dinâmicas $A(t)$ e $B(t')$ em tempos diferentes t e t' cuja média é calculada sobre um ensemble térmico:

$$S_{AB}(t, t') = \langle A(t)B(t') \rangle_{eq}. \quad (2.1)$$

Observemos que $\langle AB \rangle$ é dado por:

$$\langle AB \rangle = Tr(\rho AB), \quad (2.2)$$

onde ρ é a matriz densidade e Z a função partição. Podemos também escrever

$$\langle AB \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | AB | n \rangle, \quad (2.3)$$

onde E_n é o autovalor do Hamiltoniano H do sistema e $|n\rangle$ é o autoestado associado ao autovalor E_n . Em muitos casos temos $B = A^\dagger$.

A transformada de Fourier da função correlação é dada por:

$$S_{AB}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \langle A(0)B(t) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \langle A(t)B(0) \rangle. \quad (2.4)$$

$S_{AA^\dagger}(\omega)$ é o espectro de flutuações espontâneas em A .

2.1 Resposta linear

Vamos calcular a resposta linear de um sistema próximo do equilíbrio térmico. Consideramos um sistema isolado descrito pelo Hamiltoniano H_0 e supomos que uma força externa $F(t)$ seja aplicada ao sistema tal que a perturbação é dada por

$$H'(t) = -AF(t), \quad (2.5)$$

onde A é um operador como por exemplo momento angular, spin, etc. e $F(t)$ um campo magnético externo. Vamos nos restringir a perturbações fracas e procurar pela resposta do sistema na aproximação linear. A resposta é observada através da mudança $\Delta B(t)$ de uma quantidade física B .

O valor médio de um operador B no tempo t é dado por:

$$\langle B(t) \rangle = Tr[\rho(t)B], \quad (2.6)$$

onde tomamos $Tr\rho(t) = 1$. Segundo a teoria da resposta Linear [13], podemos escrever $\rho(t)$ por aproximação como:

$$\rho(t) = \rho_0 + \Delta\rho(t) \quad (2.7)$$

com $\rho(t = -\infty) = \rho_0$. A equação de movimento para o operador $\rho(t)$ é dada por:

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H, \rho(t)] \quad (2.8)$$

ou

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H_0, \rho(t)] + [H', \rho(t)]. \quad (2.9)$$

O termo $\Delta\rho(t)H'$ é de ordem superior e pode ser desprezado na aproximação linear. A eq. (2.9) fica então:

$$i\Delta\dot{\rho}(t) \simeq [H_0, \Delta\rho(t)] + [H'(t), \rho_0]. \quad (2.10)$$

A eq. (2.10) pode ser escrita na forma

$$\Delta\rho(t) = -i \int_{-\infty}^t e^{-iH_0(t-t')} [H'(t'), \rho_0] e^{iH_0(t-t')} dt', \quad (2.11)$$

como pode ser verificado derivando (2.11) em relação ao tempo. A mudança induzida na variável B do seu estado de equilíbrio é

$$\Delta B(t) = Tr(\Delta\rho(t)B). \quad (2.12)$$

Temos então de (2.12), (2.11) e (2.5)

$$\Delta B(t) = iTr \int_{-\infty}^t e^{-iH_0(t-t')} [A, \rho_0] e^{iH_0(t-t')} B F(t') dt'. \quad (2.13)$$

Usando a propriedade $Tr(AB) = Tr(BA)$ obtemos:

$$\Delta B(t) = iTr \int_{-\infty}^t [A, \rho_0] B(t-t') F(t') dt', \quad (2.14)$$

onde definimos

$$B(t) = e^{iH_0 t} B e^{-iH_0 t}. \quad (2.15)$$

A eq. (2.14) pode ser escrita também como:

$$\Delta B(t) = i \int_{-\infty}^t \langle [B(t-t'), A] \rangle F(t') dt'. \quad (2.16)$$

Alguns definem função resposta linear por:

$$\Phi_{BA}(t) = i \langle [B(t), A] \rangle \quad (2.17)$$

e assim

$$\Delta B(t) = \int_{-\infty}^t \Phi_{BA}(t-t') F(t') dt'. \quad (2.18)$$

2.2 Função relaxação

Definimos suscetibilidade generalizada pela seguinte relação:

$$\chi_{BA}(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left[i \int_0^{\infty} \langle [B(t), A] \rangle e^{(-\omega t - i\epsilon t)} dt \right] = \chi'_{BA}(\omega) + i\chi''_{BA}(\omega). \quad (2.19)$$

Podemos escrever esta equação da seguinte forma (deixando o fator de convergência de lado):

$$\chi_{BA}(\omega) = iTr \int_0^\infty [A, \rho_0] B(t') e^{i\omega t'} dt'. \quad (2.20)$$

Para qualquer operador A a seguinte identidade pode ser verificada derivando-se diretamente em relação a uma variável auxiliar λ :

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda} \{e^{\lambda H_0} [A, e^{-\lambda H_0}]\} &= H_0 e^{\lambda H_0} A e^{-\lambda H_0} - e^{\lambda H_0} A e^{-\lambda H_0} H_0 \\ &= [H_0, A(-i\lambda)] = -i\dot{A}(-i\lambda), \end{aligned} \quad (2.21)$$

onde

$$A(-i\lambda) = e^{\lambda H_0} A e^{-\lambda H_0}. \quad (2.22)$$

Integrando com relação a λ até uma variável β obtemos:

$$[A, \rho_0] = -i\rho_0 \int_0^\beta \dot{A}(-i\lambda) d\lambda, \quad (2.23)$$

onde consideramos $\rho_0 = \frac{e^{-\beta H_0}}{Z}$.

De (2.20) e (2.23) obtemos:

$$\chi_{BA}(\omega) = \int_0^\infty e^{i\omega t'} K_{BA}(t') dt', \quad (2.24)$$

onde

$$K_{BA}(t) = Tr \int_0^\beta \rho_0 \dot{A}(-i\lambda) B(t) d\lambda = -Tr \int_0^\beta A(-i\lambda) \dot{B}(t) d\lambda \quad (2.25)$$

ou

$$\chi_{BA}(\omega) = -Tr \rho_0 \int_0^\beta A(-i\lambda) \left[\int_0^\infty dt' e^{i\omega t'} \frac{dB}{dt} \right] d\lambda. \quad (2.26)$$

Integrando por partes chegamos a:

$$\chi_{BA}(\omega) = Tr \rho_0 \int_0^\beta A(-i\lambda) \left[B(0) - i\omega \int_0^\infty e^{i\omega t} B(t) dt \right] d\lambda. \quad (2.27)$$

Vamos definir uma *função relaxação* $R_{AB}(t)$ por:

$$R_{AB}(t) = (A, B(t)) = \int_0^\beta \langle A(-i\lambda)B(t) \rangle d\lambda. \quad (2.28)$$

Esta função foi introduzida por Kubo em sua teoria da resposta linear [13] e tem as propriedades de um produto escalar.

Da eq. (2.27) tiramos:

$$\chi_{BA}(\omega) = (A, B) - i\omega \int_0^\infty e^{i\omega t} (A, B(t)) dt, \quad (2.29)$$

onde temos:

$$\chi_{AB}(\omega = 0) = R_{AB}(t \neq 0). \quad (2.30)$$

Definimos também o *fator de estrutura dinâmico* pela transformada de Fourier de $R_{AB}(t)$

$$R_{AB}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty dt e^{-i\omega t} R_{AB}(t) = B_{BA}(-\omega). \quad (2.31)$$

Comparando (2.23) com (2.18) encontramos:

$$\langle [A, B(t)] \rangle = -i \int_0^\beta d\lambda \langle A(-i\lambda) \dot{B}(t) \rangle \quad (2.32)$$

ou

$$(A\dot{B}) = i\langle [A, B] \rangle. \quad (2.33)$$

Em geral escrevemos (2.28) como:

$$\chi_{BA}(\omega) = \chi_{BA}(0) \left[1 - i\omega \int_0^\infty e^{i\omega t} \frac{R(t)}{\chi(0)} dt \right]. \quad (2.34)$$

Se $F(t)$ é da forma $F(t) = e^{-i\omega t} F$ (observemos que no caso mais geral podemos desenvolver $F(t)$ em uma expansão de Fourier) vemos de (2.15) que

$$\Delta B = i \int_{-\infty}^t dt' \langle [B(t-t'), A] \rangle e^{-i\omega t'} F. \quad (2.35)$$

Fazendo uma mudança de variável $t - t' = \tau$ e então $t = \tau$ obtemos:

$$\Delta B(t) = \chi(\omega)F(t) \quad (2.36)$$

o que justifica a definição de $\chi(\omega)$ como a suscetibilidade.

Em sistemas magnéticos um operador importante é a variável de spin. Se S_n^α é a componente de spin $\alpha(\alpha = x, y, z)$ no sítio n temos a transformada de Fourier

$$S_q^\alpha = \sum_n e^{iqn} S_n^\alpha. \quad (2.37)$$

Notemos que

$$(S_q^\alpha)^\dagger = \sum_n e^{-iqn} S_n^\alpha = S_{-q}^\alpha. \quad (2.38)$$

Chamando agora $R_q(t) = (S_q, S_{-q}(t))$, medidas experimentais tais como espalhamento inelástico de nêutrons estão relacionadas com $R_q(\omega)$ através da seção de choque de espalhamento. A fig.2.1 mostra um exemplo dessas medidas. No caso, é apresentado uma comparação de resultados teóricos, obtidos pelo método de Monte Carlo quântico e entropia máxima, e resultados experimentais para a seção de choque de espalhamento inelástico de nêutrons versus $(1-\omega/\varepsilon_i)^{1/2}S(q, \omega)$ (ε_i é a energia dos nêutrons incidentes). Os resultados obtidos são para o composto $CuCl_2 \cdot 2N(C_5D_5)$ [14], o qual é um antiferromagneto unidimensional. Os círculos sólidos representam os resultados experimentais de Endoh et al.[15] e as linhas sólidas são os resultados obtidos pelo método de Monte Carlo quântico e entropia máxima [14].

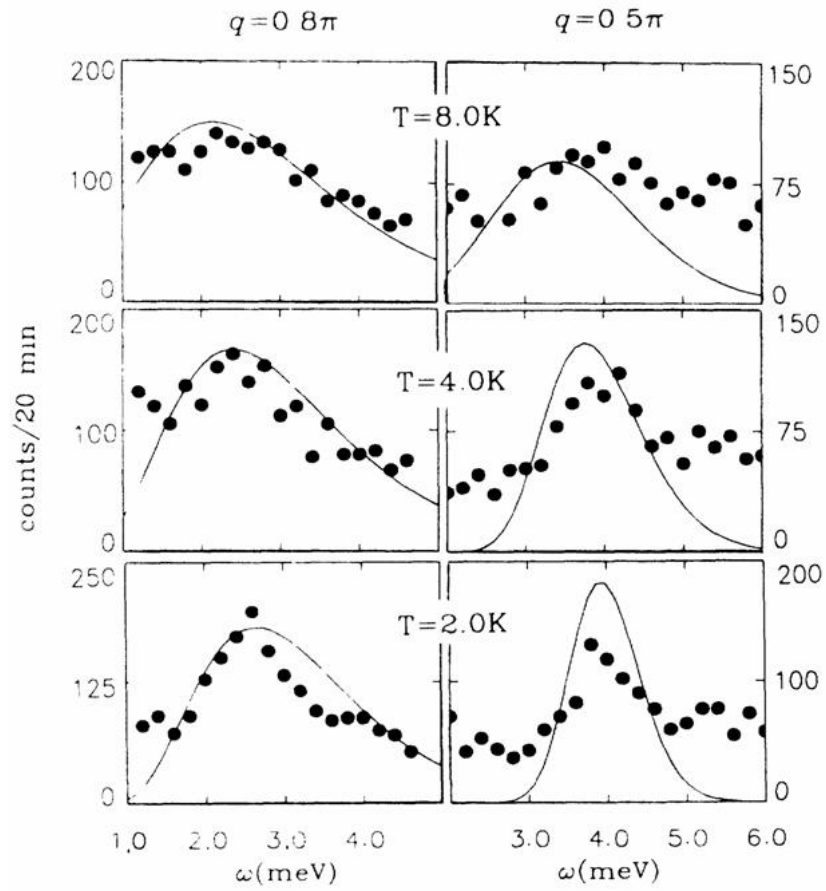


Figura 2.1: Seção de choque de espalhamento inelástico de nêutrons para o antiferromagneto unidimensional $CuCl_2 \cdot 2N(C_5D_5)$, para diferentes temperaturas e valores de vetor de onda q . As linhas sólidas são os resultados obtidos pelo método de Monte Carlo quântico e entropia máxima e os círculos sólidos são os resultados experimentais.

2.3 Propriedades da suscetibilidade

A transformada de Laplace da função resposta $K(t)$ é dada por

$$\tilde{\chi}(z) = \int_0^{\infty} K(t)e^{izt} dt, \quad (2.39)$$

onde z é uma variável complexa com $Im(z) > 0$. $\chi(\omega)$ é o limite de $\tilde{\chi}(z)$ quando nos aproximamos do eixo real de freqüências por cima

$$\chi(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \tilde{\chi}(\omega + i\epsilon). \quad (2.40)$$

Se o sistema é translacionalmente invariante no tempo podemos definir uma transformada de Fourier por:

$$K(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} K(\omega) d\omega. \quad (2.41)$$

Assim:

$$\tilde{\chi}(z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(\omega-z)t} K'(\omega) d\omega = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{K'(\omega) d\omega}{\omega - z}, \quad (2.42)$$

onde $K'(\omega) = K(\omega)/2$. Temos agora

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \tilde{\chi}(\omega + i\epsilon) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega' K'(\omega')}{\omega' - \omega - i\epsilon}. \quad (2.43)$$

Usando a relação:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\omega + i\epsilon} = P\left(\frac{1}{\omega}\right) - i\pi\delta(\omega), \quad (2.44)$$

onde P indica o valor principal. Assim temos:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \tilde{\chi}(\omega + i\epsilon) = P \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega' K'(\omega')}{\omega' - \omega} + iK'(\omega). \quad (2.45)$$

Desta equação tiramos:

$$\chi''(\omega) = K'(\omega) \quad \text{e} \quad \chi'(\omega) = P \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi''(\omega') d\omega'}{\omega' - \omega}. \quad (2.46)$$

onde:

$$\chi''_{BA}(t) = \frac{1}{2} \langle [B(t), A] \rangle, \quad (2.47)$$

pois $K(t) = \langle [B(t), A] \rangle$.

2.4 Teorema da flutuação e dissipação

Seja:

$$S_{AB}(t) \equiv \langle A(t)B(0) \rangle - \langle A(t) \rangle \langle B(0) \rangle, \quad (2.48)$$

a função correlação. Subtraímos as médias em equilíbrio tal que temos $S_{AB} \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$ e assim a transformada de Fourier pode, em princípio, ser definida. Obviamente $\langle A(t) \rangle$ é independente do tempo.

Executando a média em um ensemble canônico $\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z}$ e lembrando que o operador $e^{-\beta H}$ efetua uma translação no tempo imaginário de $\tau = i\beta$ temos

$$\begin{aligned} Tr\{e^{-\beta H} A(t)B(0)\} &= Tr\{A(t + i\beta)e^{-\beta H} B(0)\} \\ &= Tr\{e^{-\beta H} B(0)A(t + i\beta)\}, \end{aligned} \quad (2.49)$$

onde usamos $Tr(AB) = Tr(BA)$. Devido à invariância translacional no tempo $\langle A(t)B(0) \rangle = \langle A(0)B(-t) \rangle$, temos:

$$\begin{aligned} S_{BA}(-t) &= \langle B(-t)A(0) \rangle = \langle B(0)A(t) \rangle \\ &= Tr\{e^{-\beta H} A(0)B(-t + i\beta)\} = \langle A(t - i\beta)B(0) \rangle \end{aligned} \quad (2.50)$$

$$S_{BA}(-t) = S_{AB}(t - i\beta) = e^{-i\beta \frac{\partial}{\partial t}} S_{AB}(t). \quad (2.51)$$

Por outro lado de (2.47) temos

$$2\chi''_{AB}(t) = S_{AB}(t) - S_{BA}(-t) = [1 - e^{-i\beta \frac{\partial}{\partial t}}] S_{AB}(t). \quad (2.52)$$

Tomando a transformada de Fourier de (2.52), lembrando que $\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -i\omega$, chegamos a

$$\chi''_{AB}(\omega) = \frac{1}{2}(1 - e^{-\beta\omega})S_{AB}(\omega), \quad (2.53)$$

que é o *teorema de flutuação e dissipação*. Uma outra relação útil é a seguinte. Partimos de

$$\begin{aligned} R_{AB}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \langle A, B(t) \rangle dt \\ R_{AB}(\omega) &= \int_{-\infty}^0 e^{-i\omega t} \langle A, B \rangle dt + \int_0^{\infty} e^{-i\omega t} \langle A, B \rangle dt \\ &= \int_0^{\infty} e^{i\omega t} \langle A, B(-t) \rangle dt + \int_0^{\infty} e^{-i\omega t} \langle A, B(t) \rangle dt \end{aligned} \quad (2.54)$$

$$\begin{aligned}
&= \int_0^\infty e^{i\omega t} (A, B(t))^* dt + \int_0^\infty e^{-i\omega t} (A, B) dt \\
&= 2\Re \int_0^\infty e^{-i\omega t} (A, B(t)) dt.
\end{aligned} \tag{2.55}$$

Usando a eq.(2.34) obtemos:

$$\chi''_{AB}(\omega) = \frac{\omega}{2} R_{AB}(\omega). \tag{2.56}$$

Assim o teorema de flutuação-dissipação (2.53) pode ser escrito na forma:

$$R_{AB}(\omega) = \frac{(1 - e^{-\beta\omega})}{\omega} S_{AB}(\omega). \tag{2.57}$$

Para temperaturas altas ou sistemas clássicos $R_{AB}(\omega) = \beta S_{AB}(\omega)$.

O nome do teorema fica agora claro. Ele relaciona, para qualquer sistema em equilíbrio térmico, duas quantidades fisicamente distintas e de significado fundamental: as flutuações espontâneas, por um lado, que aparecem, mesmo na ausência de forças externas, do movimento térmico das partículas constituintes do sistema, descritas por $S_{AB}(t)$; e por outro lado, o comportamento dissipativo de um sistema de muitos corpos, descrito pelo fato de que todo ou parte do trabalho realizado por forças externas é disseminado irreversivelmente nos infinitos graus de liberdade dos sistemas térmicos. Esta propriedade é descrita por $\chi''(t)$ ou $R(t)$.

2.5 Funções de Green

A função de Green retardada é definida por

$$G_{AB}(t - t') = -i\Theta(t - t') \langle [B(t - t'), A] \rangle \tag{2.58}$$

onde:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$

A eq. (2.13) fornece

$$\begin{aligned}
\Delta B &= iTr \int_{-\infty}^t \rho_0 [B(t - t'), A] F(t') dt' \\
&= iTr \int_{-\infty}^{\infty} \rho_0 \Theta(t - t') [B(t - t'), A] F(t') dt',
\end{aligned} \tag{2.59}$$

que pode ser escrita como:

$$\Delta B(t) = - \int_{-\infty}^{\infty} G_{BA}(t-t')F(t')dt'. \quad (2.60)$$

Para $F(t) = Fe^{-i\omega t}$ obtemos de (2.60)

$$\chi_{BA}(\omega) = - \int_{-\infty}^{\infty} G_{BA}(t-t')e^{i\omega(t-t')}dt' \quad (2.61)$$

ou então

$$\chi_{BA}(\omega) = -2\pi G_{BA}(\omega). \quad (2.62)$$

De (2.56) e (2.62) chegamos a:

$$R_{AB}(\omega) = -\frac{1}{\pi\omega} \Im G_{AB}(\omega). \quad (2.63)$$

Observação: Se na eq. (2.60) consideramos a perturbação como um impulso dado ao sistema no tempo t' isto é $F(t') = \delta(t')$, vemos que a função de Green é a resposta a um pulso do tipo delta de Dirac.

2.6 Relaxação do sistema depois de uma perturbação

Se a perturbação é aplicada continuamente de $t = -\infty$ até $t = 0$ e então desligada temos:

$$F(t) = \begin{cases} e^{nt}F & t < 0 \\ 0 & t > 0 \end{cases}$$

onde n é um fator de convergência infinitesimal. Podemos mostrar depois de algum cálculo e fazendo mudança de variável que a resposta será dada por:

$$\Delta B(t) = Fe^{nt}R(t), \quad (2.64)$$

para $t > 0$. $R(t)$ descreve a relaxação de ΔB depois da remoção do distúrbio externo. Vemos agora por que $R(t)$ é chamado de *função relaxação*.

2.7 Diferença entre transformada de Fourier e Laplace temporal

$S(t)$ sendo uma flutuação, não há nada de especial sobre a direção do tempo translacionalmente invariante. O comportamento de $S(t)$ não distingue $t > 0$ de $t < 0$, e podemos portanto usar a transformada de Fourier (ou de Laplace por razões analíticas). Porém se temos uma perturbação aplicada ao sistema, por exemplo de $t = -\infty$ até $t = 0$ (desligada subitamente em $t = 0$), o comportamento do sistema é diferente para $t < 0$ e $t > 0$. A função resposta é constante para $t < 0$ (se a perturbação é constante), mas relaxa para zero depois que a força externa for desligada. Neste caso para representar o comportamento da relaxação de uma forma conveniente devemos usar a transformada de Laplace no tempo.

2.8 Exemplo simples

Consideremos um sistema de bósons livres, por exemplo, descrito pelo Hamiltoniano

$$H = \sum_q \omega_q a_q^\dagger a_q. \quad (2.65)$$

a_q^\dagger e a_q são operadores de criação e destruição com $[a_q, a_q^\dagger] = 1$, onde temos:

$$a_q(t) = a_q e^{-i\omega_q t} \quad a_q^\dagger(t) = a_q^\dagger e^{i\omega_q t}, \quad (2.66)$$

como pode ser verificado facilmente pela equação de Heisenberg

$$i \frac{da_q}{dt} = [a_q, H]. \quad (2.67)$$

Vamos estudar um operador definido por

$$A_q = a_q^\dagger + a_q. \quad (2.68)$$

Como $A_q^\dagger = A_q$, A_q é Hermitiano e pode descrever variáveis físicas (no caso do oscilador harmônico, variável de posição por exemplo).

A função correlação é dada por:

$$S(q, t) = \langle A_q(t) A_q \rangle \quad (2.69)$$

$$S(q, t) = \langle [a_q^\dagger(t) + a_q(t)][a_q^\dagger + a_q] \rangle = \langle a_q^\dagger(t)a_q \rangle + \langle a_q(t)a_q^\dagger \rangle, \quad (2.70)$$

pois como sabemos $\langle a_q a_q \rangle = \langle a_q^\dagger a_q^\dagger \rangle = 0$.

$$S(q, t) = e^{i\omega_q t} \langle a_q^\dagger a_q \rangle + e^{-i\omega_q t} \langle a_q a_q^\dagger \rangle. \quad (2.71)$$

Usando a identidade $a_q a_q^\dagger - a_q^\dagger a_q = 1$ e definindo $n_q = \langle a_q^\dagger a_q \rangle$, temos o resultado final:

$$S(q, t) = n_q e^{i\omega_q t} + (1 + n_q) e^{-i\omega_q t} \quad (2.72)$$

$$S(q, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} S(q, t) dt = n_q \delta(\omega + \omega_q) + (1 + n_q) \delta(\omega - \omega_q). \quad (2.73)$$

Se colocarmos um termo imaginário em ω_q , de forma que $\omega_q \rightarrow \omega_q + i\epsilon$, onde $\epsilon \rightarrow 0$ teremos o resultado

$$S(q, \omega) = \frac{n_q}{\omega + \omega_q + i\epsilon} + \frac{1 + n_q}{\omega - \omega_q - i\epsilon}, \quad (2.74)$$

ou usando

$$n_q = \frac{1}{e^{\beta\omega_q} - 1} \quad (2.75)$$

$$S(q, \omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega_q} - 1} \left[\frac{1}{\omega + \omega_q + i\epsilon} + \frac{e^{\beta\omega_q}}{\omega - \omega_q - i\epsilon} \right]. \quad (2.76)$$

Observemos a quebra de simetria entre $\omega = \omega_q$ e $\omega = -\omega_q$. Isto acontece porque para $T \rightarrow 0$ o sistema está no estado fundamental. Ele pode ser excitado, mas não pode decair.

Vamos agora calcular a função relaxação:

$$R(q, t) = (A_q(t)A_q) = \int_0^\beta \langle A_q(t - i\lambda)A_q \rangle d\lambda \quad (2.77)$$

$$\begin{aligned} R(q, t) &= \int_0^\beta d\lambda [n_q e^{i\omega_q(t-i\lambda)} + (1 + n_q) e^{-i\omega_q(t-i\lambda)}] \\ R(q, t) &= n_q e^{i\omega_q t} \int_0^\beta d\lambda e^{\omega_q \lambda} + (1 + n_q) e^{-i\omega_q t} \int_0^\beta d\lambda e^{-\omega_q \lambda} \end{aligned} \quad (2.78)$$

$$\begin{aligned}
R(q, t) &= n_q e^{i\omega_q t} \frac{(e^{\beta\omega_q} - 1)}{\omega_q} + (1 + n_q) e^{-i\omega_q t} (e^{-\beta\omega_q} - 1) - \omega_q \\
R(q, t) &= \frac{e^{i\omega_q t}}{\omega_q} + \frac{e^{-i\omega_q t}}{\omega_q} (1 + n_q) (1 - e^{-\beta\omega_q})
\end{aligned} \tag{2.79}$$

mas

$$\begin{aligned}
1 - e^{-x} &= e^{-x} (e^x - 1) & 1 + n_q &= e^{\beta\omega_q} n_q \\
(1 + n_q) (1 - e^{-\beta\omega_q}) &= \frac{e^{\beta\omega_q}}{e^{\beta\omega_q} - 1} e^{-\beta\omega_q} (e^{\beta\omega_q} - 1) = 1.
\end{aligned}$$

Assim:

$$R(q, t) = \frac{e^{i\omega_q t} + e^{-i\omega_q t}}{\omega_q} \tag{2.80}$$

$$R(q, \omega) = \frac{1}{\omega_q} [\delta(\omega + \omega_q) + \delta(\omega - \omega_q)]. \tag{2.81}$$

Notemos que $R(q, t)$ não descreve flutuações espontâneas mas sim relaxação depois que o sistema foi perturbado e por isso o fator de Bose não aparece.

2.8.1 Função de Green

A função de Green na temperatura zero é definida por:

$$G(q, t) = \langle 0 | T A_q(t) A_q | 0 \rangle, \tag{2.82}$$

onde T é o operador ordenamento de tempo. Utilizando a representação de A_q dada pela eq.(2.68) temos:

$$G(q, t) = \langle 0 | T (a_q^\dagger(t) a_q + a_{-q}(t) a_{-q}^\dagger) | 0 \rangle. \tag{2.83}$$

O termo ordenado no tempo fica:

$$\begin{aligned}
a_q^\dagger(t) a_q + a_{-q}(t) a_{-q}^\dagger & \quad t > 0 \\
a_q a_q^\dagger(t) + a_{-q}^\dagger a_{-q}(t) & \quad t < 0
\end{aligned}$$

o que leva a

$$G(q, \omega) = \frac{1}{\omega - \omega_q + i\epsilon} - \frac{1}{\omega + \omega_q - i\epsilon} = \frac{2\omega_q}{\omega^2 - \omega_q^2}. \tag{2.84}$$

Observemos que

$$\Im G(q, \omega) = -\pi[\delta(\omega - \omega_q) + \delta(\omega + \omega_q)]. \quad (2.85)$$

2.8.2 Resumo

$$\begin{aligned} R(q, \omega) &= \frac{1}{\omega_q} [\delta(\omega + \omega_q) + \delta(\omega - \omega_q)] \\ S(q, \omega) &= \frac{1}{e^{\beta\omega_q} - 1} [\delta(\omega + \omega_q) + e^{\beta\omega_q} \delta(\omega - \omega_q)] \\ S(q, \omega) &= \frac{\delta(\omega + \omega_q)}{e^{-\beta\omega} - 1} + \frac{e^{\beta\omega}}{e^{\beta\omega} - 1} \delta(\omega - \omega_q) \\ S(q, \omega) &= \frac{1}{e^{-\beta\omega} - 1} [\delta(\omega + \omega_q) - \delta(\omega - \omega_q)]. \end{aligned}$$

Por sua vez

$$R(q, \omega) = \frac{1}{\omega} [-\delta(\omega + \omega_q) + \delta(\omega - \omega_q)] \quad (2.86)$$

bate com eq.(2.82), já que a função delta permite trocar ω por ω_q . Assim:

$$R(q, \omega) = \frac{1 - e^{-\beta\omega}}{\omega} S(q, \omega) \quad (2.87)$$

$$\Im G(q, \omega) = -\pi[\delta(\omega - \omega_q) + \delta(\omega + \omega_q)] \quad (2.88)$$

e

$$R(q, \omega) = -\frac{1}{\pi\omega} \Im G(q, \omega). \quad (2.89)$$

2.9 Casos reais

Em geral a função $R(q, \omega)$ pode ter uma forma complicada. No entanto, em muitos casos, para a temperatura $T \rightarrow 0$, o sistema pode ser aproximado por um Hamiltoniano do tipo (2.65). Mas as interações presentes no sistema podem ter dois efeitos:

1. deslocar a posição do pico de ω_q para ($\omega_p = \omega_q + \Delta_q$).
2. Causar um amortecimento Γ_q .

Sabemos que

$$\frac{1}{\omega + \omega_q} + \frac{1}{\omega - \omega_q} \rightarrow \frac{2\omega}{\omega^2 - \omega_q^2}$$

$$e^{i(\omega_q + \Delta_q)t - \Gamma_q t} = e^{i\omega_q t + i[\Delta_q + i\Gamma_q]t}.$$

Podemos definir $\Sigma_q = \Delta_q + i\Gamma_q$. Assim esperamos que $R(q, \omega)$ seja algo como:

$$R(q, \omega) \propto \frac{\Sigma_q''(q, \omega)}{[\omega^2 - \omega_q^2 + \Sigma_q'(q, \omega)]^2 + [\Sigma_q''(q, \omega)]^2}, \quad (2.90)$$

onde Σ_q pode depender de q e ω .

Experimentalmente obtemos uma curva do tipo da fig.(2.2),

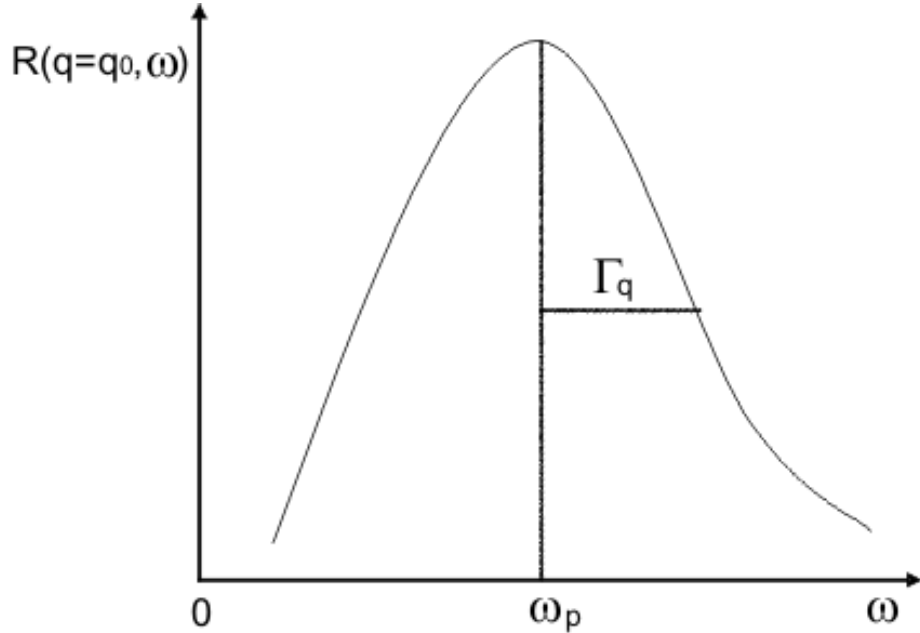


Figura 2.2: Esboço do comportamento de $R(q, \omega)$ em função de ω , com $q = q_0$ fixo, indicando a posição do pico ω_p e a meia largura, Γ_q , denominada também de amortecimento.

onde ω_p é a posição do pico e Γ_q é a meia largura da curva quando $R(q, \omega)$ decaiu pela metade, isto é

$$R(\omega_q + \Gamma_q) = \frac{R(\omega_p)}{2}. \quad (2.91)$$

Os experimentais muitas vezes apresentam gráficos de ω_p e Γ_q em função de q e T no lugar de figuras para $R(q, \omega)$. Algumas vezes do cálculo teórico para $R(q, \omega)$, podemos obter analiticamente ω_p e Γ_q , mas na maioria dos casos calculamos $R(q, \omega)$ numericamente, fazemos o desenho e a partir dele determinamos ω_p e Γ_q .

Capítulo 3

Dinâmica do antiferromagneto quântico de Heisenberg unidimensional de spin inteiro acoplado com fônons

3.1 Introdução

Como é bem conhecido, em sistemas magnéticos de baixa dimensão, o acoplamento spin-fônon toma um papel importante. As vibrações da rede modulam a interação de troca devido à variação das distâncias interatômicas. Conseqüentemente, a interação de troca pode ser expandida numa série de potências dos deslocamentos atômicos onde mantemos apenas os termos lineares. Isto dá um Hamiltoniano de interação o qual é linear nos operadores de fônons e quadrático nos operadores de spin. A dinâmica do sistema magnético quando o acoplamento spin-fônon é levado em conta não tem sido muito estudada.

As propriedades do antiferromagneto de Heisenberg clássico acoplado com fônons foram estudadas por Fizez et al [16] usando o formalismo da função memória. A influência do acoplamento spin-fônon no antiferromagneto bidimensional de spin-1/2 foi tratada em [17] usando a aproximação transformação unitária dentro do formalismo da teoria de onda de spin modificada. Alguns trabalhos que tratam do acoplamento spin-fônon podem ser encontrados nas refs. [18-21].

Neste trabalho, calculamos a função relaxação para o antiferromagneto de Heisenberg unidimensional de spin inteiro com o acoplamento spin-fônon usando o formalismo da função memória, seguindo um procedimento proposto inicialmente por Reiter [22] e posteriormente desenvolvido por outros autores [23]. Este método tem sido útil no estudo dos modelos clássicos e quânticos em uma [24] e duas dimensões [25, 26] mostrando bom acordo com dados experimentais, simulações de dinâmica molecular e também com outras teorias [27]. Para propósito de cálculos numéricos tomamos $S = 1$. A dinâmica do antiferromagneto unidimensional $S = 1$ foi estudada por Pires e Gouvea em [28]. Como uma consequência do gap de Haldane, uma estrutura de duplo pico foi encontrada para a função relaxação. Naquela referência foi sugerido que o efeito de processos de ordem superior poderia suavizar os dois picos obtidos. Um de tais processos é o acoplamento mágnon-fônon que estamos considerando no presente trabalho.

O cálculo da função memória, o qual toma um papel central no formalismo, não requer que a ordem de longo alcance seja válida pois ela depende apenas das correlações entre primeiros vizinhos. A frequência dos modos de onda de spin local e correlações estáticas, requeridas como ponto de partida para o método, são obtidas via método de onda de spin modificada (MSW). É bem conhecido que a teoria de onda de spin padrão não é aplicável para magnetos quânticos de baixa dimensão sem modificações [29]. Na teoria MSW [8], a consequência do teorema Mermin-Wagner é evocada numa aproximação de matriz densidade. O procedimento tem sido aplicado para uma (1D) e duas dimensões (2D) do ferro [29] e antiferromagnetos [30, 31] dando resultados em excelente acordo com os resultados obtidos via diagonalização exata [32] e teoria de grupo de renormalização [33]. Nós temos usado a teoria MSW para obter as quantidades estáticas requeridas pelo formalismo da função memória.

A combinação destas duas técnicas, o método da função memória e a teoria MSW, já tem sido aplicada por alguns coautores de nosso grupo para estudar as propriedades em baixa temperatura dos modelos de Heisenberg quânticos 1D [28] spin-1 e 2D [26] spin-1/2.

A seguir, na seção 3.2, descrevemos os passos para o cálculo da função relaxação spin-spin e apresentamos a expressão obtida para a função memória. Na seção 3.3, discutimos os resultados numéricos obtidos para a função relaxação spin-spin para diferentes valores de temperatura, vetores de onda q e constante de acoplamento spin-fônon. Na seção 3.4 apresentamos nossas conclusões.

3.2 Dinâmica

Como discutido no ítem 1.1.2 da Introdução, iniciamos com o seguinte Hamiltoniano:

$$H = H_S + H_{SP} + H_P, \quad (3.1)$$

onde os Hamiltonianos H_S e H_{SP} , como discutido anteriormente, são respectivamente o primeiro e o segundo termo da expansão da integral de troca (exchange) J em torno dos deslocamentos atômicos das posições de equilíbrio, de forma que:

$$H_S + H_{SP} = \sum_{l=1}^N \{ [1 + (\mathbf{x}_l - \mathbf{y}_{l+1}) \cdot \nabla] J(|\mathbf{x}_l - \mathbf{y}_{l+1}|) \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{T}_{l+1} \\ + [1 + (\mathbf{y}_{l-1} - \mathbf{x}_l) \cdot \nabla] J(|\mathbf{y}_{l-1} - \mathbf{x}_l|) \mathbf{T}_{l-1} \cdot \mathbf{S}_l \}$$

H_P é o Hamiltoniano de fônons. Assim temos:

$$H_S = J \sum_{l=1}^N [\mathbf{S}_l \cdot \mathbf{T}_{l+1} + \mathbf{T}_{l-1} \cdot \mathbf{S}_l] \quad (3.2)$$

$$H_{SP} = \alpha \sum_{l=1}^N [(\mathbf{x}_l - \mathbf{y}_{l+1}) \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{T}_{l+1} + (\mathbf{y}_{l-1} - \mathbf{x}_l) \mathbf{T}_{l-1} \cdot \mathbf{S}_l] \quad (3.3)$$

$$H_P = \sum_{l=1}^N \left\{ \frac{m}{2} (\dot{\mathbf{x}}_l^2 + \dot{\mathbf{y}}_l^2) + \frac{K}{2} [(\mathbf{x}_l - \mathbf{y}_{l+1})^2 + (\mathbf{y}_{l-1} - \mathbf{x}_l)^2] \right\}, \quad (3.4)$$

onde, lembrando, \mathbf{x}_l , \mathbf{y}_l , \mathbf{S}_l e \mathbf{T}_l são os operadores deslocamento em relação às posições de equilíbrio e operadores de spin das subredes A e B respectivamente, J é a constante de troca, α é a constante de acoplamento spin-fônon dada por $\alpha = \frac{dJ_{ij}}{dr_{ij}}$, K é a constante elástica e m é a massa do íon. Tomando a transformada de Fourier obtemos:

$$H_S = 2 \sum_{k=1}^N J(k) [\mathbf{S}_k \cdot \mathbf{T}_{-k} + \mathbf{T}_k \cdot \mathbf{S}_{-k}] \quad (3.5)$$

$$H_{SP} = 2i\alpha \sum_{q,k} [-\mathbf{x}_q \text{sen}(q+k) + \mathbf{y}_q \text{sen}(k)] \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{T}_{-q-k} \quad (3.6)$$

$$H_P = K \sum_q [\mathbf{x}_q \mathbf{x}_{-q} + \mathbf{y}_q \mathbf{y}_{-q} - \cos(q) (\mathbf{x}_q \mathbf{y}_{-q} + \mathbf{x}_{-q} \mathbf{y}_q)], \quad (3.7)$$

onde $J(q) = 2J \cos(q)$.

Usando a representação de Dyson-Maleev

$$\mathbf{S}_l^+ = \sqrt{2S} a_l \quad \mathbf{S}_l^- = \sqrt{2S} a_l^\dagger \quad \mathbf{S}_l^z = S - a_l^\dagger a_l \quad (3.8)$$

$$\mathbf{T}_l^+ = \sqrt{2S} b_l^\dagger \quad \mathbf{T}_l^- = \sqrt{2S} b_l \quad \mathbf{T}_l^z = -S + b_l^\dagger b_l \quad (3.9)$$

e uma transformação definida por

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_q &= \varepsilon_q + \eta_{-q} \\ \mathbf{y}_q &= \varepsilon_q - \eta_{-q} \end{aligned} \quad (3.10)$$

onde

$$\varepsilon_q = \frac{1}{\sqrt{2m\omega_c(q)}}(\alpha_q + \alpha_{-q}^\dagger), \quad (3.11)$$

$$\eta_q = \frac{1}{\sqrt{2m\omega_d(q)}}(\beta_q + \beta_{-q}^\dagger) \quad (3.12)$$

e

$$\begin{aligned} \omega_c(q) &= \sqrt{\frac{2K}{m}}(1 - \cos(q))^{1/2}, \\ \omega_d(q) &= \sqrt{\frac{2K}{m}}(1 + \cos(q))^{1/2} \end{aligned} \quad (3.13)$$

são as frequências de fônons das subredes A e B respectivamente, obtemos:

$$H_S = 2JS \sum_k \{a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k + \cos(k)(a_k b_k + a_k^\dagger b_k^\dagger)\} \quad (3.14)$$

$$H_{SP} = -4i\alpha S \sum_{q,k} \{\varepsilon_q \Gamma_{q,k} \text{sen}(q/2) - \eta_{-q} \Delta_{q,k} \cos(q/2)\} \quad (3.15)$$

onde

$$\Gamma_{q,k} = \cos(q/2)(a_{q+k}^\dagger a_k + b_k^\dagger b_{q+k}) + \cos(k + q/2)(a_k b_{q+k} + a_{q+k}^\dagger b_k^\dagger) \quad (3.16)$$

$$\Delta_{q,k} = \text{sen}(q/2)(a_{q+k}^\dagger a_k - b_k^\dagger b_{q+k}) + \text{sen}(k + q/2)(a_{q+k}^\dagger b_k^\dagger - a_k b_{q+k}). \quad (3.17)$$

e

$$H_P = \sum_q \{\omega_c(q)\alpha_q^\dagger \alpha_q + \omega_d(q)\beta_q^\dagger \beta_q\}. \quad (3.18)$$

Nosso objetivo é o cálculo do fator de estrutura dinâmico, o qual é a transformada de Fourier da função relaxação, dada por:

$$S^{\alpha\beta}(q, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \frac{(\mathbf{S}_q^\alpha(t), \mathbf{S}_q^\beta(0))}{(\mathbf{S}_q^\alpha, \mathbf{S}_q^\beta)}, \quad (3.19)$$

onde $\alpha, \beta = x, y, z$. No caso estudado aqui teremos $S^{\alpha\beta}(q, \omega) = 0$ para $\alpha \neq \beta$ e $S^{\alpha\beta}(q, \omega) = S(q, \omega)$ para $\alpha = \beta$, devido à invariância rotacional dos spins. \mathbf{S}_q^α é a transformada de Fourier dos spins pertencentes à ambas subredes A e B.

3.2.1 Método do operador de projeção

O produto interno (A, B) dos operadores A e B é definido por [5] e pela eq.(2.28) por:

$$(A, B) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta \langle e^{\lambda H} A^\dagger e^{-\lambda H} B \rangle d\lambda. \quad (3.20)$$

Pode ser mostrado, [5], que a transformada de Laplace da função relaxação

$$R^\alpha(z) = -i \int_0^\infty e^{izt} (\mathbf{S}_q^\alpha(t), \mathbf{S}_q^\alpha(0)) dt \quad (3.21)$$

pode ser escrita como:

$$R^\alpha(z) = (\mathbf{S}_q^\alpha, \mathbf{S}_q^\alpha) \left\{ z - \frac{\langle \omega_q^2 \rangle}{[z + \Sigma_q(z)]} \right\}^{-1} \quad (3.22)$$

onde

$$\langle \omega_q^2 \rangle = \frac{(\dot{\mathbf{S}}_q^\alpha, \dot{\mathbf{S}}_q^\alpha)}{(\mathbf{S}_q^\alpha, \mathbf{S}_q^\alpha)} \quad (3.23)$$

é o segundo momento e $\Sigma_q(t)$ é a *função memória* dada por:

$$\Sigma_q(t) = -\frac{M(t)}{(\dot{\mathbf{S}}_q, \dot{\mathbf{S}}_q)} \quad (3.24)$$

$$M(t) = (QL^2\mathbf{S}_q, \exp(-iQLQt)QL^2\mathbf{S}_q). \quad (3.25)$$

e

$$QL^2\mathbf{S}_q = L^2\mathbf{S}_q - \langle \omega^2 \rangle \mathbf{S}_q. \quad (3.26)$$

L é o operador de Liouville definido por $LA = i\dot{A} = -i[A, H]$ e Q é o operador de projeção o qual aplicado no operador B_q dá

$$QB_q = B_q - \frac{(\mathbf{S}_q, B_q)}{(\mathbf{S}_q, \mathbf{S}_q)} \mathbf{S}_q - \frac{(L\mathbf{S}_q, B_q)}{(L\mathbf{S}_q, L\mathbf{S}_q)} L\mathbf{S}_q. \quad (3.27)$$

O fator de estrutura dinâmico $S(q, \omega)$, o qual é a parte imaginária de $R_q(z)$, pode ser escrito como:

$$S(q, \omega) = (\mathbf{S}_q^\alpha, \mathbf{S}_q^\alpha) \langle \omega_q^2 \rangle \left\{ \frac{\Sigma_q''(\omega)}{[\omega^2 - \langle \omega_q^2 \rangle + \omega \Sigma_q'(\omega)]^2 + [\omega \Sigma_q''(\omega)]^2} \right\}, \quad (3.28)$$

$\Sigma_q'(\omega)$ e $\Sigma_q''(\omega)$ são as partes real e imaginária de $\Sigma_q(\omega)$.

Foi mostrado por Pires e Gouvea [27] que a técnica da função memória é equivalente à aproximação de função de Green (no mínimo até segunda ordem) para o cálculo do fator de estrutura de fônons (a quantidade de trabalho envolvida no cálculo é a mesma). Além disso, no cálculo da função correlação spin-spin simetrizada temos um termo com dois operadores de bósons na componente S_q^z . Neste caso, teremos que usar uma função de Green de duas partículas e a aproximação da função memória é portanto mais conveniente. Esta é a razão do porquê deste formalismo ser largamente usado na literatura.

Encontramos da equação de movimento definindo o operador de Liouville e do Hamiltoniano as seguintes expressões:

$$\begin{aligned} L^2 \mathbf{S}_q^x &= 4S^2 J^2 (1 - \cos^2 q) \mathbf{S}_q^x \\ &- 2i\alpha JS^2 \sqrt{N} \sum_k \{ [\cos(q) \text{sen}(q) - \cos(q-k) \text{sen}(q-k)] \mathbf{x}_k \mathbf{S}_{k-q}^x \\ &- \text{sen}(k) \mathbf{y}_k \mathbf{S}_{k-q}^x + \cos(q) \text{sen}(k) \mathbf{x}_k \mathbf{T}_{k-q}^x + \cos(k-q) \text{sen}(k) \mathbf{y}_k \mathbf{T}_{k-q}^x \}, \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} L^2 \mathbf{S}_q^z &= -J^2 S \sqrt{N} \sum_k \{ 4\cos(k) \cos(q-k) [T_k^x T_{q-k}^x + T_k^y T_{q-k}^y] \\ &+ 4\cos^2(k) [S_k^x S_{q-k}^x + S_k^y S_{q-k}^y] + 8\cos(k) [S_{q-k}^x T_k^x + S_{q-k}^y T_k^y] \}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Para a componente y encontramos uma expressão idêntica a da componente x trocando $x \leftrightarrow y$. As expressões para \mathbf{T}_q são obtidas permutando $\mathbf{S} \leftrightarrow \mathbf{T}$.

3.2.2 Teoria de onda de spin modificada

No formalismo MSW o vínculo da magnetização de subrede zero é introduzido no Hamiltoniano por um *multiplicador de Lagrange*. A diagonalização da parte quadrática leva na energia de onda de spin que tem um gap, de acordo com a conjectura de Haldane. Os resultados da teoria MSW e o método dos bósons de Schwinger são qualitativamente similares e a escolha de um ou outro método é uma questão de conveniência. Segundo a ref.[8], introduzimos a transformação dos operadores de spins dada pelas eqs. (3.8) e

(3.9) nas duas subredes. Tomamos a transformada de Fourier e em seguida introduzimos a transformação de Bogoliubov:

$$a_k = u_k c_k + v_k d_{-k}^\dagger \quad b_{-k}^\dagger = v_k c_k + u_k d_{-k}^\dagger. \quad (3.31)$$

onde a_k e b_k^\dagger são as transformadas de Fourier de a_l e b_l^\dagger , com k variando dentro da primeira zona de Brillouin.

Os coeficientes u_k e v_k são dados por:

$$\begin{aligned} u_k^2 &= \frac{1}{2(1 - \eta^2 \cos^2 k)^{1/2}} + \frac{1}{2} \\ v_k^2 &= \frac{1}{2(1 - \eta^2 \cos^2 k)^{1/2}} - \frac{1}{2} \\ v_k^2 &= u_k^2 - 1. \end{aligned} \quad (3.32)$$

e a frequência de mágnon é dada pela equação:

$$\omega_k = \lambda(1 - \eta^2 \cos^2 k)^{1/2}. \quad (3.33)$$

Os parâmetros η e λ dependentes da temperatura são obtidos da solução das equações auto-consistentes [8]:

$$\begin{aligned} S + \frac{1}{2} &= \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{2(1 - \eta^2 \cos^2 k)^{1/2}} \coth \frac{\lambda}{2T} (1 - \eta^2 \cos^2 k)^{1/2}, \\ \frac{\eta^2 \lambda}{2J} &= \frac{1}{N} \sum_k \frac{\eta^2 \cos^2 k}{2(1 - \eta^2 \cos^2 k)^{1/2}} \coth \frac{\lambda}{2T} (1 - \eta^2 \cos^2 k)^{1/2}. \end{aligned}$$

Os valores numéricos obtidos para η e λ são mostrados na Tabela 1.

T/J	η	λ
0.05	0.9989989	2.364372
0.1	0.9980759	2.363372
0.15	0.9969023	2.361906
0.195	0.9956660	2.360426

Tabela 1. Valores obtidos numericamente para η e λ .

O gap de Haldane é obtido fazendo $k = 0$ ou $k = \pi$ na eq.(3.33), sendo dado então por: $\omega_0 = \lambda\sqrt{1 - \eta^2}$. O comprimento de correlação é dado por $\xi \propto e^{\pi S}$ e conseqüentemente para S grande a cadeia de spin tem ordem de longo alcance. O gap decresce com o aumento de S .

3.2.3 Determinação da função memória

Seguindo o *procedimento de Reiter*, descrito em detalhes em [22], determinamos $\Sigma_q(t)$ cuja expressão para a componente x é dada por:

$$\Sigma_q^x(t) = \frac{1}{N} \sum_k \{A_-^c \cos(\Omega_-^c t) + A_-^d \cos(\Omega_-^d t) + A_+^c \cos(\Omega_+^c t) + A_+^d \cos(\Omega_+^d t)\}.$$

Para a componente y temos uma expressão idêntica e para a componente z

$$\Sigma_q^z(t) = \frac{1}{N} \sum_k \{A_- \cos(\Omega_- t) + A_+ \cos(\Omega_+ t)\} \quad (3.34)$$

de forma que $\Sigma_q(t) = \Sigma_q^x(t) + \Sigma_q^y(t) + \Sigma_q^z(t)$. As expressões para $A_-(q, k)$ e $A_+(q, k)$, para todas as componentes, são dadas no Apêndice A.

As quantidades $\Omega_{\pm}(q, k)$ são definidas para as componentes x e y por:

$$\begin{aligned} \Omega_{\pm}^c(q, k) &= \omega_c(k) \pm \omega_{q-k} \\ \Omega_{\pm}^d(q, k) &= \omega_d(k) \pm \omega_{q-k}, \end{aligned} \quad (3.35)$$

e para a componente z:

$$\Omega_{\pm}(q, k) = \omega_k \pm \omega_{k-q}. \quad (3.36)$$

$\omega_c(k)$ e $\omega_d(k)$ são as frequências de fônons definidas pela eq.(3.13).

Obtemos também as expressões para $(\dot{\mathbf{S}}_q, \dot{\mathbf{S}}_q)$ usando a identidade

$$(\dot{A}, \dot{B}) = -i\beta^{-1} \langle [\dot{A}, B] \rangle \quad (3.37)$$

fornecendo para a componente x, por exemplo,

$$(\dot{\mathbf{S}}_q^x, \dot{\mathbf{S}}_q^x) = -2iJT \sum_k \cos(q-k) \{u_{q-k} v_{q-k} (1 + e^{\beta\omega_{q-k}}) n_{q-k}\}, \quad (3.38)$$

$n_k = (e^{\beta\omega_k} - 1)^{-1}$ é o número de ocupação de bósons.

O segundo momento $\langle \omega_q^2 \rangle$, o qual é necessário para o cálculo de $S(q, \omega)$, é dado por $\langle \omega^2 \rangle = \omega_q^2$. O fator de estrutura dinâmico de spin pode ser expresso em termos de dois operadores: $\mathbf{M}_q^\alpha = \mathbf{S}_q^\alpha + \mathbf{T}_q^\alpha$, o qual descreve a contribuição da magnetização usual, e

$\mathbf{R}_q^\alpha = \mathbf{S}_q^\alpha - \mathbf{T}_q^\alpha$, o qual corresponde à magnetização staggered. Em baixa temperatura a função correlação \mathbf{R}_q^α é a contribuição principal para o fator de estrutura perto do vetor de onda antiferromagnético. Enfatizamos que apenas quantidades rotacionalmente invariantes tais como $\mathbf{R}_q = \frac{1}{3}(\mathbf{R}_q^x + \mathbf{R}_q^y + \mathbf{R}_q^z)$ são calculadas aqui. Devido ao caráter isotrópico do Hamiltoniano (3.1), cada uma das três componentes de spin dá a mesma contribuição para o comportamento dinâmico do modelo. Além disso, a transformação de Dyson-Maleev quebra a simetria do espaço de spin privilegiando a componente z. Conseqüentemente, restauramos a simetria do modelo computando quantidades rotacionalmente invariantes.

A soma discreta na Eq.(3.31) pode ser transformada numa integral e após efetuarmos a transformada de Laplace conduz a integrais da forma

$$G(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{A(q, k) dk}{z - \Omega(q, k)} \quad (3.39)$$

onde fazemos $z = \omega + i\varepsilon$, $\varepsilon \rightarrow 0$. Então temos para a componente z, por exemplo:

$$\Sigma'_q(\omega) = \frac{1}{2\pi^2} P \int_0^\pi dk \left\{ \frac{A_-(q, k)}{\omega^2 - \Omega_-^2(q, k)} + \frac{A_+(q, k)}{\omega^2 - \Omega_+^2(q, k)} \right\} \quad (3.40)$$

$$\Sigma''_q(\omega) = \frac{1}{2\pi} \left\{ \frac{A_-(q, k)}{|d\Omega_-/dk|_{k_i}} + \frac{A_+(q, k)}{|d\Omega_+/dk|_{k_i}} \right\}, \quad (3.41)$$

onde k_i , com $i = 1, 2$, são as raízes de $\omega = \Omega_+(q, k)$ e $\omega = \Omega_-(q, k)$ respectivamente e P é o Valor Principal.

O segundo termo das eqs.(3.40) e (3.41) corresponde à criação de dois mágnons quando ω está acima da freqüência de mágnon e o primeiro termo corresponde à absorção e reemissão de um mágnon quando ω está abaixo da freqüência de mágnon.

3.3 Resultados numéricos

O conhecimento das raízes, k_i , de $\omega = \Omega_\pm(q, k)$ e o comportamento de $\Omega_\pm(q, k)$ são cruciais para a interpretação de $S(q, \omega)$. A parte real da função memória dá a posição do pico de $S(q, \omega)$. Os pontos onde $\Sigma''_q(\omega)$ diverge correspondem a $\frac{d\Omega_\pm(q, k_i)}{dk} = 0$ ou, como discutido por De Raedt et al.[23], os pontos onde a densidade de estados de dois mágnons, $n_\pm = \left| \frac{dk}{d\Omega_\pm(q, k_i)} \right|$, diverge. Para o modelo sem levar em conta o acoplamento com fônons, há uma faixa de freqüências onde $\Sigma''_q(\omega)$ cancela que corresponde à região entre o máximo de $\Omega_-(q, k)$ e o mínimo de $\Omega_+(q, k)$, sendo que neste caso, Ω_- e Ω_+ nunca se sobrepõem.

Este comportamento é uma consequência do gap de ω_k em $k = 0$ dado pela eq.(3.33). Para um modelo sem gap as duas curvas tocarão uma na outra. É importante comentar que no caso das duas curvas nunca se tocarem a energia de onda de spin simples está dentro da região de frequências entre as duas curvas. Para frequências maiores que o máximo de $\Omega_+(q, k)$ haverá nenhuma contribuição. Os processos de dois mágnons são proibidos na região de frequências onde $\Sigma_q''(\omega)$ cancela e, conseqüentemente, sua contribuição para o acoplamento é zero. Além disso o espalhamento mágnon-fônon é permitido para todos os valores da energia e a contribuição deste processo para o acoplamento suaviza os finos picos.

Na figura 3.1 mostramos o espectro de energia dos mágnons. Vemos que a suavização da energia torna significante para valores de q situados na metade da primeira zona de Brillouin e para valores grandes de α que correspondem ao forte acoplamento spin-fônon. Figura 3.2 mostra o fator de estrutura dinâmico de spin para $\alpha = 0$ para três valores de vetores de onda q . Podemos observar a estrutura de duplo pico discutida no texto. A figura 3.3 é similar à figura 3.2, porém usando $\alpha = 0.1$. Como podemos ver, para $q = 5\pi/6$, ainda detectamos uma leve influência da estrutura de dois picos. Para os outros valores de q temos um pico suave. Desta forma o vetor de onda q tem um papel fundamental na dinâmica de spin.

Como discutido no cap.2, os experimentais muitas vezes apresentam os resultados em termos da meia largura Γ que mede o amortecimento ou o efeito do acoplamento mágnon-fônon na energia dos mágnons e no seu tempo de vida. As figuras 3.4 e 3.5 mostram então a variação deste amortecimento de mágnon como função do vetor de onda q para $\alpha = 0.1$, $\alpha = 0.005$ e $K/m = 0.2$. O primeiro resultado é que a razão da taxa de amortecimento Γ para a frequência de mágnons ω_q satisfaz $\Gamma/\omega_q \ll 1$, conduzindo a excitações de mágnons bem definidas em todas as situações. Vemos que para $\alpha = 0.1$, Γ é aproximadamente constante para pequenos valores de q até $q = 1.5$, aumentando e atingindo um máximo em torno de $q = 2.5$ e então caindo rapidamente. Para $\alpha = 0.005$, Γ é aproximadamente constante para pequenos valores de q até $q = 0.39$, aumentando e atingindo um máximo em $q = 2.0$ e depois caindo rapidamente também.

A figura 3.6 mostra a variação do amortecimento Γ como função do acoplamento mágnon-fônon α para diferentes valores de q . O comportamento de Γ com α também é mostrado nas figuras 3.4 e 3.5.

Finalmente na figura 3.7 apresentamos a variação do amortecimento com a temperatura. A largura de mágnons aumenta com o aumento da temperatura, indicando uma influência significante das excitações de fônons em temperaturas elevadas.

3.4 Conclusão

Em resumo, estudamos o antiferromagneto de Heisenberg quântico unidimensional com $S=1$ e acoplado com fônons [34]. No limite $\alpha = 0$ nossa teoria se reduz à estudada por Pires e Gouvea [28]. O acoplamento da rede e os spins produz interessantes modificações no espectro de excitação. Nosso cálculo indica que o acoplamento spin-fônon é fortemente dependente de q e o acoplamento pode ter uma influência mais significativa a temperaturas elevadas. O fônon absorve energia do mágnon no processo de acoplamento levando a uma suavização deste o qual é mais pronunciado no meio da zona de Brillouin. Outro efeito importante da interação magnon-fônon, o qual também é dependente de q , é a destruição da estrutura de duplo pico presente na ausência deste acoplamento. O amortecimento também varia fortemente com o vetor de onda e tem seu valor máximo em valores de q intermediários. O cálculo da função correlação spin-spin pode ser uma investigação efetiva do acoplamento mágnon-fônon e experimentos de espalhamento de nêutrons devem mostrar o efeito deste acoplamento.

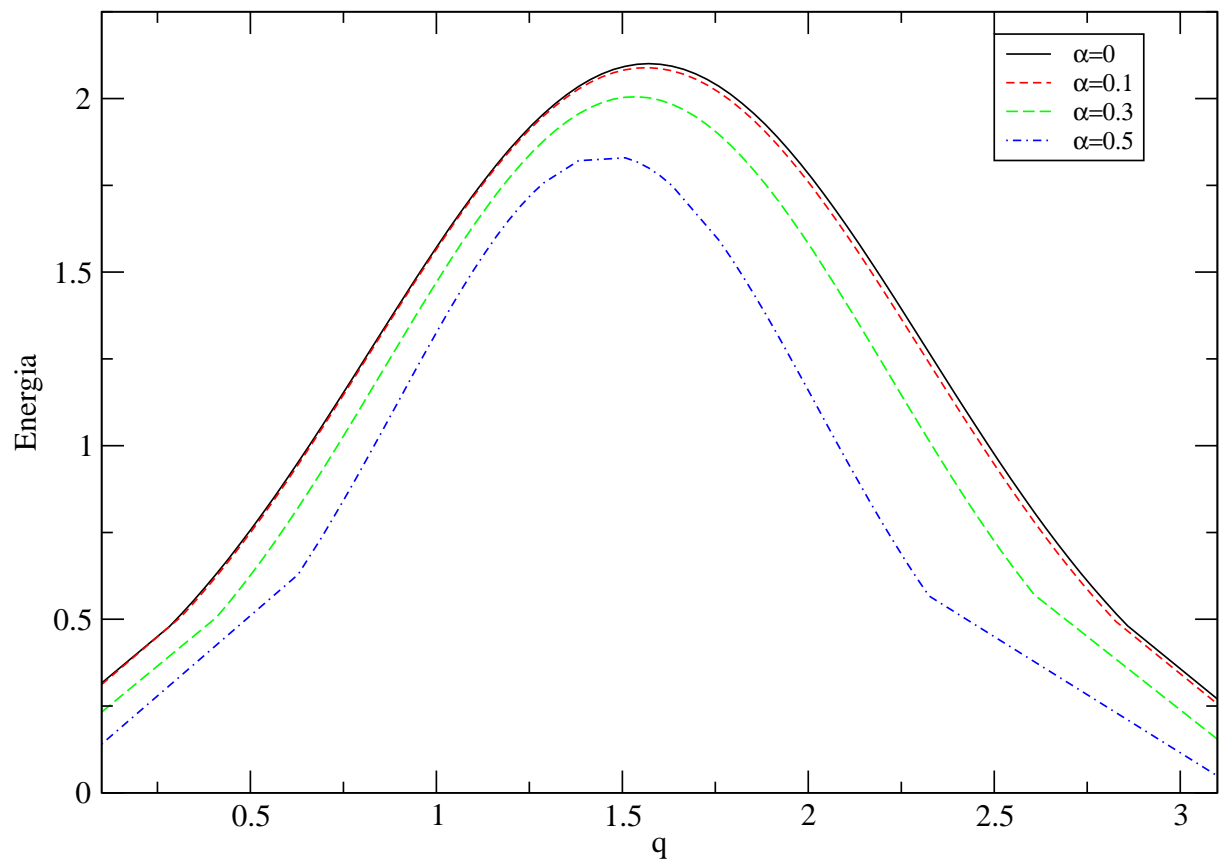


Figura 3.1: Espectro de energia de mágnon para diferentes valores de α , $Energia = \sqrt{[\omega_q^2 - \omega_q \sum_q(\omega_q)]}$.

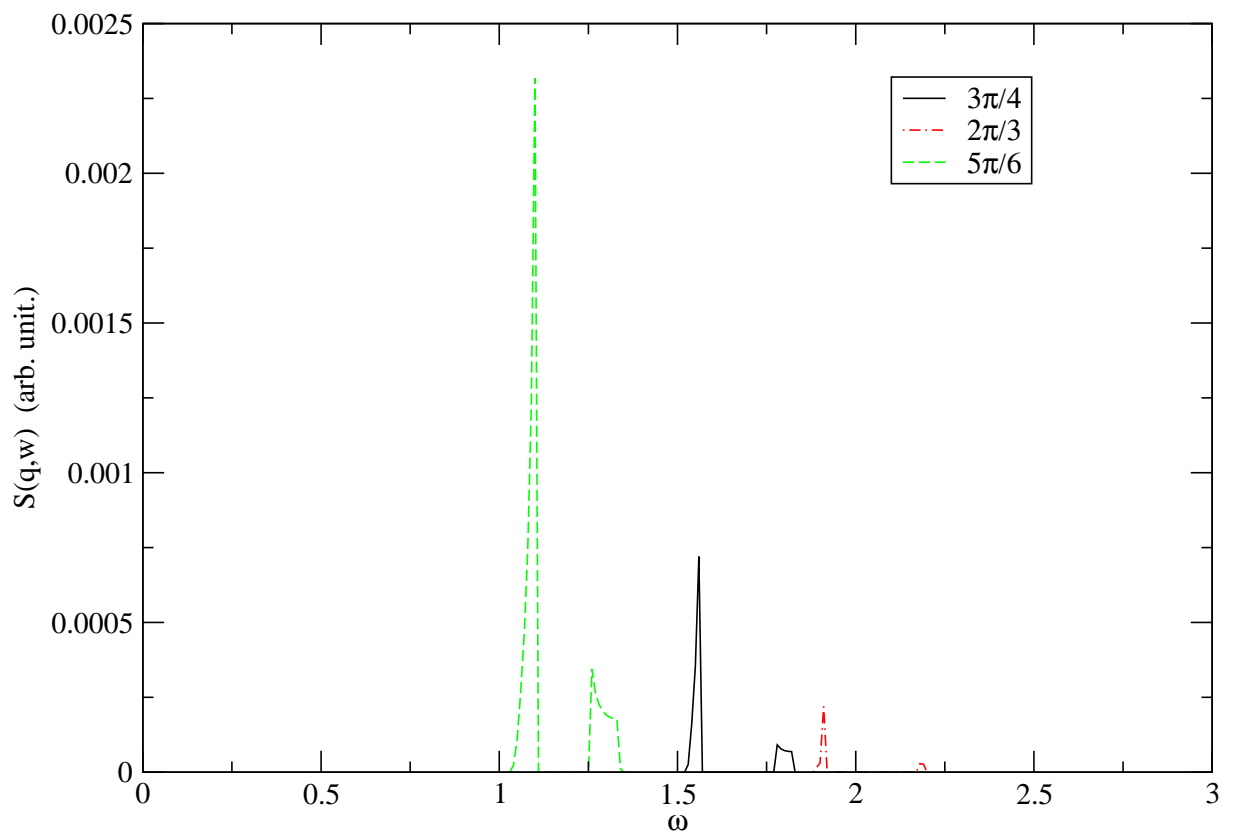


Figura 3.2: Fator de estrutura dinâmico para $\alpha = 0$ e $q = 3\pi/4, 2\pi/3$ e $5\pi/6$

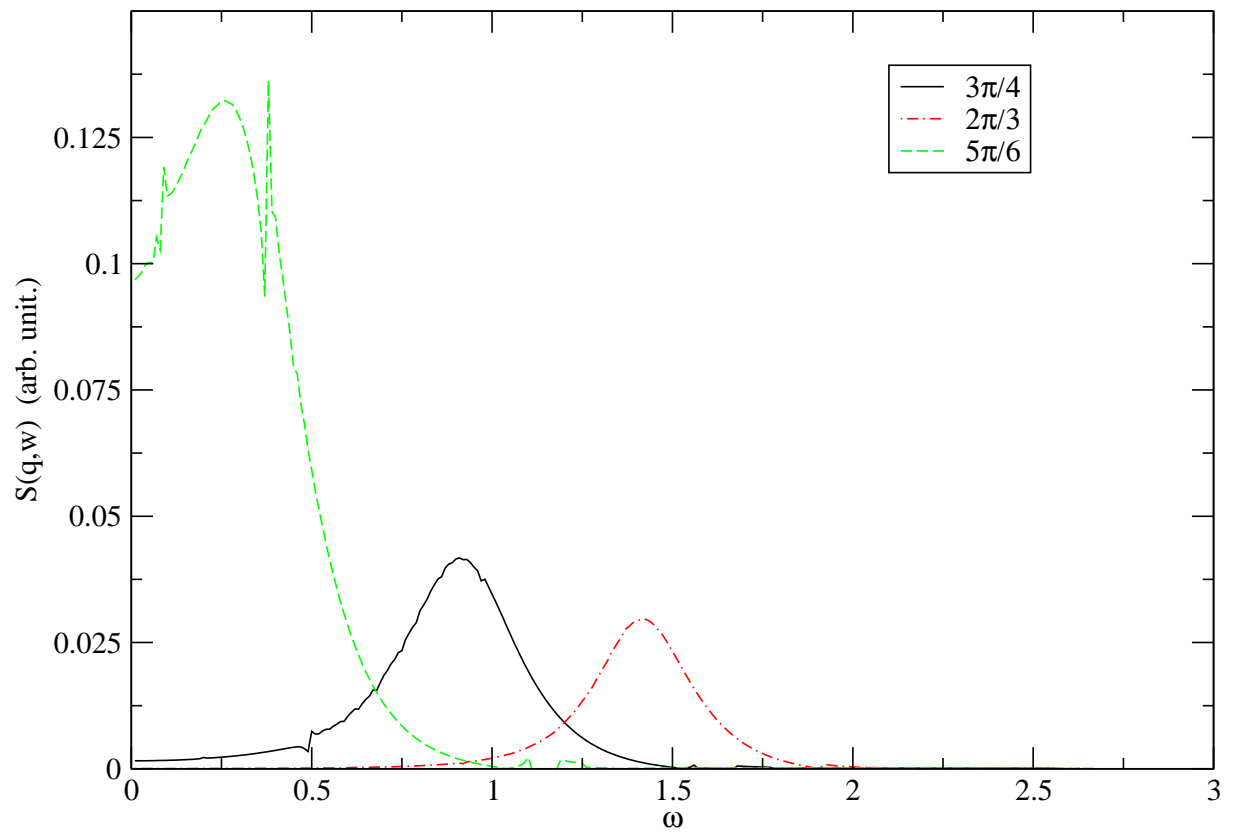


Figura 3.3: Fator de estrutura dinâmico para valores de vetores de onda $q = 2\pi/3, 3\pi/4, 5\pi/6$ com $\alpha = 0.1$ e $K/m = 0.2$ fixos.

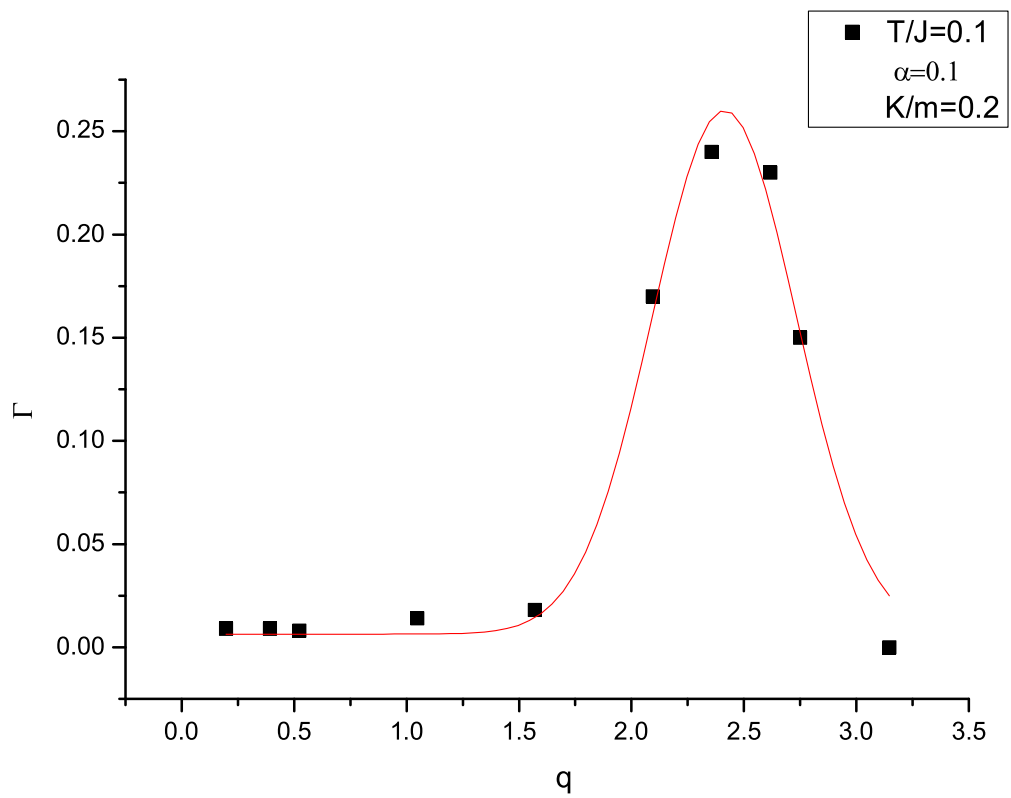


Figura 3.4: Largura média em função do vetor de onda q com os parâmetros $\alpha = 0.1$, $T = 0.1J$ e $K/m = 0.2$ fixos.

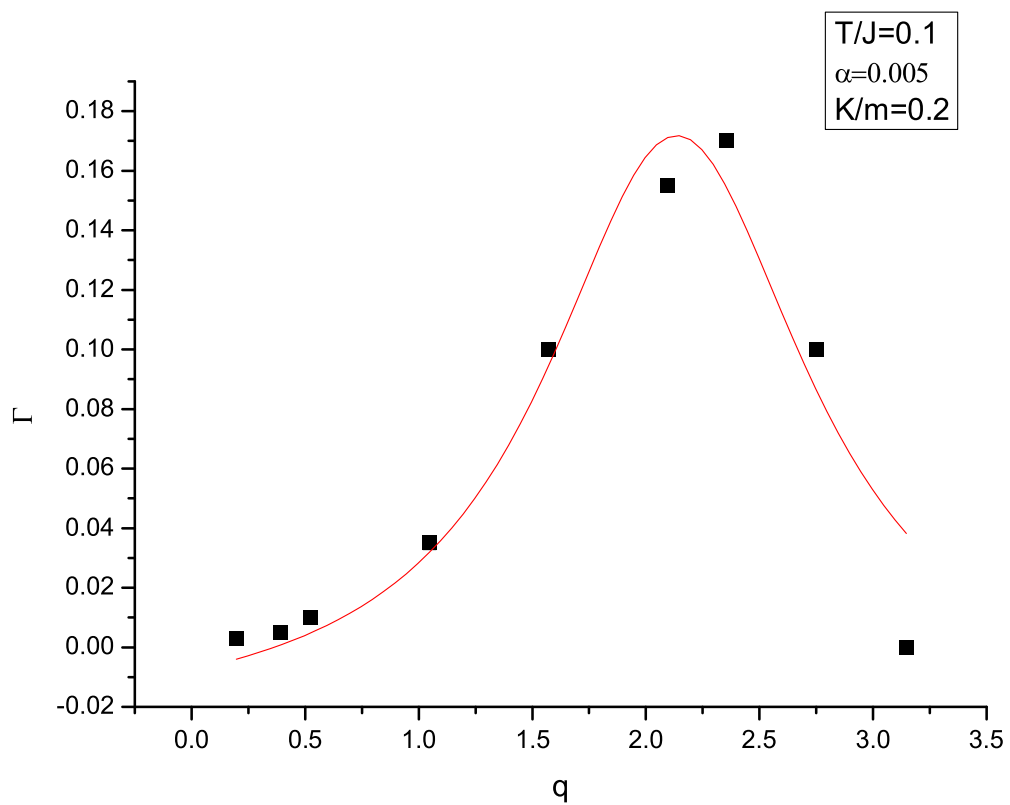


Figura 3.5: Largura média em função do vetor de onda q com os parâmetros $\alpha = 0.005$, $T/J = 0.1$ e $K/m = 0.2$ fixos.

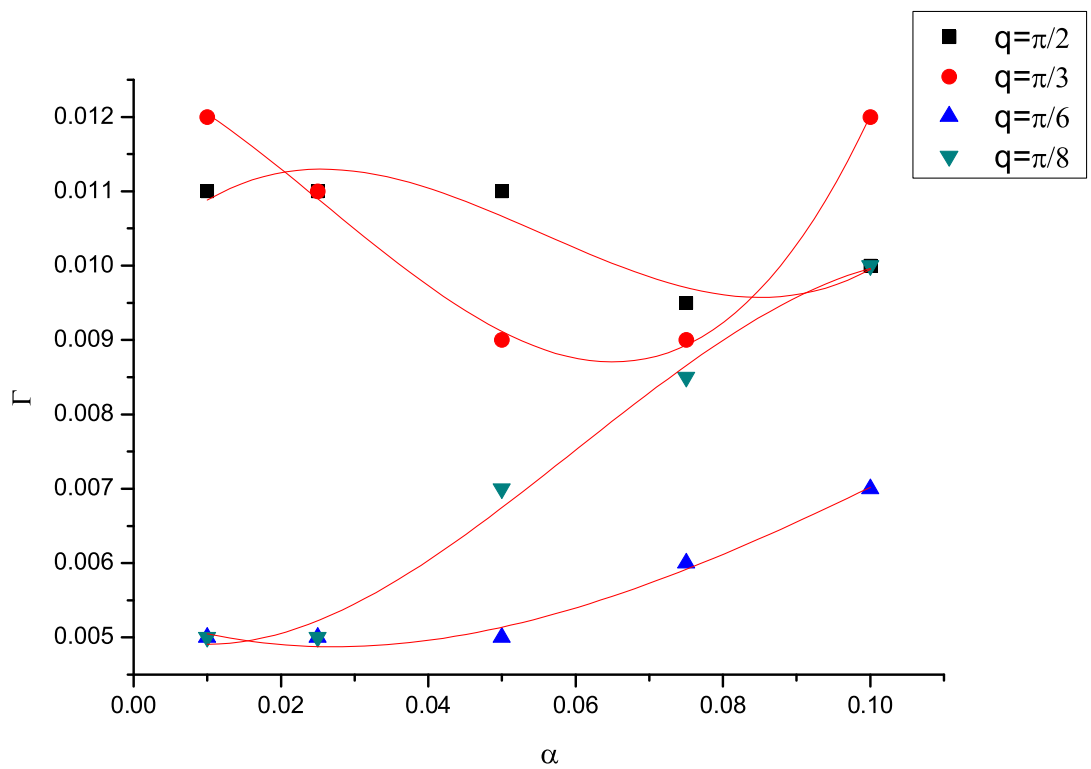


Figura 3.6: Largura média em função do acoplamento spin-fônon α para diferentes valores do vetor de onda q e com $T = 0.1J$, $K/m = 0.2$ fixos.

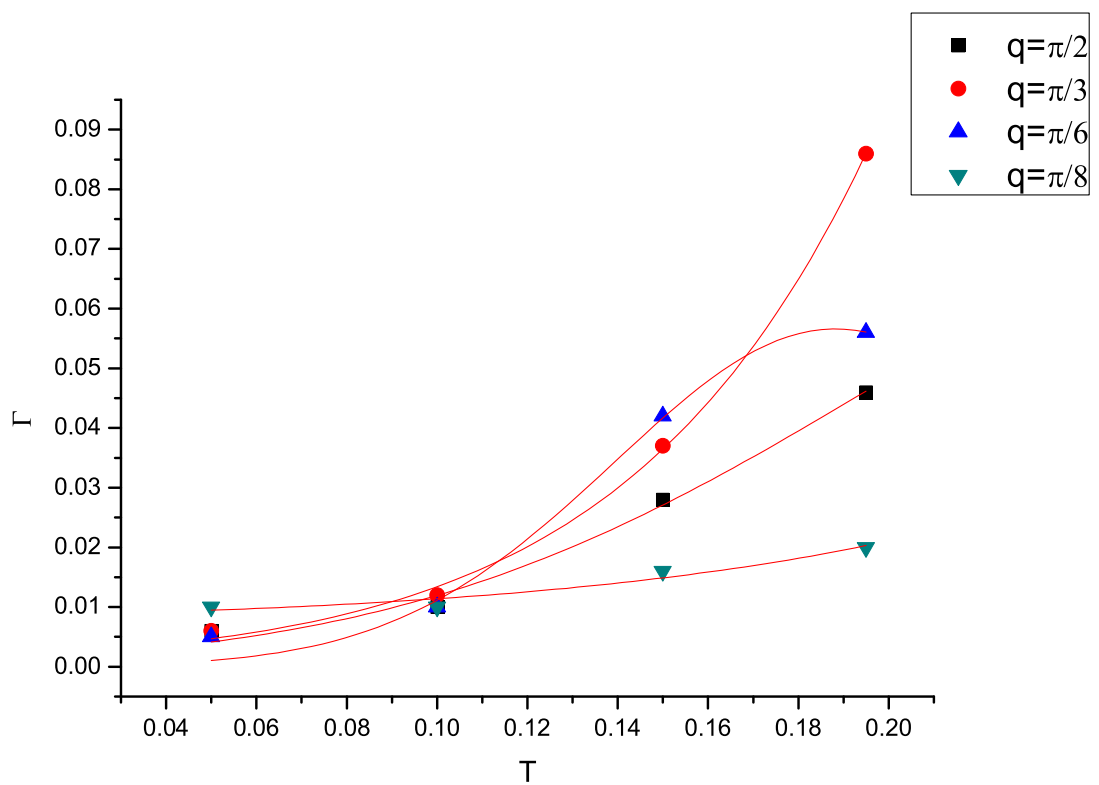


Figura 3.7: Variação da largura média com T para diferentes valores de q com $\alpha = 0.1$ e $K/m = 0.2$ fixos.

Capítulo 4

Teoria de campo médio dos bósons de Schwinger

Vamos tomar como exemplo o modelo XY bidimensional anisotrópico cujo Hamiltoniano é dado por:

$$H = - \sum_{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + D \sum_i (S_i^z)^2, \quad (4.1)$$

sendo D a constante de anisotropia. Este modelo foi estudado por Pires, Lima e Gouvea [35]. O objetivo foi estudar as propriedades estáticas ou termodinâmicas dele usando a técnica dos bósons de Schwinger pois as fases simétricas do modelo acima são mais fáceis de descrever usando uma representação na qual a invariância rotacional do Hamiltoniano é manifestada. Fazemos uma transformação dos operadores de spin definida por:

$$S_i^+ = a_i^\dagger b_i \quad S_i^- = a_i b_i^\dagger \quad S_i^z = \frac{1}{2}(a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i). \quad (4.2)$$

onde a e b são os bósons de Schwinger, com uma condição de vínculo dada por:

$$a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i = 2S \quad (4.3)$$

ou $n_a + n_b = 2S$ sendo n_a e n_b , os número de ocupação de bósons a e b respectivamente. A transformação dos operadores de spin acima é canônica pois as componentes de spin satisfazem

$$[S^\alpha, S^\beta] = i\varepsilon^{\alpha\beta\gamma} S^\gamma. \quad (4.4)$$

Bósons de Schwinger são úteis para o cálculo de elementos de matrizes de operadores de spin, uma vez que eles não contém raízes quadradas, ao contrário dos bósons de Holstein-Primakoff. Outra diferença é que os bósons de Schwinger fornecem uma representação simétrica no espaço de spin e os bósons de Holstein-Primakoff só na direção S^z .

Aplicando a transformação definida pelas eqs.(4.2) no Hamiltoniano (4.1) junto com a condição de vínculo dada por (4.3) temos:

$$H = H_0 + H_D \quad (4.5)$$

onde

$$H_0 = \frac{1}{2} \sum_{ij} (a_i^\dagger a_j b_i b_j^\dagger + a_i a_j^\dagger b_i^\dagger b_j) \quad (4.6)$$

$$H_D = \frac{D}{4} \sum_i (a_i^\dagger a_i a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i b_i^\dagger b_i). \quad (4.7)$$

Introduzindo os operadores de ligação definidos por:

$$A_{ij} = a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j \quad B_{ij} = a_i b_j + b_i a_j \quad (4.8)$$

e usando a relação (4.2) obtemos:

$$H_0 = \frac{1}{4} \sum_{ij} (A_{ij}^\dagger A_{ij} + B_{ij}^\dagger B_{ij}) + \text{constantes} \quad (4.9)$$

A seguir fazemos o desacoplamento de campo médio dado por:

$$A_{ij}^\dagger A_{ij} \rightarrow \langle A_{ij}^\dagger \rangle A_{ij} + \langle A_{ij} \rangle A_{ij}^\dagger - \langle A_{ij}^\dagger \rangle \langle A_{ij} \rangle. \quad (4.10)$$

Supondo que $A = \langle A_{ij}^\dagger \rangle = \langle A_{ij} \rangle$ e que B tenha forma idêntica à de A , logo:

$$H_0 = \frac{1}{4} \sum_{ij} [A(A_{ij} + A_{ij}^\dagger) + B(B_{ij} + B_{ij}^\dagger) - (A^2 + B^2)]. \quad (4.11)$$

Como $\sum_{ij} (\text{const}) = \frac{Nz(\text{const})}{2}$, onde N é o número de sítios e z o número de primeiros vizinhos temos:

$$\begin{aligned} H_0 = \frac{1}{4} \sum_{ij} [& A(a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j + a_i a_j^\dagger + b_i b_j^\dagger) \\ & + B(a_i b_j + b_i a_j + a_i^\dagger b_j^\dagger + b_i^\dagger a_j^\dagger)] \\ & - \frac{Nz}{8} (A^2 + B^2). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Tomamos as transformadas de Fourier $a_k = \sum_l e^{-ikl} a_l$ $a_k^\dagger = \sum_l e^{ikl} a_l^\dagger$ e notemos que

$$\sum_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i\delta} \quad \sum_k a_k^\dagger a_k = \sum_k a_{-k}^\dagger a_{-k} \quad [a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'}. \quad (4.13)$$

Seja

$$\gamma_k = \frac{1}{z} \sum_{\delta} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}} \quad (4.14)$$

então

$$\begin{aligned} H_0 = \frac{1}{8} \sum_k \{ & \gamma_k A z (a_k^\dagger a_k + a_{-k}^\dagger a_{-k} + b_k b_k^\dagger + b_{-k} b_{-k}^\dagger) \\ & + \gamma_k B z (a_k b_{-k} + a_{-k} b_k + a_k^\dagger b_{-k}^\dagger + a_{-k}^\dagger b_k^\dagger) \} \\ & + \frac{1}{4} \sum_k (\gamma_k A z) - \frac{Nz}{8} (A^2 + B^2). \end{aligned} \quad (4.15)$$

Passemos agora ao termo H_D definido pela eq.(4.7). Seguindo a sugestão de Q Jiang et al.[36] escrevemos (4.7) usando (4.3) o que fornece:

$$H_D = -\frac{D}{4} \sum_i (a_i^\dagger b_i^\dagger a_i b_i + a_i b_i a_i^\dagger b_i^\dagger). \quad (4.16)$$

Jiang introduz o campo de sítio definido como:

$$P = \langle a_i^\dagger b_i^\dagger \rangle = \langle a_i b_i \rangle. \quad (4.17)$$

Temos então:

$$a_i^\dagger b_i^\dagger a_i b_i \rightarrow \langle a_i^\dagger b_i^\dagger \rangle a_i b_i + \langle a_i b_i \rangle a_i^\dagger b_i^\dagger - P^2. \quad (4.18)$$

Assim

$$H_D = \frac{DP}{4} \sum_k (a_{-k}^\dagger b_k^\dagger + a_k^\dagger b_{-k}^\dagger + a_k b_{-k} + a_{-k} b_k) + \frac{NDP^2}{2}. \quad (4.19)$$

Introduzindo a relação de vínculo via *multiplicador de Lagrange* dada por:

$$H' = \lambda \sum_i (a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i - 2S),$$

no Hamiltoniano (4.5), temos finalmente

$$\begin{aligned} H = \frac{1}{8} \sum_k \{ & (\gamma_k A z + \lambda) (a_k^\dagger a_k + a_{-k}^\dagger a_{-k} + b_k b_k^\dagger + b_{-k} b_{-k}^\dagger) \\ & + (\gamma_k B z - 2DP) (a_k b_{-k} + a_{-k} b_k + a_k^\dagger b_{-k}^\dagger + a_{-k}^\dagger b_k^\dagger) \} \\ & + \frac{1}{4} \sum_k \gamma_k + \frac{Nz}{8} (A^2 + B^2) - 2N \left(S + \frac{1}{2} \right) \lambda + \frac{NDP^2}{2}. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Fazemos agora a transformação de Bogoliubov

$$a_k^\dagger = u_k \alpha_k - v_k \beta_k \quad b_{-k} = -v_k \alpha_k + u_k \beta_k, \quad (4.21)$$

com a restrição $u_k^2 - v_k^2 = 1$ para que as relações de comutação sejam satisfeitas.

Definindo:

$$R_k = \gamma_k A z + \lambda \quad T_k = \gamma_k B z - 2DP \quad (4.22)$$

encontramos:

$$u_k = \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} (R_k + \omega_k)^{1/2} \quad v_k = \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} (R_k - \omega_k)^{1/2}, \quad (4.23)$$

com

$$\omega_k = \sqrt{R_k^2 - T_k^2} \quad (4.24)$$

que anula os termos cruzados.

O termo harmônico fica:

$$\sum_k \omega_k (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \beta_k^\dagger \beta_k + 1) \quad (4.25)$$

onde

$$\langle \alpha_k^\dagger \alpha_k \rangle = \langle \beta_k^\dagger \beta_k \rangle = n_k = \frac{1}{e^{\beta\omega_k} - 1}. \quad (4.26)$$

Calculando a energia livre para um conjunto de osciladores temos:

$$F = \frac{1}{\beta} \sum_k \ln(1 - e^{-\beta\omega_k}). \quad (4.27)$$

Aplicamos o método dos multiplicadores de Lagrange construindo o funcional

$$f_{MF} = \frac{F_{MF}}{2N}$$

$$\begin{aligned}
f_{MF} = & \frac{1}{8}(A^2 + B^2)z - 2\left(S + \frac{1}{2}\right)\lambda + \frac{NDP^2}{2} - \frac{Az}{4N} \sum_k \gamma_k \\
& + \frac{1}{N} \sum_k \omega_k + \frac{2}{\beta N} \sum_k \ln(1 - e^{-\beta\omega_k})
\end{aligned} \tag{4.28}$$

e achando os extremos dele

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f_{MF}}{\partial \lambda} &= 0 \\
-2\left(S + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{N} \sum_k \left(\frac{\partial \omega_k}{\partial \lambda} + \frac{2e^{-\beta\omega_k}}{1 - e^{-\beta\omega_k}} \frac{\partial \omega_k}{\partial \lambda} \right) &= 0 \\
\left(S + \frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{2N} \sum_k \frac{R_k}{\omega_k} \coth\left(\frac{\beta\omega_k}{2}\right).
\end{aligned} \tag{4.29}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f_{MF}}{\partial A} &= 0 \\
\frac{A}{4} &= \frac{1}{N} \sum_k \left[\frac{1}{4} - \frac{R_k}{\omega_k} \coth\left(\frac{\beta\omega_k}{2}\right) \right] \gamma_k
\end{aligned} \tag{4.30}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f_{MF}}{\partial B} &= 0 \\
B &= \frac{4}{N} \sum_k \frac{T_k \gamma_k}{\omega_k} \coth\left(\frac{\beta\omega_k}{2}\right)
\end{aligned} \tag{4.31}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f_{MF}}{\partial P} &= 0 \\
P &= \frac{2}{N} \sum_k \frac{T_k}{\omega_k} \coth\left(\frac{\beta\omega_k}{2}\right).
\end{aligned} \tag{4.32}$$

As eqs.(4.29) a (4.32) formam um conjunto de equações autoconsistentes para a determinação das constantes A , B , P e λ .

Calculamos a função correlação estática para o modelo, onde obtemos para a componente no plano xy :

$$\langle S_q^\perp S_{-q}^\perp \rangle = \frac{1}{2} \sum_k \left\{ \frac{[(n_k + 1)(n_{k+q} + 1) + n_k n_{k+q}]}{\omega_k \omega_{k+q}} (|R_k R_{k+q}| + |T_k T_{k+q}|) \right\}, \quad (4.33)$$

onde $\langle S_q^\perp S_{-q}^\perp \rangle = \langle S_q^x S_{-q}^x + S_q^y S_{-q}^y \rangle$, e para a componente z:

$$\langle S_q^z S_{-q}^z \rangle = \frac{1}{2} \sum_k \left\{ \frac{[(n_k + 1)n_{k+q} + n_k(n_{k+q} + 1)]}{\omega_k \omega_{k+q}} (|R_k R_{k+q}| - |T_k T_{k+q}|) \right\}. \quad (4.34)$$

Em seguida refizemos os cálculos de De Leone apresentados na Ref.[37] onde foi estudado o modelo de Heisenberg anisotrópico dado pelo Hamiltoniano:

$$H = \sum_n (S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y + \Delta S_n^z S_{n+1}^z).$$

As equações autoconsistentes obtidas para este modelo empregando o mesmo procedimento anterior, isto é, usando a representação dos bósons de Schwinger e minimizando a energia livre são:

$$\begin{aligned} A &= \frac{(1 - \Delta)}{2} \sum_k \left[1 - \frac{\lambda + Az\gamma_k}{\omega_k} \coth \frac{1}{2}\beta\omega_k \right] \frac{\gamma_k}{2}, \\ \frac{2}{z} &= \frac{(1 + \Delta)}{2} \sum_k \frac{\gamma_k}{\omega_k} \coth \frac{1}{2}\beta\omega_k, \\ \frac{(S + 1)}{2} &= \frac{1}{2} \sum_k \frac{\lambda + Az\gamma_k}{\omega_k} \coth \frac{1}{2}\beta\omega_k. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Obtemos para A , B e λ :

$$A = -0.391 \quad B = -0.01275 \quad \lambda = 0.856,$$

onde $J_D = \sqrt{J^2 + D^2}$, $\Delta = 1/J_D = 0.75$, $D = 0.8$ e $J = 1$.

Usaremos estes resultados a seguir no cap.5 para o estudo da dinâmica do modelo de Moriya-Dzyaloshinskii unidimensional descrito pelo Hamiltoniano:

$$H = J \sum_n \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} + D \sum_n (-1)^n (S_n^x S_{n+1}^y - S_n^y S_{n+1}^x). \quad (4.36)$$

Capítulo 5

Dinâmica de spin no antiferromagneto unidimensional $S=1$ com interação de Dzyaloshinskii-Moriya

5.1 Introdução

O acoplamento de spin antissimétrico foi sugerido primeiramente por Dzyaloshinskii [38] para explicar o mecanismo do fraco ferromagnetismo em cristais antiferromagnéticos da sua simetria do estado fundamental, sendo mais tarde obtido teoricamente por Moriya [39]. A interação de Dzyaloshinskii-Moriya (DM) é proporcional ao produto vetorial dos spins interagentes e é permitida pela simetria de estruturas cristalinas não cêntricas. A origem da interação DM é devida às correções relativísticas do acoplamento spin-órbita à interação de exchange [40], [41] e [42]. A dinâmica da cadeia de spin XY de spin $1/2$ com uma interação DM foi recentemente estudada por Derzhko [43] e [44]. Alguns artigos recentes tratando do modelo com $S = 1/2$ são dados em [45] e [46].

Há muitos anos atrás, Xia e Reiseborough [47] obtiveram a função correlação dinâmica spin-spin para o modelo unidimensional com uma interação DM usando uma aproximação de onda de spin linear. Na ausência de um campo magnético externo seus resultados para o fator de estrutura dinâmico $S(q, \omega)$ são apenas funções delta de Dirac. Eles usaram um cálculo de onda de spin padrão e não levaram em conta o gap de Haldane. Neste sentido, nossos cálculos são mais avançados. O gap de Haldane muda o estado fundamental de um ordenamento de Néel para um estado de líquido de spin.

Neste capítulo estudaremos as propriedades dinâmicas do antiferromagneto unidimensional $S = 1$ com uma interação de Dzyaloshinskii-Moriya. Na seção 5.2, descrevemos o formalismo usado no cálculo do fator de estrutura dinâmico, na seção 5.3 discutimos a dinâmica de spin e apresentamos os resultados e por último na seção 5.4 apresentamos as conclusões desta parte.

5.2 Formalismo

Iniciamos considerando o Hamiltoniano de spin com $S = 1$:

$$H = J \sum_{n=1}^N \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} + \sum_{n=1}^N (-1)^{n+1} \vec{D} \cdot (\vec{S}_n \times \vec{S}_{n+1}). \quad (5.1)$$

Por conveniência, escolhemos o vetor \vec{D} na direção da cadeia, a qual está ao longo do eixo z . O plano fácil é então o plano xy . Há evidências de que o Hamiltoniano acima deve fornecer uma descrição apropriada para diversos compostos [48]. A magnitude da interação DM, é geralmente esperada ser pequena em comparação a J . Porém, em alguns compostos esta interação pode atingir valores importantes [49]. Um exemplo importante de uma cadeia DM pura é o composto $RbCoCl_3 \cdot 2H_2O$ [50] com $J = 0$ e $DS^2 = 59K$.

Calculamos o fator de estrutura dinâmico no plano apenas. A componente fora do plano resulta da flutuação de S_q^z em torno do eixo z e esta componente é uma linha estreita no espectro.

Fazendo a seguinte transformação canônica [49]

$$\begin{aligned} \tilde{S}_n^x &= \cos(\alpha) S_n^x - (-1)^n \sin(\alpha) S_n^y, \\ \tilde{S}_n^y &= (-1)^n \sin(\alpha) S_n^x + \cos(\alpha) S_n^y, \\ \tilde{S}_n^z &= S_n^z, \end{aligned} \quad (5.2)$$

com $\tan \alpha = D/J$, o Hamiltoniano (5.1) pode ser escrito como:

$$H = \sum_n [J \tilde{S}_n^z \tilde{S}_{n+1}^z + J_D (\tilde{S}_n^x \tilde{S}_{n+1}^x + \tilde{S}_n^y \tilde{S}_{n+1}^y)], \quad (5.3)$$

onde $J_D = \sqrt{J^2 + D^2}$.

Considerando $J = 1$ e definindo $\Delta = 1/J_D$, podemos escrever (5.3) como:

$$H = \sum_n (\tilde{S}_n^z \tilde{S}_{n+1}^z + \tilde{S}_n^x \tilde{S}_{n+1}^x + \tilde{S}_n^y \tilde{S}_{n+1}^y + \Delta \tilde{S}_n^z \tilde{S}_{n+1}^z). \quad (5.4)$$

O Hamiltoniano acima foi estudado por De Leone e Zimanyi [37] usando o formalismo dos bósons de Schwinger o qual é particularmente adequado para descrever o estado desordenado de magnetos quânticos de baixa dimensão.

Na representação dos bósons de Schwinger [3] os operadores de spin \mathbf{S}_n são substituídos pelos bósons a_n e b_n como segue:

$$\mathbf{S}_n^+ = a_n^\dagger b_n, \quad \mathbf{S}_n^- = a_n b_n^\dagger, \quad \mathbf{S}_n^z = \frac{1}{2}(a_n^\dagger a_n - b_n^\dagger b_n), \quad (5.5)$$

com o vínculo de que apenas $2S$ bósons podem ocupar cada sítio:

$$a_n^\dagger a_n + b_n^\dagger b_n = 2S. \quad (5.6)$$

Nós assumimos que a rede é bipartida onde em uma subrede fazemos a transformação unitária $a \rightarrow -b$, $b \rightarrow a$, $\mathbf{S}^+ = -ab^\dagger$. Agora escrevemos (5.1) como

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} [a_i^\dagger b_j^\dagger a_j b_i + \text{H.c.}] - \Delta [a_i^\dagger a_j^\dagger a_i a_j + b_i^\dagger b_j^\dagger b_i b_j]. \quad (5.7)$$

Introduzindo as variáveis de ligação

$$A_{ij} = (a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j), \quad B_{ij} = (a_i b_j + b_i a_j), \quad (5.8)$$

o sistema pode ser estudado usando uma representação de integral de caminho e efetuando uma transformação de Hubbard-Stratonovich. Os detalhes são apresentados na Ref.[3] e aqui apresentamos apenas o material necessário para o nosso cálculo.

Usando a transformação de Bogoliubov:

$$\alpha_k = u_k a_k^\dagger + v_k b_{-k}, \quad \beta_k = v_k a_k^\dagger + u_k b_{-k}, \quad (5.9)$$

onde a_k e b_k são as transformadas de Fourier de a_n e b_n , é mostrado na Ref.[37] que

$$\begin{aligned} u_k &= \frac{1}{2\omega_k} (\lambda + \gamma_k A z + \omega_k)^{1/2} \\ v_k &= \frac{1}{2\omega_k} (\lambda + \gamma_k A z - \omega_k)^{1/2}, \end{aligned} \quad (5.10)$$

fornecendo a relação de dispersão:

$$\omega_k = [(\lambda + Az\gamma_k)^2 - (Bz\gamma_k)^2]^{1/2}, \quad (5.11)$$

onde A , B e λ são constantes obtidas resolvendo numericamente as três equações auto-consistentes dadas em [37], z é o número de primeiros vizinhos e $\gamma_k = \frac{1}{z} \sum_{\delta} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}}$, onde $\vec{\delta}$ é um vetor que liga o sítio aos seus primeiros vizinhos.

5.3 Dinâmica de spin

Estudamos a dinâmica de spin seguindo o procedimento de Auerbach e Arovas [4] no seu estudo do antiferromagneto de rede quadrada. O fator de estrutura dinâmico spin-spin no plano é dado por:

$$S(q, \omega) = \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(qn - \omega t)} \langle S_0^\perp(t) S_n^\perp(0) \rangle, \quad (5.12)$$

onde $\langle S_{-q}^\perp(t) S_q^\perp(0) \rangle = \langle S_{-q}^x(t) S_q^x(0) + S_{-q}^y(t) S_q^y(0) \rangle$, sendo que a expressão obtida usando o formalismo dos bósons de Schwinger foi:

$$\langle S_{-q}^\perp(t) S_q^\perp(0) \rangle = \frac{1}{2} \sum_k \left[\frac{(n_k + 1)(n_{k+q} + 1)}{\omega_k \omega_{k+q}} (|R_k R_{k+q}| + |T_k T_{k+q}|) e^{(\omega_k + \omega_{k+q})t} + \frac{n_k n_{k+q}}{\omega_k \omega_{k+q}} (|R_k R_{k+q}| + |T_k T_{k+q}|) e^{-(\omega_k + \omega_{k+q})t} \right].$$

$S(q, \omega)$ é obtido da transformada de Fourier desta expressão, segundo eq.(5.12), sendo dado então por:

$$S(q, \omega) = \frac{1}{2} \sum_k \frac{(n_k + \Theta(\omega))(n_{k+q} + \Theta(\omega))}{\omega_k \omega_{k+q}} (|R_k R_{k+q}| + |T_k T_{k+q}|) \delta(\omega_k + \omega_{k+q} - |\omega|), \quad (5.13)$$

onde

$$R_k = \lambda + Az\gamma_k, \quad T_k = Bz\gamma_k \quad \text{e} \quad \Theta(\omega) \quad \text{é a função degrau.}$$

O módulo e a função degrau na expressão acima são uma consequência do fato de termos duas soluções simétricas, uma para $\omega > 0$ e a outra para $\omega < 0$. Como nos nossos cálculos consideramos $\omega > 0$ logo, apenas o resultado correspondente a $\omega > 0$ é considerado.

Fazendo a rotação inversa da eq.(5.2) obtemos da eq.(5.12)

$$S^\perp(q, \omega) = \tilde{S}^\perp(q, \omega) \cos^2(\alpha/2) + \tilde{S}^\perp(q + \pi, \omega) \sin^2(\alpha/2), \quad (5.14)$$

onde usamos o fato que $(-1) = e^{i\pi}$. Os termos fora da diagonal $S_{yx}(q, \omega)$ e $S_{xy}(q, \omega)$ são nulos. Aqui $\tilde{S}^\perp(q, \omega)$ é o fator de estrutura dinâmico para o Hamiltoniano (5.4) dado por (5.13).

Fizemos os nossos cálculos com o valor $\Delta = 0.75$ o qual corresponde a $D = 0.8$. Usamos os resultados numéricos que foram obtidos para as equações autoconsistentes, eq.(4.35):

$$\begin{aligned} A &= \frac{(1 - \Delta)}{2} \sum_k \left[1 - \frac{\lambda + Az\gamma_k}{\omega k} \coth \frac{1}{2}\beta\omega_k \right] \frac{\gamma_k}{2}, \\ \frac{2}{z} &= \frac{(1 + \Delta)}{2} \sum_k \frac{\gamma_k}{\omega_k} \coth \frac{1}{2}\beta\omega_k, \\ \frac{(S + 1)}{2} &= \frac{1}{2} \sum_k \frac{\lambda + Az\gamma_k}{\omega_k} \coth \frac{1}{2}\beta\omega_k, \end{aligned}$$

sendo estes valores para A , B e λ apresentados no Cap.4:

$$A = -0.391 \quad B = -0.01275 \quad \lambda = 0.856.$$

Para os modelos de Heisenberg uni [48] e bidimensional [4] temos dois termos em $S(q, \omega)$. O primeiro termo corresponde ao espalhamento normal de ondas de spin, enquanto a segunda contribuição representa os processos de criação e aniquilação de duas ondas de spin. Em ambos os sistemas há um gap entre as contribuições normal e anômala e conseqüentemente obtemos uma estrutura de duplo pico.

Figuras 5.1 e 5.2 mostram $S^\perp(q, \omega)$ como função de ω para $\Delta = 0.75$, $T = 0.1J$, $S = 1$ e vetores de onda $q = \pi/2$, $q = \pi/4$ e $q = \pi/16$. Como podemos ver a largura de linha aumenta com q até atingir um valor máximo em $q = \pi/2$ e depois decresce. Para $q = \pi/4$ há um segundo pico, menor, que é uma conseqüência do comportamento da função $\Omega(q, k) = \omega_k + \omega_{k+q}$.

Na figura 5.3 temos o comportamento de $\Omega(q, k)$ em função de k para alguns valores de q fixo. Observamos que para $q = \pi/4$ há uma região entre $k = 0.78$ e $k = 1.57$ onde a concavidade da curva muda abruptamente. Quando ω está dentro desta região, $\Omega(q, k)$

tem um número maior de raízes do que fora dela e conseqüentemente $S(q, \omega)$, dado pela equação (5.13), aumenta abruptamente, pois este tem uma contribuição para cada raiz do argumento da função delta de Dirac, gerando assim o segundo pico, menor, observado. Para $q = \pi/2$, $q = \pi/8$ e $q = \pi/16$ esta mudança abrupta da concavidade não ocorre e temos uma estrutura de apenas um pico em $S(q, \omega)$.

5.4 Conclusão

Como conclusão desta parte, estudamos o antiferromagneto unidimensional $S = 1$ com a interação de Dzyaloshinskii-Moriya [51]. Nossa teoria pode ser comparada com experimentos de espalhamento de nêutrons quando os dados estiverem disponíveis para o modelo estudado aqui. Obtemos uma estrutura com um único pico para o fator de estrutura dinâmico porque, no nosso caso, temos apenas a contribuição normal para $S(q, \omega)$ correspondendo ao espalhamento normal das excitações de ondas de spin. Para $q = \pi/4$, obtemos um segundo pico, menor, que é devido ao comportamento do argumento da função delta de Dirac (5.13). A largura de linha aumenta com q até $q = \pi/2$ e depois decresce como o esperado. A interação DM está presente em vários compostos [52]. Assim, acreditamos que o Hamiltoniano (5.1) possa descrevê-los com proximidade do real. Um tratamento mais realístico, seria a inclusão de uma anisotropia de íon simples porém, a teoria de campo médio de bóson de Schwinger para este caso fica mais complicada.

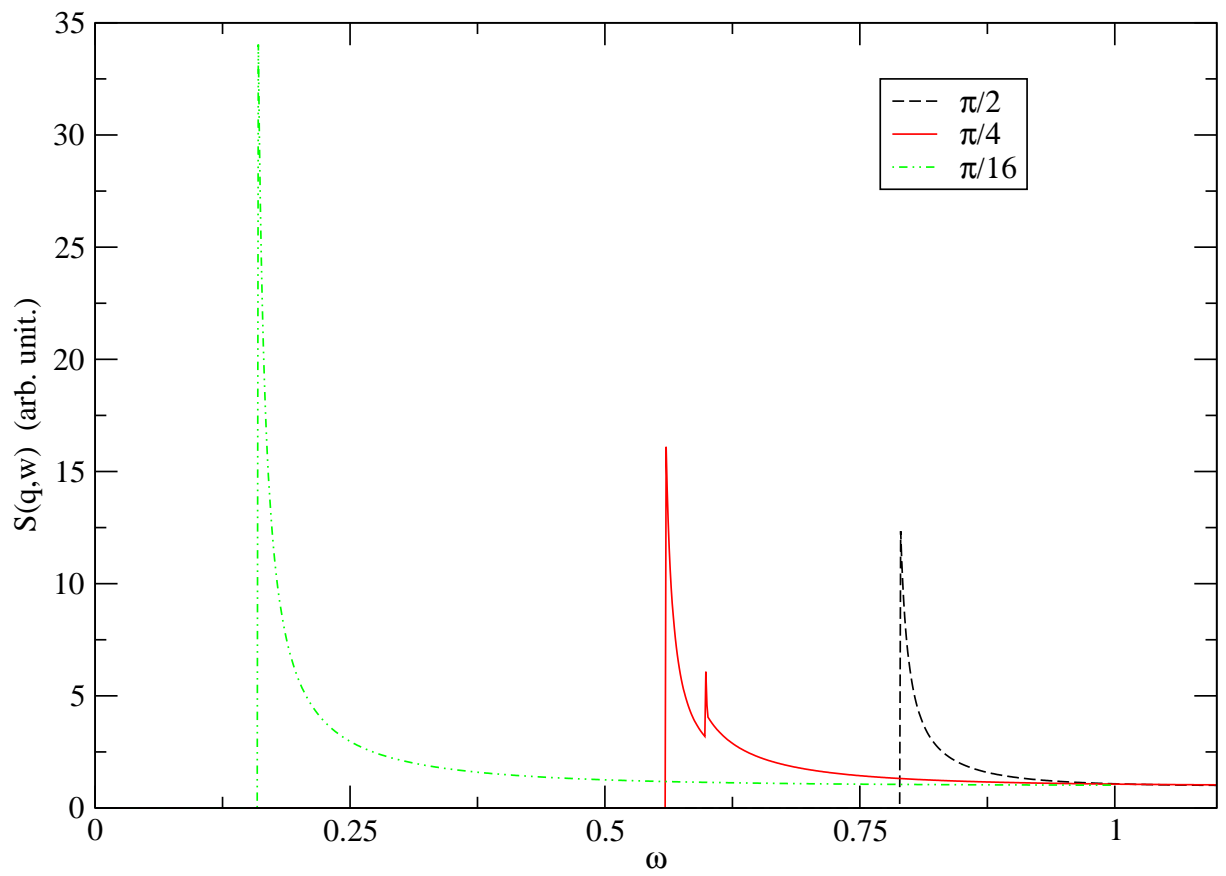


Figura 5.1: Fator de estrutura dinâmico para valores de vetor de onda $q = \pi/2, \pi/4, \pi/16$ com $T/J = 0.1$ ($J=1$) e $D = 0.8$ fixos.

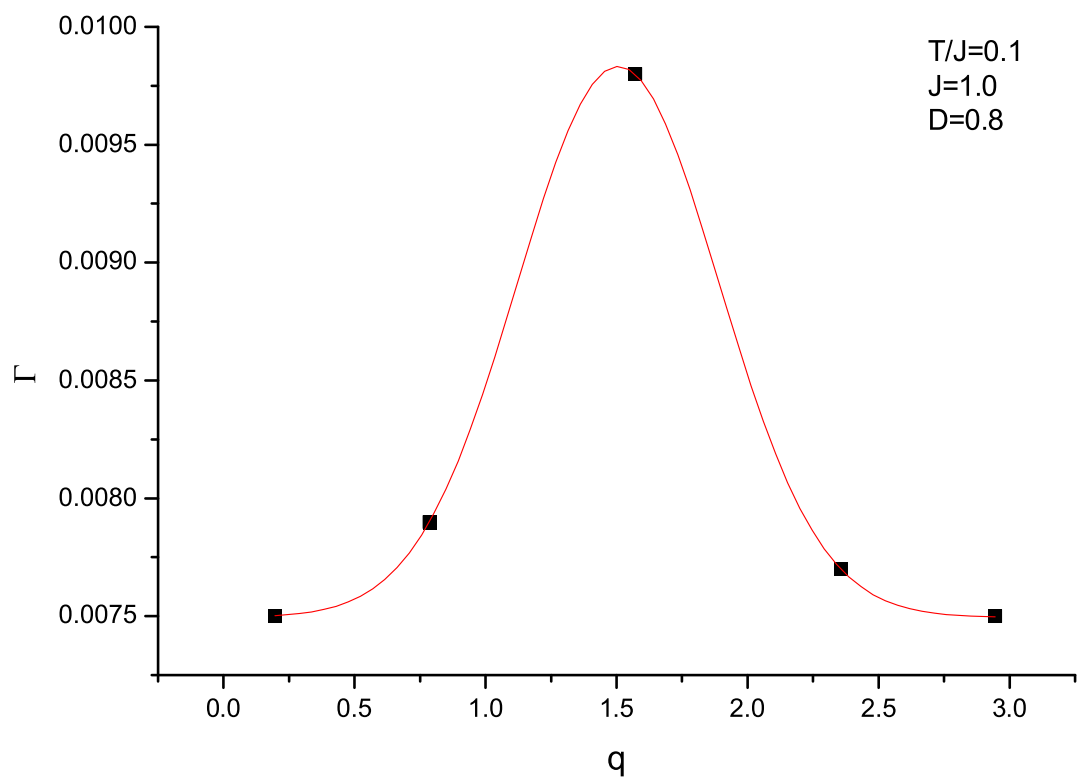


Figura 5.2: Dependência de Γ (meia largura) com q para os parâmetros $T/J = 0.1$ ($J=1$) e $D = 0.8$ fixo.

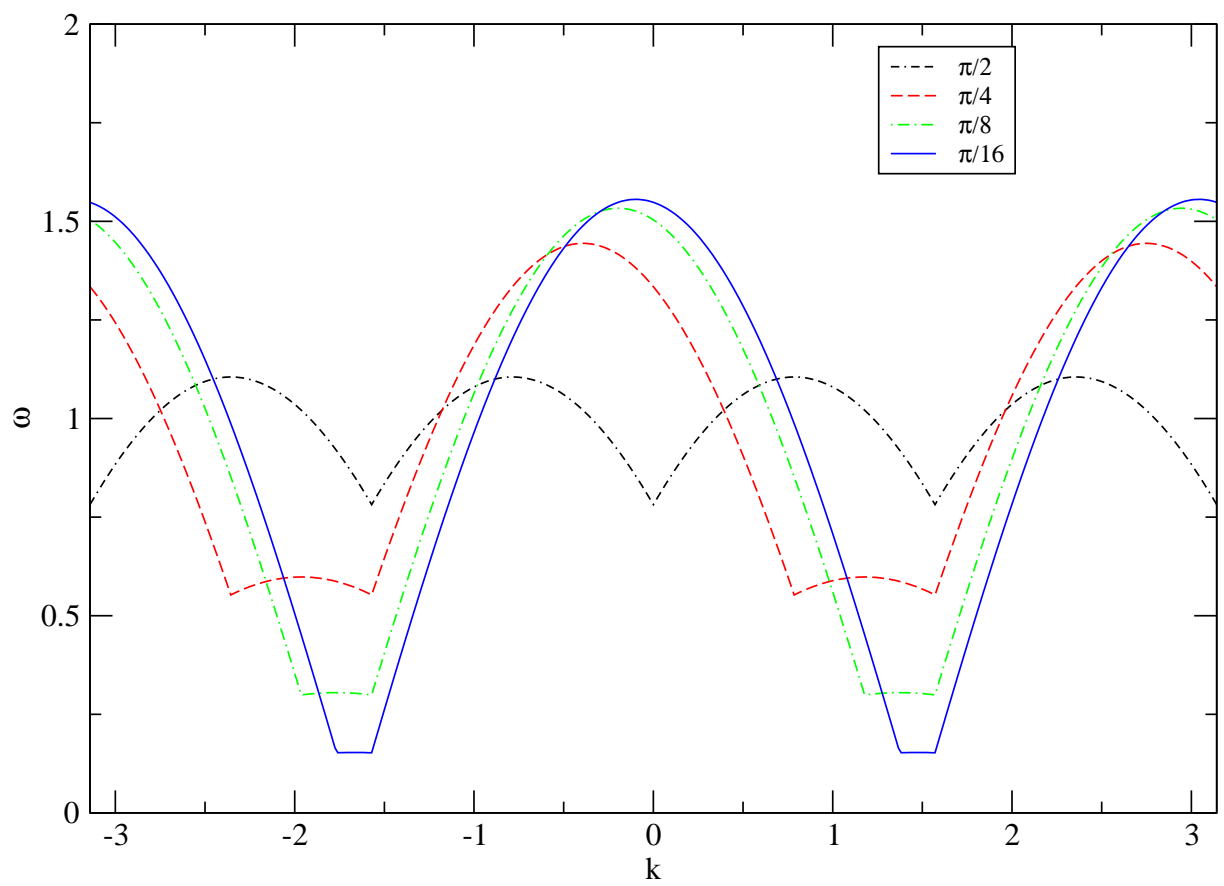


Figura 5.3: Comportamento de $\omega = \Omega(q, k)$ em função de k para os valores fixos de $q = \pi/2, \pi/4, \pi/8$ e $\pi/16$.

Capítulo 6

Processos de três mágnons no antiferromagneto unidimensional de spin inteiro

6.1 Introdução

Neste capítulo estudamos o antiferromagneto de Heisenberg de spin inteiro levando em conta termos de segunda ordem na expansão da transformação de Holstein-Primakoff em potências de $1/S$. Esta expansão inclui o termo o qual gera a contribuição de três mágnons. O objetivo será verificar o efeito da contribuição de três mágnons na estrutura de duplo pico, isto é, se a inclusão de tal contribuição vai suavizar a estrutura de duplo pico obtida quando apenas dois mágnons são levados em conta [22]. Seguimos o mesmo procedimento de Tang *et al.* [53] para o cálculo da função correlação no tempo usando a teoria de onda de spin modificada. Usamos esta teoria porque ela é simples e acreditamos que ela fornece a física relevante uma vez que para processos de dois mágnons ela é equivalente a um cálculo efetuado por Auerbach e Arovas [4] usando o formalismo de bósons de Schwinger. Chen e Schüttler [54], usando um cálculo numérico exato para o fator de estrutura dinâmico em $T = 0$, mostraram que a teoria de onda de spin modificada fornece uma representação adequada para a dinâmica de spin do antiferromagneto bidimensional. Embora saibamos que não há nenhuma comparação para o modelo unidimensional, acreditamos que isto é uma indicação de que o formalismo usado aqui é adequado e que métodos mais precisos como o Ansatz de Bethe (o qual será muito complicado de usar aqui) não mudará os resultados que nós obtemos. White e Affleck [55] estudaram a dinâmica do antiferromagneto unidimensional usando um método numérico de grupo de renormalização de matriz densidade dependente do tempo mas eles apresentaram resultados apenas para $k \approx 0$ e $k \approx \pi$. Porém, como mostrado por Canali e Wallin [56], a estrutura de duplo pico é mais robusta perto do centro da zona de Brillouin.

Na seção 6.2 apresentamos os passos para o cálculo da função correlação e a expressão obtida para $S(q, \omega)$ do modelo levando em conta contribuições de dois e três mágnons. Na seção 6.3, apresentamos a discussão dos resultados numéricos obtidos e na seção 6.4 apresentamos as conclusões desta parte.

6.2 Formalismo e resultados analíticos

O Hamiltoniano para o antiferromagneto de Heisenberg unidimensional de spin inteiro considerando interações de primeiros vizinhos é dado por:

$$H = J \sum_l [\mathbf{T}_{l-1} \cdot \mathbf{S}_l + \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{T}_{l+1}], \quad (6.1)$$

onde $J < 0$ e \mathbf{S} e \mathbf{T} são os operadores de spins das subredes A e B respectivamente. A transformação de Holstein-Primakoff para as duas subredes A e B respectivamente é definida por:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_l^+ &= \sqrt{2S}(1 - a_l^\dagger a_l/2S)^{1/2} a_l \\ \mathbf{S}_l^- &= \sqrt{2S} a_l^\dagger (1 - a_l^\dagger a_l/2S)^{1/2}, \\ \mathbf{T}_l^+ &= \sqrt{2S} b_l^\dagger (1 - b_l^\dagger b_l/2S)^{1/2}, \\ \mathbf{T}_l^- &= \sqrt{2S}(1 - b_l^\dagger b_l/2S)^{1/2} b_l, \\ \mathbf{S}_l^z &= S - a_l^\dagger a_l, \\ \mathbf{T}_l^z &= -S + b_l^\dagger b_l. \end{aligned} \quad (6.2)$$

Os operadores a e b obedecem as relações de comutações usuais.

Para preservar a quebra de simetria, impomos o vínculo que a magnetização *staggered* total é zero (na aproximação da teoria de onda de spin modificada).

Para incluir os processos de três mágnons escrevemos a eq.(6.2) como:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_l^+ &= \sqrt{2S} \{a_l - a_l^\dagger a_l a_l / 4S\}, \\ \mathbf{S}_l^- &= \sqrt{2S} \{a_l^\dagger - a_l^\dagger a_l^\dagger a_l / 4S\}, \\ \mathbf{T}_l^+ &= \sqrt{2S} \{b_l^\dagger - b_l^\dagger b_l^\dagger b_l / 4S\}, \\ \mathbf{T}_l^- &= \sqrt{2S} \{b_l - b_l^\dagger b_l b_l / 4S\}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Uma vez que os processos de três mágnons não contribuem para a função correlação $\langle S_q^z(t) S_{-q}^z(0) \rangle$ temos que:

$$\langle \mathbf{S}_q^\perp(t) \mathbf{S}_{-q}^\perp(0) \rangle = \langle \mathbf{S}_q^x(t) \mathbf{S}_{-q}^x(0) + \mathbf{S}_q^y(t) \mathbf{S}_{-q}^y(0) \rangle. \quad (6.4)$$

Queremos calcular o fator de estrutura dinâmico que, lembrando, é dado por:

$$S(q, \omega) = \sum_l \int dt e^{i(ql - \omega t)} \langle \mathbf{S}_q(t) \cdot \mathbf{S}_{-q}(0) \rangle, \quad (6.5)$$

o qual se relaciona com os experimentos de espalhamento de nêutrons por meio da seção de choque diferencial.

Usamos a expansão dada pela eq.(6.3) na eq.(6.4) e fazemos a transformação de Bogoliubov dada por:

$$\begin{aligned} a_k &= \alpha_k \cosh \theta_k + \beta_k^\dagger \sinh \theta_k & a_k^\dagger &= \alpha_k^\dagger \cosh \theta_k + \beta_k \sinh \theta_k, \\ b_k &= \alpha_k^\dagger \sinh \theta_k + \beta_k \cosh \theta_k & b_k^\dagger &= \alpha_k \sinh \theta_k + \beta_k^\dagger \cosh \theta_k, \end{aligned} \quad (6.6)$$

onde

$$\cosh 2\theta_k = \frac{1}{(1 - \eta^2 \gamma_k^2)^{1/2}}.$$

Os valores para os parâmetros η e λ são obtidos resolvendo as equações autoconsistentes apresentadas no cap.3 e os valores obtidos são dados na Tabela 1. $\gamma_k = \frac{1}{z} \sum_{\delta} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}}$, onde z é o número de coordenação (primeiros vizinhos) com $\vec{\delta}$ o vetor que liga o sítio aos seus primeiros vizinhos.

Levando em conta apenas os processos de dois mágnons, obtemos a seguinte expressão para $S(q, \omega)$:

$$\begin{aligned} S^{(0)}(q, \omega) &= \frac{N^2}{4} \sum_k \{ \cosh[2(\theta_k + \theta_{k+q})] + 1 \} n_k (n_{k+q} + 1) \delta(\omega_{k+q} - \omega_k - \omega) \\ &+ \frac{N^2}{8} \sum_k \{ \cosh[2(\theta_k + \theta_{k+q})] - 1 \} [n_k + \Theta(\omega)] [n_{k+q} + \Theta(\omega)] \delta(\omega_{k+q} + \omega_k - |\omega|), \end{aligned}$$

onde n_k é o número de ocupação de bósons $n_k = (e^{\beta\omega_k} - 1)^{-1}$ e $\Theta(\omega)$ é a função degrau.

Para a contribuição de três mágnons obtemos:

$$\begin{aligned} S^{(1)}(q, \omega) &= 4 \sum_{k_1} \sum_{k_2} \{ u_{k_1} u_{k_2} u_{k_1+k_2+q} v_{k_1} v_{k_2} v_{k_1+k_2+q} \\ &\times [n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_1+k_2+q} + 1) \delta(\omega_{k_1} + \omega_{k_2} - \omega_{k_1+k_2+q} - \omega) \\ &\quad + n_{k_1} n_{k_2} n_{k_1+k_2+q} \delta(\omega_{k_1} + \omega_{k_2} + \omega_{k_1+k_2+q} - \omega) \\ &+ n_{k_1} (n_{k_2} + 1) (n_{k_1+k_2+q} + 1) \delta(\omega_{k_1} - \omega_{k_2} - \omega_{k_1+k_2+q} - \omega) \\ &\quad + n_{k_1} (n_{k_2} + 1) n_{k_1+k_2+q} \delta(\omega_{k_1} - \omega_{k_2} + \omega_{k_1+k_2+q} - \omega)] \\ &\quad + u_{k_1} u_{k_2} u_{k_1-k_2-q} v_{k_1} v_{k_2} v_{k_1-k_2-q} \\ &\times [n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_1-k_2-q} + 1) \delta(\omega_{k_1} + \omega_{k_2} - \omega_{k_1-k_2-q} - \omega) \\ &\quad + n_{k_1} n_{k_2} n_{k_1-k_2-q} \delta(\omega_{k_1} + \omega_{k_2} + \omega_{k_1-k_2-q} - \omega) \\ &+ n_{k_1} (n_{k_2} + 1) (n_{k_1-k_2-q} + 1) \delta(\omega_{k_1} - \omega_{k_2} - \omega_{k_1-k_2-q} - \omega) \\ &\quad + n_{k_1} (n_{k_2} + 1) n_{k_1-k_2-q} \delta(\omega_{k_1} - \omega_{k_2} + \omega_{k_1-k_2-q} - \omega)] \}, \end{aligned} \quad (6.7)$$

onde consideramos $\omega > 0$, sendo $u_k = \cosh \theta_k$, $v_k = \sinh \theta_k$ e $u_k^2 - v_k^2 = 1$. As expressões para as funções correlações, correspondentes às contribuições dos processos de dois e três mágnos, são dadas no Apêndice B.

A frequência de mágnon ω_k é dada por:

$$\omega_k = \lambda(1 - \eta^2 \cos^2 k)^{1/2}, \quad (6.8)$$

e

$$S(q, \omega) = S^{(0)}(q, \omega) + S^{(1)}(q, \omega).$$

A soma discreta nas eqs.(6.7) pode ser transformada em integrais da forma

$$S^{(0)}(q, \omega) = \frac{N^2}{4\pi} \int_0^\pi dk F(q, k) \delta(\omega_{k+q} + \omega_k - \omega), \quad (6.9)$$

para a contribuição de dois mágnons e

$$S^{(1)}(q, \omega) = \frac{4}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi dk_1 dk_2 G(q, k_1, k_2) \delta(\omega_{k_1} + \omega_{k_2} + \omega_{k_1+k_2+q} - \omega) \quad (6.10)$$

para a contribuição de três mágnons.

Para resolver as integrais duplas que aparecem no cálculo da contribuição de três mágnons usamos a seguinte aproximação para a função delta de Dirac:

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \left(\frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \right). \quad (6.11)$$

O conhecimento das raízes do argumento da função delta de Dirac e seu comportamento é crucial para a interpretação de $S(q, \omega)$. Para o modelo sem levar em conta os processos de três mágnons, há uma faixa de frequência onde $S(q, \omega)$ é nula que corresponde à região entre o máximo de $\Omega_-(q, k) = \omega_k - \omega_{k+q}$ e o mínimo de $\Omega_+(q, k) = \omega_k + \omega_{k+q}$, onde $\Omega_+(q, k)$ e $\Omega_-(q, k)$ nunca se sobrepõem e correspondem aos processos de soma e diferença respectivamente. Este comportamento é uma consequência do gap em ω_k em $k = 0$ dado pela eq.(6.8). Para o modelo sem gap as duas curvas se tocarão. É importante lembrar que neste caso a energia de onda de spin simples, ω_q está dentro desta faixa de frequência. Para frequências maiores do que o máximo de $\Omega_+(q, k)$ haverá nenhuma contribuição. Na região onde não há raízes para a equação $\Omega_\pm(q, k) = \omega$ não temos processos de dois mágnons logo o amortecimento nesta região é nulo e $S(q, \omega)$ também é nulo. Os processos de três mágnons são permitidos para todos os valores da frequência, além disso, a contribuição deste processo para o amortecimento não suaviza os picos.

6.3 Resultados numéricos

Na figura 6.1 mostramos o fator de estrutura dinâmico levando em conta todos os processos, dois e três mágnons juntos. Como podemos ver a estrutura de duplo pico não é modificada. A contribuição relativa dos processos de três mágnons é muito pequena em comparação com a contribuição dos processos de dois mágnons, (da ordem de $\sim 10^{-6}$ para $q = \pi/2$ e da ordem de $\sim 10^{-5}$ para $q = \pi/4$ e $q = \pi/6$). Portanto a contribuição de três mágnons não pode ser distingüida da contribuição de dois mágnons na fig.6.1. Para os valores dos vetores de onda q igual a $q = \pi/4$ e $q = \pi/6$ há uma pequena saliência no segundo pico, na região entre o limite superior do gap e o ponto de máximo do segundo pico, que é uma consequência do comportamento de $\Omega_+(q, k)$ nesta região. Isto é uma consequência do número menor de raízes da equação $\Omega_+(q, k) = \omega$ nesta faixa.

Figura 6.2 mostra a variação do amortecimento dos mágnons em função do vetor de onda q para a contribuição total, processos de dois e três mágnons juntos. Temos um comportamento da variação de Γ_q com o vetor de onda q com dois pontos de máximo. Um ponto de máximo em Γ_q para $q = 0.3$ e outro em $q = 2.75$. Para $q = 1.6$ (próximo a $q = \pi/2$) há um mínimo em Γ_q que é uma consequência da variação mais rápida de $S(q, \omega)$ para este valor de q e, portanto, um menor amortecimento. Esta variação mais rápida é uma consequência da variação de $\Omega_+(q, k)$ com k , mantido q fixo, como podemos ver na figura 6.3. Para $q = \pi/2$, a distância entre os pontos de máximo e mínimo na curva é menor e a taxa de variação, $\frac{d\Omega_+(q, k)}{dk}$, é maior do que para os outros valores de q .

Na figura 6.4 apresentamos a variação do amortecimento com a temperatura. O amortecimento aumenta com a temperatura, como esperado, e aumenta com o vetor de onda q também. Porém, para pequenos valores de q a variação do amotecimento é pequena indicando uma menor variação do espalhamento de mágnons para q pequeno.

6.4 Conclusão

Estudamos o antiferromagneto de Heisenberg unidimensional de spin inteiro levando em conta processos de três mágnons [57]. A teoria considerando apenas processos de dois mágnons é equivalente àquela estudada por Pires e Gouvêa em [28]. Nossos cálculos indicam que a estrutura de duplo pico obtida levando em conta apenas processos de dois mágnons não é modificada quando incluímos os processos de três mágnons. Assim a contribuição de três mágnons não contribui significativamente para $S(q, \omega)$.

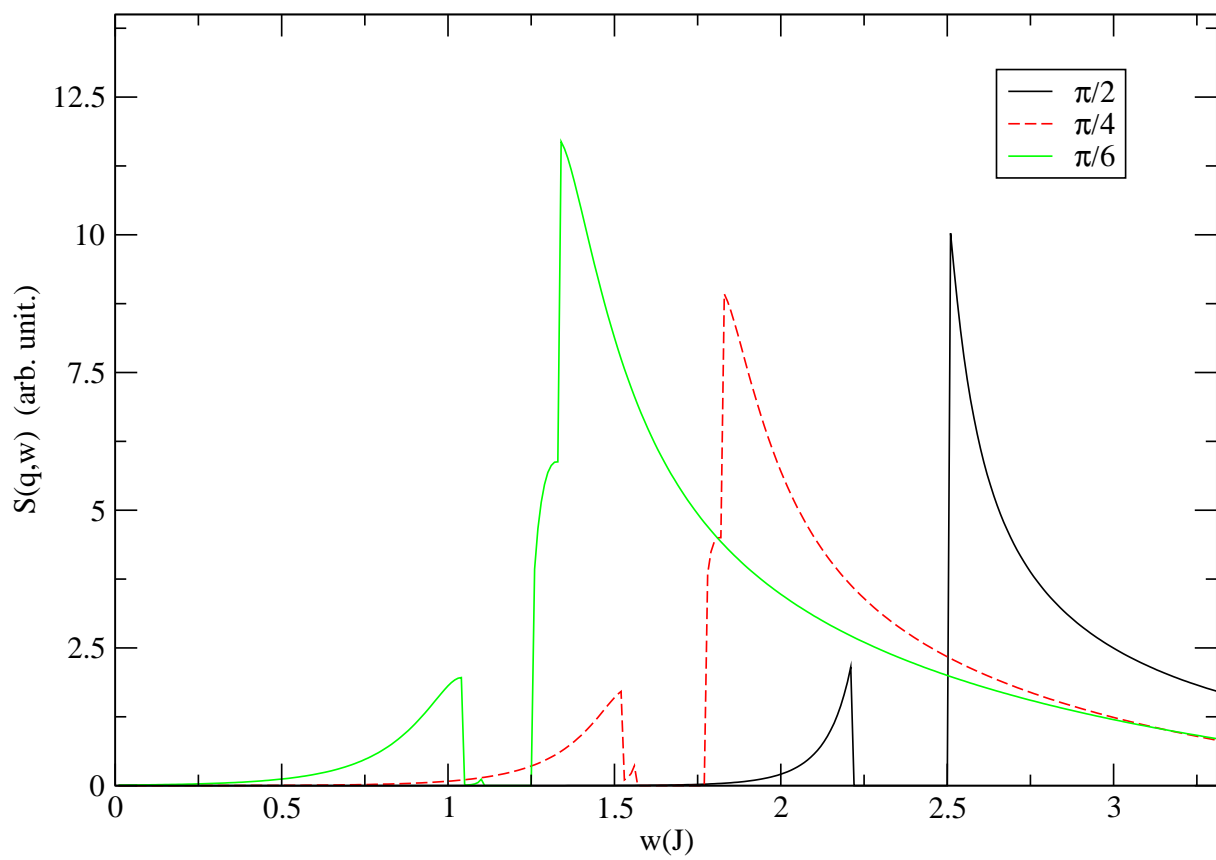


Figura 6.1: Fator de estrutura dinâmico para os valores dos vetores de onda $q = \pi/2, \pi/4$ e $\pi/6$ com $T/J = 0.1$ ($J = 1$).

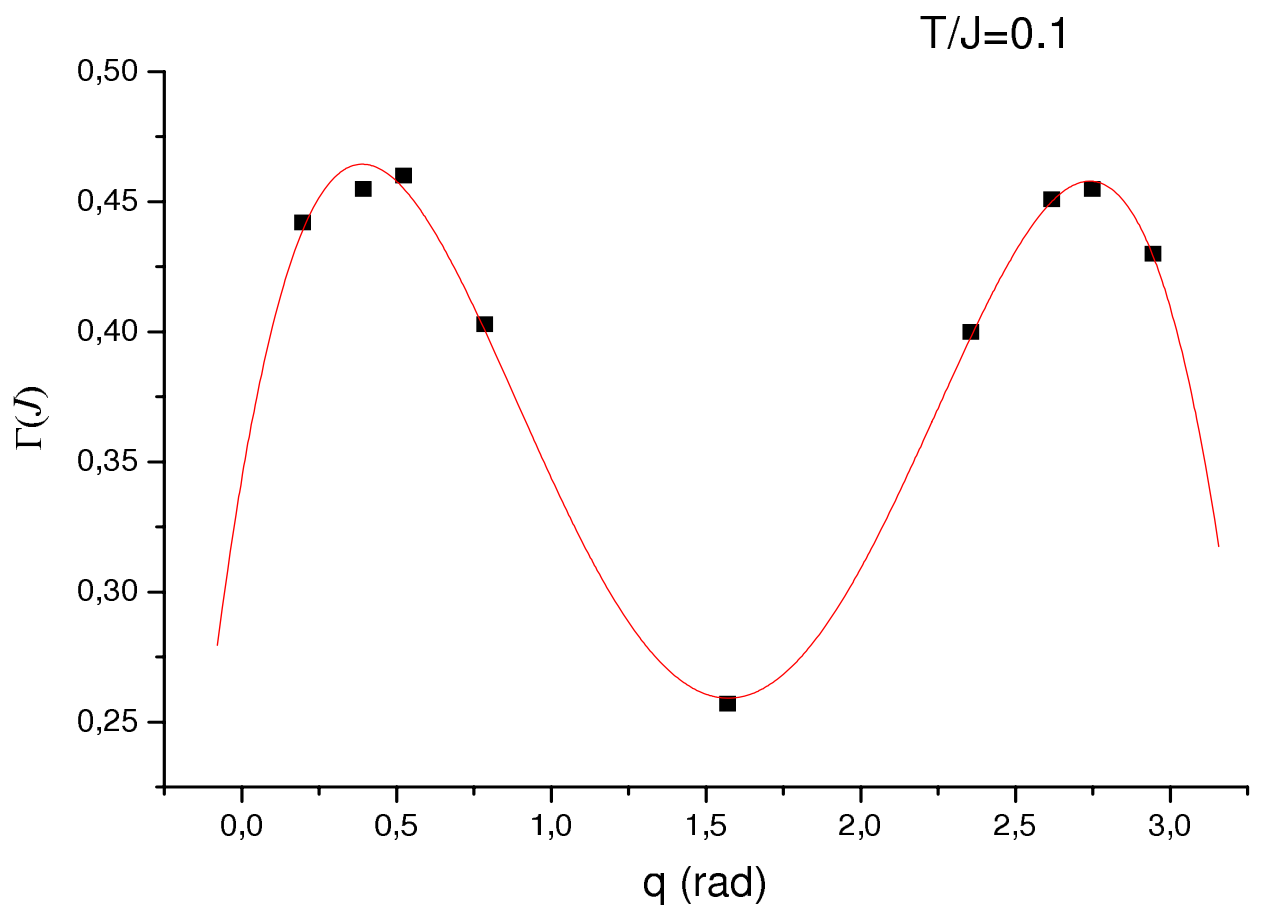


Figura 6.2: Dependência de Γ (meia largura) com q para o valor do parâmetro $T/J = 0.1$ ($J = 1$) fixo.

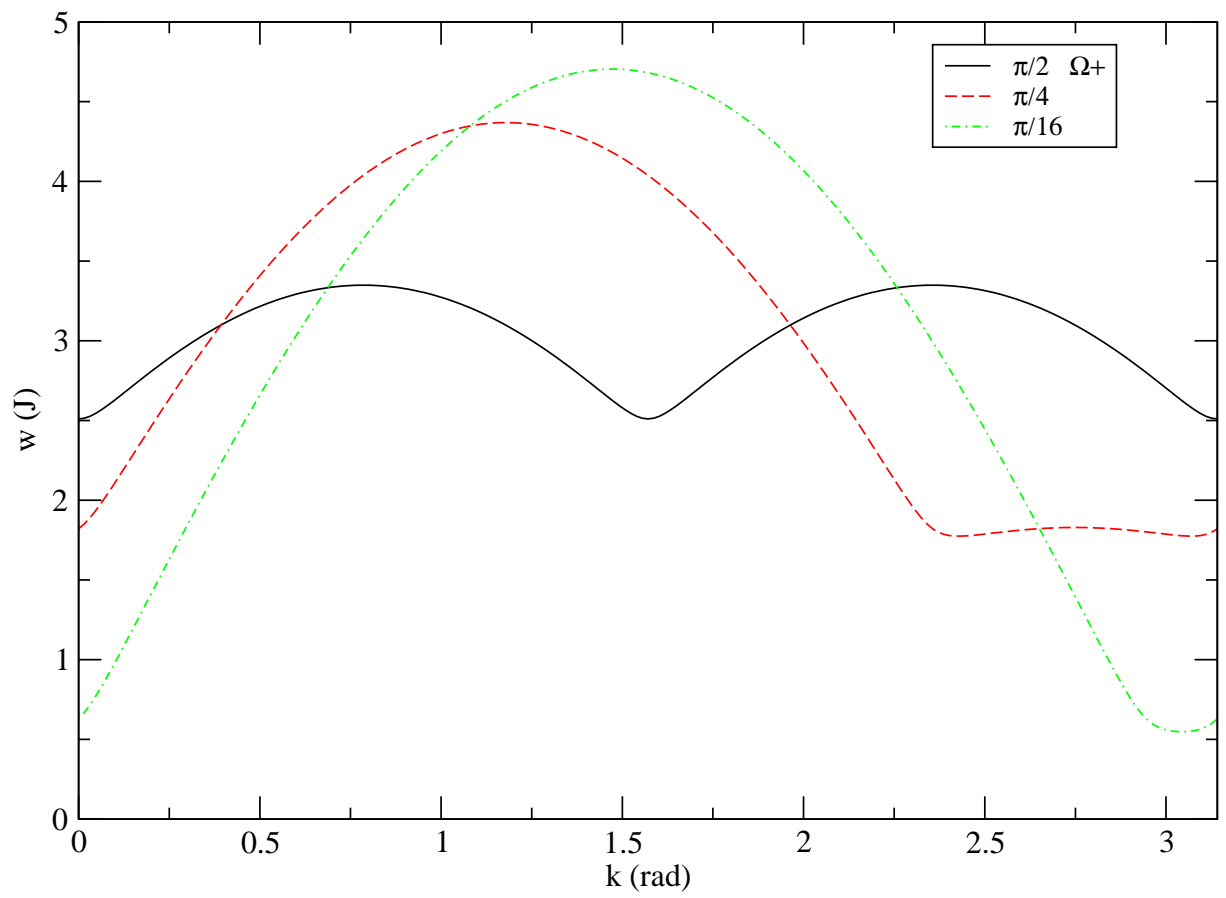


Figura 6.3: Comportamento de $\Omega_+(q, k)$ para os valores de $q = \pi/2, \pi/4$ e $\pi/16$.

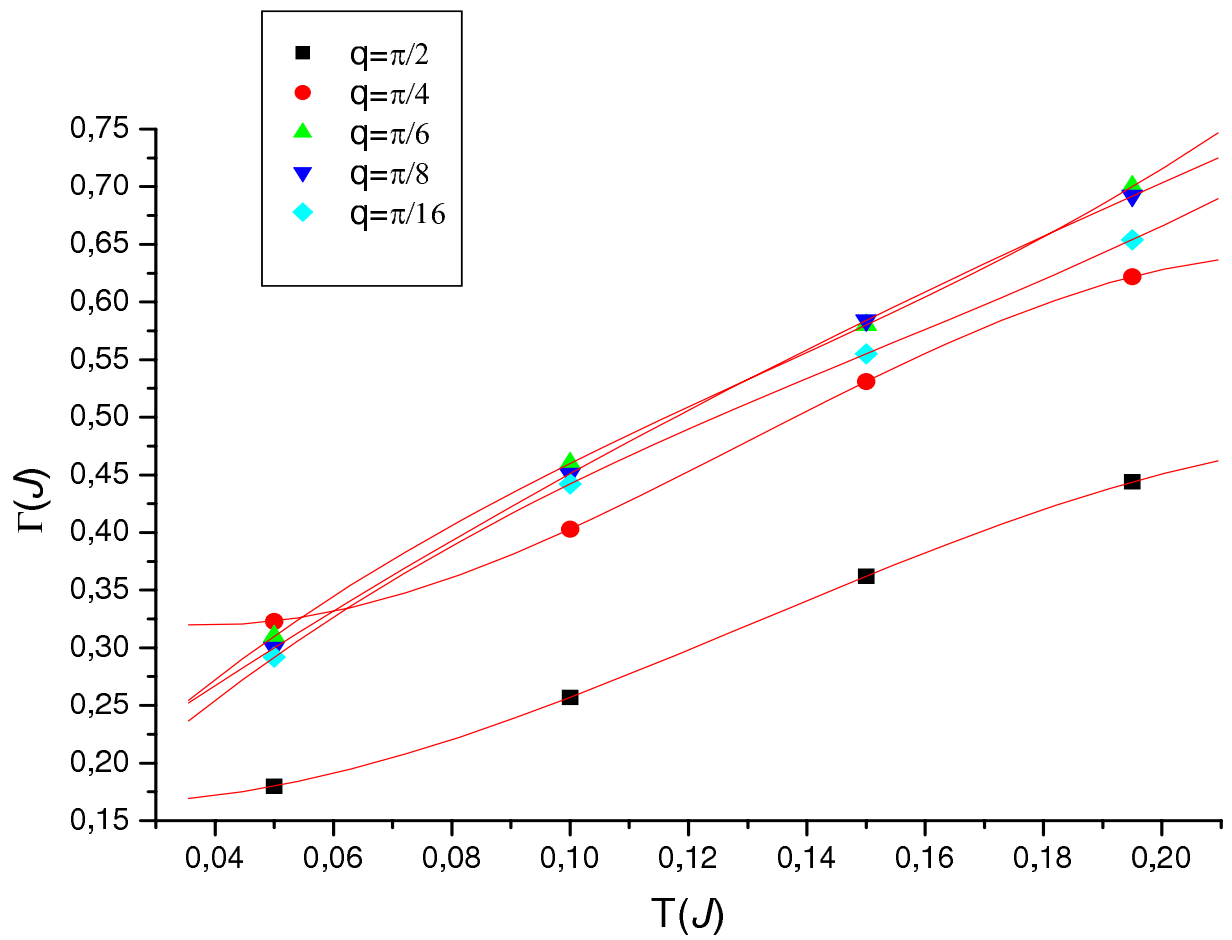


Figura 6.4: Dependência de Γ (meia largura) com T/J ($J = 1$) para os valores dos vetores de onda $q = \pi/2, \pi/4, \pi/6, \pi/8$ e $\pi/16$.

Capítulo 7

Conclusões

Neste trabalho, estudamos a dinâmica de alguns modelos de Heisenberg antiferromagnéticos unidimensionais em baixa dimensionalidade e em baixa temperatura. Os métodos utilizados foram a teoria de onda de spin modificada desenvolvida por Hirsch, Tang e Takahashi, método do operador de projeção introduzido por H. Mori e o método dos bósons de Schwinger de Arovass e Auerbach. Tais métodos são extensamente utilizados para o estudo das propriedades dinâmicas dos modelos de Heisenberg antiferromagnéticos.

O primeiro sistema estudado foi o antiferromagneto de Heisenberg de spin inteiro unidimensional com interação spin-fônon. O estudo foi realizado usando uma combinação dos formalismos da teoria de onda de spin modificada com o método do operador de projeção para o cálculo do fator de estrutura dinâmico. A principal conclusão obtida foi que a inclusão da interação spin-fônon ou mágnon-fônon (depois de efetuar a transformação de Dyson-Maleev onde os operadores de spins são escritos em termos dos operadores bosônicos de criação e destruição) faz com que a estrutura de duplo pico obtida para o fator de estrutura dinâmico $S(q, \omega)$ para o modelo sem interação, que é uma consequência do *gap de Haldane*, seja suavizada ou quase destruída. O gap de Haldane como discutido no cap.3 ocorre em sistemas antiferromagnéticos unidimensionais de spin inteiro e em sistemas bidimensionais de spin inteiro e semi-inteiro, sendo um fenômeno puramente quântico e sem analogia clássica que muda o estado ordenado do sistema para um estado de líquido de spin. A interação mágnon-fônon faz com que a energia dos mágnons diminua devido ao fato de parte dela se transferir para o meio acústico, como mostra a fig. 3.1.

O segundo sistema estudado foi o antiferromagneto de Heisenberg de spin inteiro unidimensional com a interação de Moriya-Dzyaloshinskii. Este sistema foi estudado utilizando o método dos bósons de Schwinger para o caso do vetor D "staggered". Neste caso, temos que os termos fora da diagonal da matriz para o fator de estrutura dinâmico se anulam o que não ocorre para a situação D uniforme. Foi obtida uma estrutura de um único pico para $S(q, \omega)$ devido aos picos se sobreporem num mesmo ponto ω do espectro. Uma segunda causa para a estrutura de um único pico obtida é que no cálculo de $S(q, \omega)$ geralmente temos processos de soma e diferença, $\Omega_+(q, k)$ e $\Omega_-(q, k)$, que significam respectivamente o espalhamento normal de dois mágnons e a destruição de um mágnon num estado de vetor de onda $k - q$ e a criação de um mágnon num estado de vetor de onda k . Temos que ambas as curvas nunca se sobrepõem e que a região ou o "gap" entre

as curvas, onde não temos nenhuma contribuição, é que gera a estrutura de duplo pico e o "gap" em $S(q, \omega)$. No caso estudado, temos apenas a contribuição "normal" em $S(q, \omega)$, relativa ao espalhamento de dois mágnons, o que vai gerar, portanto, um único pico. Para a situação D uniforme teremos que os termos fora da diagonal em $S(q, \omega)$ não se anulam, como acima mencionado, e que a expressão será a mesma do caso D "staggered" porém, neste caso, $S(q, \omega)$ total não será dado como uma soma de uma expressão de $S(q, \omega)$ e $S(q+\pi, \omega)$, como dado pela eq. (5.14), e sim por uma expressão de $S(q+\alpha, \omega)$ e $S(q-\alpha, \omega)$ apresentada em [49], sendo α dado pela eq. (5.2). Como $\alpha \neq \pi$, neste caso, os picos serão gerados em pontos ω diferentes e não vão se sobrepor.

Estudamos também o antiferromagneto de Heisenberg de spin inteiro unidimensional considerando processos de até três mágnons. Utilizamos a teoria de onda de spin modificada para calcular a função correlação no tempo e obtemos, neste caso, que a inclusão dos processos de três mágnons em $S(q, \omega)$ não altera a estrutura de duplo pico obtida para o modelo levando em conta processos de até dois mágnons.

Utilizaremos o formalismo da função memória (método do operador de projeção) para calcular a função relaxação e o fator de estrutura dinâmico tendo em vista que, como anteriormente discutido, este método fornece uma informação mais detalhada do sistema em estudo afim de verificar se com o uso de tal técnica a inclusão dos processos de três mágnons possam gerar alguma alteração significativa na estrutura de dois picos.

Apêndice A

Expressões para $A_-(q, k)$ e $A_+(q, k)$

$$A_-^c(q, k) = \frac{1}{(LS_q^x, LS_q^x)} n_k^c n_{q-k} \frac{(e^{\beta\omega_c(k)} - e^{\beta\omega_{q-k}})}{\beta\Omega_-^c} \Gamma_1(q, k), \quad (0.1)$$

$$A_-^d(q, k) = \frac{1}{(LS_q^x, LS_q^x)} n_k^d n_{q-k} \frac{(e^{\beta\omega_d(k)} - e^{\beta\omega_{q-k}})}{\beta\Omega_-^d} \Gamma_2(q, k), \quad (0.2)$$

$$A_+^c(q, k) = \frac{1}{(LS_q^x, LS_q^x)} n_k^c n_{q-k} \frac{(e^{\beta\Omega_+^c} - 1)}{\beta\Omega_+^c} \Gamma_1(q, k), \quad (0.3)$$

$$A_+^d(q, k) = \frac{1}{(LS_q^x, LS_q^x)} n_k^d n_{q-k} \frac{(e^{\beta\Omega_+^d} - 1)}{\beta\Omega_+^d} \Gamma_2(q, k), \quad (0.4)$$

$$\Gamma_1(q, k) = \frac{1}{2}(v_{q-k}v_{q-k} + u_{q-k}u_{q-k})B_1(q, k) + v_{q-k}u_{q-k}C_1(q, k),$$

$$\Gamma_2(q, k) = \frac{1}{2}(v_{q-k}v_{q-k} + u_{q-k}u_{q-k})B_2(q, k) + v_{q-k}u_{q-k}C_2(q, k),$$

$$B_1(q, k) = 16\alpha^2 J^2 S^4 \sqrt{N} \left\{ \frac{S}{2m\omega_c(k)} \{ 4\text{sen}^2(k/2)\cos^2(q - k/2) \right. \\ \times [\cos^2(q) + \cos(q - k)\cos(q) + \cos^2(q - k)] \\ - 4\text{sen}(k)\text{sen}(k/2)\cos(q - k/2)[\cos(q) + \cos(k - q)] \\ \left. + \text{sen}^2(k)[\cos^2(q) + \cos(q - k)\cos(q) + \cos^2(q - k) + 4] \} \right\},$$

$$B_2(q, k) = 16\alpha^2 J^2 S^4 \sqrt{N} \left\{ \frac{S}{2m\omega_d(k)} \{ 4\cos^2(k/2)\text{sen}^2(q - k/2) \right. \\ \times [\cos^2(q) - \cos(q - k)\cos(q) + \cos^2(q - k)] \\ - 4\text{sen}(k)\cos(k/2)\text{sen}(q - k/2)[\cos(q) - \cos(k - q)] \\ \left. + \text{sen}^2(k)[\cos^2(q) - \cos(q - k)\cos(q) + \cos^2(q - k) + 4] \} \right\},$$

$$C_1(q, k) = 16\alpha^2 J^2 S^4 \sqrt{N} \left\{ \frac{S}{2m\omega_c(k)} \{ 2\text{sen}(k)\text{sen}(k/2)\cos(q - k/2) \right. \\ \times [\cos^2(q) + \cos(q - k)\cos(q) + \cos^2(q - k) + \cos(q - k)] \\ \left. - 2\text{sen}^2(k)[1 + \cos(k - q)] \} \right\},$$

$$C_2(q, k) = 16\alpha^2 J^2 S^4 \sqrt{N} \left\{ \frac{S}{2m\omega_d(k)} \{ 2\text{sen}(k)\cos(k/2)\text{sen}(q - k/2) \right. \\ \times [\cos^2(q) + \cos(q - k)\cos(q) - \cos^2(q - k) - \cos(q - k)] \\ \left. + 2\text{sen}^2(k)[1 - \cos(k - q)] \} \right\}.$$

Para a componente z da função memória temos para $A_-(q, k)$ e $A_+(q, k)$ as expressões:

$$A_+(q, k) = \frac{1}{(LS_q^z, LS_q^z)} n_k n_{q-k} \frac{(e^{\beta\Omega_+} - 1)}{\beta\Omega_+} [\Gamma_1(q, k)]^2 \quad (0.5)$$

$$A_-(q, k) = \frac{1}{(LS_q^z, LS_q^z)} n_k n_{q-k} \frac{(e^{\beta\omega_k} - e^{\beta\omega_{q-k}})}{\beta\Omega_-} [\Gamma_2(q, k)]^2 \quad (0.6)$$

onde:

$$\Gamma_1(q, k) = B(q, k)(u_k v_{k-q} + u_{k-q} v_k) - C(q, k)(u_k u_{k-q} + v_k v_{k-q}),$$

$$\Gamma_2(q, k) = B(q, k)(u_k u_{k-q} + v_k v_{k-q}) - C(q, k)(u_k v_{k-q} + v_k u_{k-q}),$$

$$B(q, k) = 16J^2 S^2 \sqrt{N} \cos(q/2) \cos(k - q/2), \quad (0.7)$$

$$C(q, k) = 16J^2 S^2 \sqrt{N} \cos^2(q/2) \cos^2(k - q/2). \quad (0.8)$$

A expressão para $(\dot{S}_q^z, \dot{S}_q^z)$ é dada por:

$$(\dot{S}_q^z, \dot{S}_q^z) = 16J^2 S^2 \cos^2(q/2) \int_0^\pi dk \cos^2(k) \left\{ \frac{(e^{\beta\omega_k} - e^{\beta\omega_{q-k}})}{\beta\Omega_-} (u_k v_{k-q} - v_k u_{k-q})^2 \right. \\ \left. + \frac{(e^{\beta\Omega_+} - 1)}{\beta\Omega_+} (u_k u_{k-q} - v_k v_{k-q})^2 \right\} n_k n_{k-q}.$$

Apêndice B

Função correlação $\langle \mathbf{S}_q(t) \cdot \mathbf{S}_{-q}(0) \rangle$ calculada na teoria de onda de spin modificada incluindo os processos de dois e três mágnons

Considere a seguinte função correlação dependente do tempo:

$$S(q, t) = \langle S_q(t) \cdot S_{-q}(0) \rangle,$$

Para a componente no plano temos:

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

A componente z da função correlação, $\langle S_q^z(t) S_{-q}^z(0) \rangle$ não apresenta contribuição de processos de três mágnons sendo esta contribuição ocorrendo na componente do plano da função correlação $\langle S_q^\perp(t) S_{-q}^\perp(0) \rangle$.

Levando em consideração a contribuição dos processos de dois mágnons apenas, obtemos a expressão:

$$\begin{aligned} S^{(0)}(q, t) = & \frac{N^2}{4} \sum_k \{ \cosh[2(\theta_k + \theta_{k+q})] + 1 \} \{ n_k(n_{k+q} + 1) e^{i(\omega_{k+q} - \omega_k)t} \\ & + n_{k+q}(n_k + 1) e^{-i(\omega_{k+q} - \omega_k)t} \} \\ & + \frac{N^2}{8} \sum_k \{ \cosh[2(\theta_k + \theta_{k+q})] - 1 \} \{ (n_k + 1)(n_{k+q} + 1) e^{i(\omega_{k+q} + \omega_k)t} \\ & + n_k n_{k+q} e^{-i(\omega_{k+q} + \omega_k)t} \}, \end{aligned}$$

onde $S^{(0)}(q, t) = \langle S_q^z(t) S_{-q}^z(0) \rangle$.

A expressão obtida para a contribuição dos processos de três mágnons para a função correlação é:

$$\begin{aligned}
S^{(1)}(q, t) = & 4 \sum_{k_1} \sum_{k_2} \{ u_{k_1} u_{k_2} u_{k_1+k_2+q} v_{k_1} v_{k_2} v_{k_1+k_2+q} \\
& \times \{ [n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_1+k_2+q} + 1) e^{i(\omega_{k_1} + \omega_{k_2} - \omega_{k_1+k_2+q})t} \\
& \quad + n_{k_1} n_{k_2} n_{k_1+k_2+q} e^{i(\omega_{k_1} + \omega_{k_2} + \omega_{k_1+k_2+q})t} \\
& \quad + n_{k_1} (n_{k_2} + 1) (n_{k_1+k_2+q} + 1) e^{i(\omega_{k_1} - \omega_{k_2} - \omega_{k_1+k_2+q})t} \\
& \quad + n_{k_1} (n_{k_2} + 1) n_{k_1+k_2+q} e^{i(\omega_{k_1} - \omega_{k_2} + \omega_{k_1+k_2+q})t}] \\
& + [(n_{k_1} + 1) (n_{k_2} + 1) n_{k_1+k_2+q} e^{-i(\omega_{k_1} + \omega_{k_2} - \omega_{k_1+k_2+q})t} \\
& + (n_{k_1} + 1) (n_{k_2} + 1) (n_{k_1+k_2+q} + 1) e^{-i(\omega_{k_1} + \omega_{k_2} + \omega_{k_1+k_2+q})t} \\
& \quad + (n_{k_1} + 1) n_{k_2} n_{k_1+k_2+q} e^{-i(\omega_{k_1} - \omega_{k_2} - \omega_{k_1+k_2+q})t} \\
& \quad + (n_{k_1} + 1) n_{k_2} (n_{k_1+k_2+q} + 1) e^{-i(\omega_{k_1} - \omega_{k_2} + \omega_{k_1+k_2+q})t}] \} \\
& + u_{k_1} u_{k_2} u_{k_1-k_2-q} v_{k_1} v_{k_2} v_{k_1-k_2-q} \\
& \times \{ [n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_1-k_2-q} + 1) e^{i(\omega_{k_1} + \omega_{k_2} - \omega_{k_1-k_2-q})t} \\
& \quad + n_{k_1} n_{k_2} n_{k_1-k_2-q} e^{i(\omega_{k_1} + \omega_{k_2} + \omega_{k_1-k_2-q})t} \\
& \quad + n_{k_1} (n_{k_2} + 1) (n_{k_1-k_2-q} + 1) e^{i(\omega_{k_1} - \omega_{k_2} - \omega_{k_1-k_2-q})t} \\
& \quad + n_{k_1} (n_{k_2} + 1) n_{k_1-k_2-q} e^{i(\omega_{k_1} - \omega_{k_2} + \omega_{k_1-k_2-q})t}] \\
& + [(n_{k_1} + 1) (n_{k_2} + 1) n_{k_1-k_2-q} e^{-i(\omega_{k_1} + \omega_{k_2} - \omega_{k_1-k_2-q})t} \\
& + (n_{k_1} + 1) (n_{k_2} + 1) (n_{k_1-k_2-q} + 1) e^{-i(\omega_{k_1} + \omega_{k_2} + \omega_{k_1-k_2-q})t} \\
& \quad + (n_{k_1} + 1) n_{k_2} n_{k_1-k_2-q} e^{-i(\omega_{k_1} - \omega_{k_2} - \omega_{k_1-k_2-q})t} \\
& \quad + (n_{k_1} + 1) n_{k_2} (n_{k_1-k_2-q} + 1) e^{-i(\omega_{k_1} - \omega_{k_2} + \omega_{k_1-k_2-q})t}] \},
\end{aligned}$$

onde $S^{(1)}(q, t) = \langle S_q^\perp(t) S_{-q}^\perp(0) \rangle$. Por tanto:

$$S(q, t) = S^{(0)}(q, t) + S^{(1)}(q, t).$$

Referências

- [1] M. Takahashi, Phys. Rev. Lett. **58** (1987) 168.
- [2] J. Schwinger, Quantum theory of Angular Momentum, edited by L. Biedenharn and H. Van Dam, Academic, New York (1965).
- [3] D. P. Arovas, A. Auerbach, Phys. Rev. B **38** (1988) 316.
- [4] D. P. Arovas, A. Auerbach, Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 617.
- [5] H. Mori, Progr. Theoret. Phys. **34** (1965) 399.
- [6] A. S. T. Pires, Helv. Phys. Acta **61** (1988) 988.
- [7] G. D. Mahan, Many-Particle Physics, Plenum Press, New York (1981).
- [8] M. Takahashi, Phys. Rev. B **40** (1989) 2494.
- [9] Haldane F. D. M., Phys. Lett. **93A** (1983) 464.
- [10] Haldane F. D. M., Phys. Rev. Lett. **50** (1983) 1153.
- [11] L. Néel, Ann. Phys. **4**, (1949) 249.
- [12] Y. Y. Li, Phys. Rev. **101** (1956) 1450.
- [13] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jap. **12** (1957) 570.
- [14] Y. Endoh et al., Phys. Rev. Lett. **32** (1974) 170.
- [15] J. Deisz, M. Jarrell, e D. L. Cox, Phys. Rev. B **42** (1990) 4869.
- [16] J. Fizez, B. De Raedt, H. D Raedt, J. Phys. C **14** (1981) 2923.
- [17] X. Su, H. Zheng, Solid State Commun. **109** (1999) 323.
R. J. Bursill, R. H. McKenzie, C. J. Hamer, Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 408.
- [18] T Rudolf, Ch. Kant, F. Mayr, J. Hemberger, V. Tsurkan e A. Loidl (2007) Cond-
mat/**0701080**.
- [19] T Rudolf, Ch. Kant, F. Mayr, J. Hemberger, V. Tsurkan e A. Loidl (2006) Cond-
mat/**0611041**.

- [20] J. Hemberger, T. Rudolf, H. A. Krug von Nidda, F. Mayr, A. Pimenov, V. Tsurkan, e A. Loidl *F D M Phys. Rev. Lett.* **97** (2006) 087204.
- [21] M.D.Lumsden, S.E.Nagler, B.C.Sales, D.A.Tennant, D.F.McMorrow, S.H.Lee, e S.Park, *Phys. Rev. B* **74** (2006) 214424.
- [22] Reiter G. e Sjölander A., *Phys. Rev. Lett.* **39** (1977) 1047.
G. Reiter *J. Phys. C: Solid State Phys.* **13** (1980) 3027.
- [23] De Raedt B, De Raedt H e Fizez J *Phys. Rev. B* **23** (1981) 4597.
De Raedt B, De Raedt H e Fizez *Phys. Rev. Lett.* **46** (1981) 3027.
- [24] Gouvêa M.E. e Pires A.S.T. 1987 *J. Phys. C* **20** 2431.
- [25] Menezes S.L., Pires A.S.T. e Gouvêa M.E. *Phys. Rev. B* **47** (1993) 12280.
- [26] Albuquerque A.F., Pires A.S.T. e Gouvêa M.E. *Phys. Rev. B* **72** (2005) 174423.
- [27] Pires A.S.T. e Gouvêa M.E., *Brazilian Journal of Physics* **34** (2004) 1189.
- [28] Pires A.S.T. e Gouvêa M.E., *J. Mag. Magn. Mat.* **241** (2002) 315.
- [29] Mermin N D e Wagner H *Phys. Rev. Lett.* **22** (1996) 1133.
- [30] Hirsch J E e Tang S *Phys. Rev. B* **40** (1989) 4769.
- [31] Takahashi M *Phys. Rev. B* **40** (1989) 2494.
- [32] Okabe Y., Tikuchi M. e Nagi D.S. *Phys. Rev. B* **61** (1988) 2971.
- [33] Chakravarty S., Halperin B.I. e Nelson D.R. *Phys. Rev. B* **39** (1989) 2344.
- [34] Lima L.S. e Pires A.S.T., *J. Phys.: Condens. Matter* **19** (2007) 436218.
- [35] Pires A.S.T., Lima L.S. e Gouvêa M.E., *J. Phys.: Condens. Matter* **20** (2008) 015208.
- [36] Q Jiang et al. *Phys. Stat. Sol.* **b229** (2002) 1233.
- [37] C. J. De Leone, G. T. Zimanyi, *Phys. Rev. B* **49** (1994) 1131.
- [38] I. Dzyaloshinskii, *J. Phys. Chem. Solids* **4** (1958) 241.
- [39] T. Moriya, *Phys. Rev.* **120** (1960) 91.
- [40] A.Zheludev, S.Maslov, G.Shirane *Phys. Rev. Lett* **78** (1997) 4857.
- [41] A.Zheludev, S.Maslov, G.Shirane, Y.Sasago, N.Koide, K.Uchinokura *Phys. Rev. B* **57** (1998) 2968.

- [42] A.Zheludev, S.Maslov, G.Shirane, I.Tsukada, T.Masuda, K.Uchinokura, I.Zaliznyak, R.Erwin, L.P.Regnault Phys. Rev. B **59** (1999) 11432.
- [43] O.Derzhko, T.Varkholyak, Physica B **359** (2005) 1403.
- [44] O.Derzhko, T.Varkholyak, T.Krokhmalskii, H.Buttner, Physica B **378** (2006) 443.
- [45] A.M.Dikande, Eur. Phys. J. B **55** (2007) 397.
- [46] Y.Chen, Phys. Rev. B **75** (2007) 214409.
- [47] Q. Xia, P.S. Riseborough. J. Appl. Phys. **63** (1988) 4141.
- [48] Pires A.S.T. e Gouvêa M.E., J. Mag. Magn. Mat. **212** (2000) 251.
- [49] D.N.Aristov, S.V.Maleyev, Phys. Rev. B **62** (2000) R751.
- [50] J. N. Mc Elearney, S. Merchant, Phys. Rev. B **18** (1978) 3612.
- [51] Lima L.S. e Pires A.S.T., J. Mag. Magn. Mat. **320** (2008) 2316.
- [52] Z. He, Y. Ueda, M. Itoh, Solid State Commun. **141** (2007) 22.
- [53] S. Tang , M. E. Lazzouni e J. E. Hirsch Phys. Rev. B **40** (1989) 5000.
- [54] C. X. Chen, H. B. Schüttler, Phys. Rev. B **40** (1989) 239.
- [55] M. Canali, M. Wallin, Phys. Rev. B **48** (1993) 3264.
- [56] S. R. White, I. Affleck, Phys. Rev. B **77** (2008) 134437.
- [57] Lima L.S. e Pires A.S.T., Solid State Commun. **148** (2008) 541-544.

Publicações:

1. Dynamics of the quantum integer spin S one-dimensional Heisenberg antiferromagnet coupled to phonons.
L S Lima and A S T Pires
J. Phys.: Condens. Matter 19 (2007) 436218.
2. The phase diagram and critical properties in the two-dimensional anisotropic XY model.
A S T Pires, L S Lima and M E Gouvea
J. Phys.: Condens. Matter 20 (2008) 015208.
3. Spin dynamics in the one-dimensional $S = 1$ antiferromagnet with Dzyaloshinskii-Moriya interaction.
L S Lima and A S T Pires
Journal of Magnetism and Magnetic Materials 320 (2008) 2316-2318.
4. Three magnon process in the one-dimensional integer spin S antiferromagnetic Heisenberg chain.
L S Lima and A S T Pires
Solid State Communications 148 (2008) 541-544.
5. Spin transport in the two-dimensional anisotropic XY model coupled to phonons
L S Lima and A S T Pires
Solid State Communications 149 (2009) 269-272
6. Spin transport in antiferromagnets in one and two dimensions calculated using the Kubo formula
A S T Pires and L S Lima
Physical Review B 79 (2009) 064401.
7. Dynamics of the anisotropic two-dimensional XY model.
L S Lima and A S T Pires
submetido para European Physical Journal B.

8. Low-temperature spin transport in a $S = 1$ one-dimensional antiferromagnet
A S T Pires and L S Lima
aceito para publicação em J. Phys.:Condens. Matter.