



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE
TECNOLOGIA DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM FÍSICA
(CONVÊNIO UFAM/UFSCAR)**

**COMPORTAMENTO MULTICRÍTICO
NO
MODELO DE HEISENBERG FRUSTRADO:
TRANSIÇÕES DE FASES
CLÁSSICA E QUÂNTICA**

POR

WAGNER ANTÔNIO DA SILVA NUNES

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA**

**Comportamento Multicrítico
no
Modelo de Heisenberg Frustrado:
Transições de Fases Clássica e Quântica**

por

Wagner Antônio da Silva Nunes

Tese apresentada ao Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos como parte dos pré-requisitos para a obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador:

Prof. Dr. José Ricardo de Sousa

Co-orientador:

Prof. Dr. José Roberto Viana

Apoio financeiro:

FAPEAM

2014

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária/UFSCar**

N972cm

Nunes, Wagner Antonio da Silva.

Comportamento multicrítico no modelo de Heisenberg frustrado : transições de fases clássica e quântica / Wagner Antonio da Silva Nunes. -- São Carlos : UFSCar, 2014.
212 f.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2011.

1. Spintrônica. 2. Spin. 3. Ondas de spin. 4. Teoria do campo efetivo. I. Título.

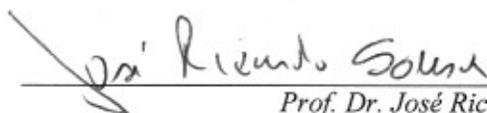
CDD: 537.622 (20^a)

Wagner Antonio da Silva Nunes

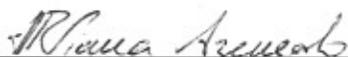
Tese de Doutorado submetida à
Coordenação do Programa de Pós-
Graduação em Física, da Universidade
Federal de São Carlos, como requisito
parcial para a obtenção do título de
Doutor em Ciências.

Aprovada em 01/09/2011.

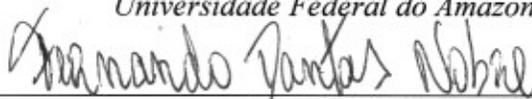
BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. José Ricardo de Sousa
Universidade Federal do Amazonas - DF



Prof. Dr. José Roberto Viana
Universidade Federal do Amazonas - DF



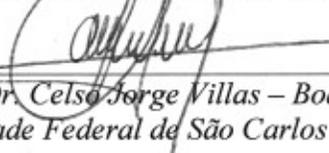
Prof. Dr. Fernando Dantas Nobre
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - DF



Prof. Dr. Ivon Palmeiras Pittipaldi
Universidade Federal de Pernambuco - DF



Prof. Dr. Octávio Daniel Rodriguez Salmon
Universidade Federal do Amazonas - DF



Prof. Dr. Celso Jorge Villas - Boas
Universidade Federal de São Carlos - DF

Agradecimentos

Agradeço a Deus Senhor da vida.

A todos os meus familiares, principalmente às duas mulheres da minha vida: minha mãe, Maria Auxiliadora da Silva Nunes e minha esposa, Mariluce de Souza Nunes pela paciência nesses últimos anos.

Agradeço aos meus amigos da pós-graduação e os amigos do Departamento de Física da UFAM.

Agradeço especialmente ao meu orientador Prof. Dr. José Ricardo de Sousa por todo incentivo, paciência e ensinamentos durante todos estes anos de sua permanência em Manaus.

Agradeço também de forma especial ao meu co-orientador Prof. Dr. José Roberto Viana pela grande contribuição dada na construção deste trabalho.

Dedicado ao meu filho Raphael de Souza Nunes.

RESUMO

Neste trabalho estudamos o comportamento multicrítico de sistemas descritos pelo modelo de Heisenberg anisotrópico de spin $1/2$ com interações competitivas (modelo $J_1 - J_2$) no plano e interação de primeiros vizinhos entre planos acoplados pelo parâmetro λ na rede cúbica simples. Aplicamos as técnicas de Teoria de Campo Efetivo, em aglomerados finitos com dois (EFT-2) e quatro (EFT-4) sítios, e Teoria de Ondas de Spin Linear (LSWT). Designamos por $\alpha = J_2/J_1$ o parâmetro de frustração, fenômeno este característico do modelo e construímos diagramas de fases em função deste, do parâmetro de anisotropia de exchange Δ e espacial λ . Pela Teoria de Campo Efetivo estudamos as transições de fase apresentadas pelo modelo nos regimes de temperaturas não nula (transição de fases clássica) e no estado fundamental $T = 0$ (transição de fases quânticas). Analisamos os casos com interação de primeiros vizinhos ferromagnéticas ou antiferromagnéticas. Observamos a presença dos estados ferromagnético (antiferromagnético) (F(AF)), paramagnético quântico (PQ), colinear ferromagnético (CF) e colinear antiferromagnético (CAF) no estado fundamental para $J_1 < 0$ e $J_1 > 0$ e caracterizamos o tipo de transição (contínua ou descontínua) existente entre eles. Da mesma forma para $T > 0$, onde os estados que se apresentaram são os mesmos estados anteriores (exceto a PQ) e o estado paramagnético normal (P). Os estados CAF e CF são caracterizados em três dimensões da seguinte maneira: linhas de spins com a mesma orientação adjacentes a linhas com orientações opostas (CAF) e planos de spins com mesma orientação adjacentes com planos de orientação oposta (CF). Em duas dimensões estes dois estados são equivalentes. Fizemos a análise dos limites clássicos e quânticos do modelo através

da destruição da fase PQ nos casos ferromagnético e antiferromagnético sob a influências das anisotropias.

Aplicamos também ao modelo frustrado no plano e interação λ entre planos a Teoria de Ondas de Spin Linear e comparamos os seus resultados com aqueles encontrados pela Teoria de Campo Efetivo.

Abstract

In this work we study the critical behavior of systems described by the Anisotropic-Heisenberg model of spin 1/2 with competitive interactions (J_1 - J_2 Model) on planes, and interplane nearest-neighbor interactions. We applied Effective-Field techniques for finite clusters with two (EFT2) and four (EFT4) central sites, as well as Linear Spin-Waves Theory (LSWT). We define $\alpha=J_2/J_1$, as the frustration parameter, which together with the anisotropy exchange and the spatial one λ , we obtain the respective phase diagrams. Classic phase transitions are studied at finite temperatures, as well as the quantum ones at $T=0$. We observed the presence of two ferromagnetic (antiferromagnetic) states, a quantum paramagnetic, colinear ferromagnetic (CF) and antiferromagnetic (CAF) at $T=0$ for $J_1 < 0$ and $J_1 > 0$. We characterized the type of transition (continuous or discontinuous) existing in them. For $T > 0$, the same phases are found, with the exception of the quantum and the normal paramagnetic ones. The CAF and CF states are characterized in three dimensions in the following way: spin lines with the same orientation adjacent to lines in the opposite sense, and spin planes with the same orientation adjacent to spin planes with opposite sense. In the two dimensions these two states are equivalent. We analyze the classical and quantum limits of the model through the phase destruction of PQ in the ferromagnetic and antiferromagnetic case under the influence of anisotropies.

We also applied to the frustrated model in the plane and the λ interaction between planes the Theory of Linear Spin Waves and compared their results with those found for the Effective Field Theory.

Sumário

Resumo	xvii
Abstract	xviii
1 Introdução	1
1.1 Considerações Gerais	1
1.2 Modelagem magnética	8
1.2.1 O Hamiltoniano de Heisenberg	8
1.2.2 Anisotropias	13
1.3 Transição de Fases e Fenômenos Críticos	17
1.3.1 Transição de Fases Clássica	19
1.3.2 Classe de Universalidade	23
1.3.3 Transição de Fases Quântica	26
1.3.4 Teoria de Escala em Transição de Fases Quântica	29
1.4 Organização da Tese	32
2 Teoria de Campo Efetivo	35
2.1 Introdução	35
2.2 A Identidade de Callen-Suzuki	37
2.3 A Técnica do Operador Diferencial	40
2.4 Outras Aproximações na Teoria de Campo Efetivo	48
2.5 Transição de Fase Descontínua e Energia Livre	55

3 Modelos Magnéticos com Interações Competitivas: Teoria de Campo Efetivo	61
3.1 Introdução	61
3.2 Compostos de Vanádio e o Modelo de Heisenberg Frustrado	63
3.3 Modelo J_1-J_2 Heisenberg com Interação entre Planos	70
3.3.1 Teoria de Campo Efetivo em Aglomerado com dois Spins (EFT-2)	72
3.3.2 Teoria de Campo Efetivo em Aglomerado com quatro Spins (EFT-4)	82
3.4 Resultados	96
3.5 Método EFT-2	99
3.5.1 Caso Antiferromagnético	99
3.5.2 Caso Ferromagnético	112
3.6 Método EFT-4	126
3.6.1 Caso Antiferromagnético	126
3.6.2 Caso Ferromagnético	133
4 Teoria de Ondas de Spins	149
4.1 Introdução	149
4.2 Transformações de Holstein e Primakoff	158
4.3 Teoria de Onda de Spins Linear	161
4.3.1 Modelo de Heisenberg Ferromagnético	161
4.3.2 Modelo de Heisenberg Antiferromagnético	165
5 Modelo de Heisenberg com Interações Competitivas. Teoria de Onda de Spins Linear	176
5.1 Introdução	176
5.2 Estado Antiferromagnético (AF)	179
5.3 Estado Colinear	181
5.3.1 Estado Colinear Antiferromagnético (CAF)	181
5.3.2 Estado Colinear Ferromagnético (CF)	182

5.4	Magnetização de Subrede	182
5.5	Estado Ferromagnético (F)	186
5.6	Resultados	188
6	Conclusões e Perspectivas Futuras	199
A	Procedimentos Numéricos	203
A.1	Processo de Diagonalização de Matrizes de Ordem 16	203
A.1.1	Construção das Matrizes	204
A.1.2	Diagonalização Numérica	208

Lista de Figuras

1.1	Configuração dos spins no ordenamento colinear no caso clássico na rede quadrada. J_1 e J_2 (ao longo das diagonais) correspondem as interações entre os spins primeiros e segundos vizinhos, respectivamente.	4
1.2	No lado esquerdo apresentamos o diagrama de fases no estado fundamental do modelo $J_1 - J_2$ na rede quadrada. Na região $0.35 \leq \alpha \leq 0.65$ o modelo apresenta um estado fundamental desordenado ainda desconhecido. No lado direito temos a estrutura dos compostos de óxidos de vanádio projetado ao longo da direção [001].	5
1.3	Representação esquemática da rede pyrochlore. Os círculos pretos indicam os sítios situados sobre os vértices dos tetraédros.	7
1.4	Equivalência entre os sistemas fluido e magnético quanto a transição de fases [23].	18
1.5	No lado esquerdo mostramos o cruzamento dos níveis de energia e no direito esses níveis se repelem, a medida que g se aproxima do valor crítico g_c	27
1.6	Diagrama de fases na vizinhança do ponto crítico g_c	29
2.1	Aglomerado com um spin central σ_1 na rede quadrada e seus vizinhos mais próximos $\{\sigma_a, \sigma_b, \sigma_c, \sigma_d\}$	44
2.2	Convergência da temperatura crítica T_c obtida por EFT-1 para o valor obtido por MFA.	49

3.1	Estrutura do composto $Li_2VO Si O_4$. Os ions de Li são mostradas como esferas cinzas. O quadrado tracejado indica a rede com interações $J_1 - J_2$. Em (a) temos a visão paralela aos planos de $VOPO_4$ e em (b) paralela ao eixo c	65
3.2	Diagrama de fases no plano $H - T$ para o composto $Pb_2VO(PO_4)_2$	66
3.3	Comportamento da magnetização em função da temperatura reduzida T/T_c para os compostos de vanádio Li_2VOGeO_4 , $Li_2VO Si O_4$ e $VOMoO_4$	67
3.4	Calor específico a pressão constante em monocristais de $Pb_2VO(PO_4)_2$ em função da temperatura. Detalhe: contribuição total para o calor específico em baixas temperaturas.	68
3.5	Estado fundamental antiferromagnético numa rede cúbica simples no aglomerado com $N=2$ spins. Os dois spins do aglomerado ($i = 1, 2$) são denotados por $\vec{S}_{iA,B}$ e os seus vizinhos por σ_i (variável de Ising). Os círculos pretos e vermelhos indicam as orientações opostas dos spins adjacentes em todas as direções.	71
3.6	Estado fundamental colinear antiferromagnético numa rede cúbica simples no aglomerado com $N=2$ spins. Os dois spins do aglomerado ($i = 1, 2$) são denotados por $\vec{S}_{iA,B}$ e os seus vizinhos por σ_i (variável de Ising). Os círculos pretos e vermelhos indicam as orientações opostas dos spins em linhas paralelas adjacentes e de mesma orientação sobre uma mesma linha (paralela a folha por construção).	77
3.7	Estado fundamental ferromagnético numa rede cúbica simples no aglomerado com $N=2$ spins. Os dois spins do aglomerado ($i = 1, 2$) são denotados por $\vec{S}_{iA,B}$ e os seus vizinhos por σ_i (variável de Ising). Em destaque, círculos pretos, estão os spins do aglomerado.	79

3.8	Estado fundamental colinear ferromagnético numa rede cúbica simples no aglomerado com N=2 spins. Os dois spins do aglomerado ($i = 1, 2$) são denotados por $\vec{S}_{iA,B}$ e os seus vizinhos por σ_i (variável de Ising). Os círculos pretos e vermelhos indicam as orientações opostas dos spins em planos paralelos adjacentes e de mesma orientação sobre um mesmo plano (paralelo à folha por construção).	81
3.9	Estado fundamental antiferromagnético numa rede cúbica simples no aglomerado com N=4 spins. Os sítios do aglomerado são denotados por $\{\vec{S}_1, \vec{S}_2, \vec{S}_3, \vec{S}_4\}$ e os seus vizinhos por variáveis Ising $\vec{S}_i = \sigma_i \hat{z}$. As regiões destacadas na figura foram construídas para melhor visualização.	83
3.10	Estado fundamental colinear antiferromagnético numa rede cúbica simples no aglomerado com N=4 spins. Os sítios do aglomerado são denotados por $\{\vec{S}_1, \vec{S}_2, \vec{S}_3, \vec{S}_4\}$ e os seus vizinhos por variáveis Ising $\vec{S}_i = \sigma_i \hat{z}$. As regiões destacadas na figura foram construídas para melhor visualização.	87
3.11	Estado fundamental colinear ferromagnético numa rede cúbica simples no aglomerado com N=4 spins. Os spins do aglomerado são denotamos por $\{\vec{S}_1, \vec{S}_2, \vec{S}_3, \vec{S}_4\}$ e os seus vizinhos por variáveis de Ising $\vec{S}_i = \sigma_i \hat{z}$. As regiões destacadas na figura foram construídas para melhor visualização.	90
3.12	Estado fundamental ferromagnético numa rede cúbica simples no aglomerado com N=4 spins. Os spins do aglomerado são denotamos por $\{\vec{S}_1, \vec{S}_2, \vec{S}_3, \vec{S}_4\}$ e os seus vizinhos por variáveis de Ising $\vec{S}_i = \sigma_i \hat{z}$. As regiões destacadas na figura foram construídas para melhor visualização.	93

3.13	Diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg anti-ferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-2. A linha contínua corresponde à transição de segunda ordem, as linhas tracejadas correspondem as transições de primeira ordem e o ponto em negrito é o ponto crítico terminal quântico. Os símbolos AF, CAF e PQ denotam os estados fundamentais antiferromagnético, colinear antiferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente.	100
3.14	Comportamento da magnetização de subrede (parâmetro de ordem) em $T = 0$ K dos estados AF e CAF como função do parâmetro de frustração α do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg Antiferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-2 para valores de λ crescentes indicados na figura.	101
3.15	Diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg antiferromagnético anisotrópico ($\Delta = 0.2$) obtido via EFT-2. A linha contínua corresponde à transição de segunda ordem, as linhas tracejadas correspondem as transições de primeira ordem e o ponto em negrito é o ponto crítico terminal quântico. Os símbolos AF, CAF e PQ denotam os estados fundamentais antiferromagnético, colinear antiferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente.	103
3.16	Diagrama de fases no estado fundamental no plano $\Delta - \alpha$ para o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnético anisotrópico numa rede $3d$ (cúbica simples) com diversos valores de $\lambda = 0.2, 0.4$ obtido via EFT-2. As linhas contínuas e tracejadas correspondem as transições de 2^a e 1^a ordem, respectivamente.	104
3.17	Diagrama de fases no estado fundamental no plano $\Delta - \alpha$ para o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnético anisotrópico numa rede $2d$ (quadrada), obtido por Viana e de Sousa. As linhas contínuas e tracejadas correspondem as transições de 2^a e 1^a ordem, respectivamente.	105

3.18	Diagrama de fases no estado fundamental no plano $\Delta - \alpha$ para o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg Antiferromagnético numa rede $3d$ (cúbica simples) anisotrópica com $\lambda = 0.55$ obtido via EFT-2. A linha tracejada corresponde a transição de 1^a ordem entre as fases AF e CAF.	106
3.19	Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ para o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg Antiferromagnético anisotrópico numa rede quadrada ($\lambda = 0$) com diversos valores do parâmetro de anisotropia $\Delta = 0$ (isotrópico), 0.5 e 1.0 (Ising) obtido via EFT-2 por Viana e de Sousa. As linhas contínuas e tracejadas correspondem as transições de 2^a e 1^a ordem, respectivamente. Os pontos em meia lua correspondem aos pontos tricríticos.	108
3.20	Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ para o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg Antiferromagnético Isotrópico ($\Delta = 0$) numa rede $3d$ (cúbica simples) anisotrópica com diversos valores de $\lambda = 0.2, 0.4, 0.55$ obtido via EFT-2. As linhas contínuas e tracejadas correspondem às transições de 2^a e 1^a ordem, respectivamente. Os pontos em meia lua correspondem aos pontos tricríticos.	110
3.21	Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ para o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg isotrópico ($\Delta = 0$) numa rede $3d$ (cúbica simples) anisotrópica com valores de $\lambda (> \lambda_1 = 0.55) = 0.8, 1.0$ obtido via EFT-2. As linhas contínuas e tracejadas correspondem às transições de 2^a e 1^a ordem, respectivamente. Os pontos em meia lua correspondem aos pontos tricríticos e os em negrito aos pontos críticos terminais.	111
3.22	Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ para o modelo $J_1 - J_2$ modelo de Heisenberg numa rede cúbica simples obtido por simulação de Monte Carlo [13]. Os símbolos I, II e III representam os estados AF, CAF e P, respectivamente.	112

3.23	Diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-2. As linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e o ponto em negrito é o ponto triplo quântico. Os símbolos F, CF e PQ denotam os estados fundamentais ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente.	114
3.24	Diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético anisotrópico ($\Delta = 0.1$) obtido via EFT-2. As linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e o ponto em negrito é o ponto triplo quântico. Os símbolos F, CF e PQ denotam os estados fundamentais ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente.	116
3.25	Diagrama de fases no estado fundamental no plano $\Delta - \alpha$ para o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg ferromagnético numa rede quadrada ($\lambda = 0$) anisotrópica obtido via EFT-2. As linhas tracejadas indicam as transições de 1ª ordem entre os estados F-PQ e PQ-CF.	117
3.26	Diagrama de fases no estado fundamental no plano $\Delta - \alpha$ para o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg isotrópico ($\Delta = 0$) numa rede $3d$ (cúbica simples) anisotrópica com diversos valores de $\lambda = 0.08$ obtido via EFT-2. As linhas tracejadas correspondem às transições de 1ª ordem.	118
3.27	Diagrama de fases no estado fundamental no plano $\Delta - \alpha$ para o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg Ferromagnético numa rede $3d$ (cúbica simples) anisotrópica com acoplamento entre planos $\lambda = 0.153$ obtido via EFT-2. A linha tracejada corresponde a transição de 1ª ordem entre os estados F-CF.	119

- 3.28 Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético anisotrópico na rede quadrada ($\lambda = 0.0$) obtido por Viana EFT-2 para $\Delta = 0.0, 0.5$ e 1.0 . As linhas contínuas correspondem às transições de segunda ordem e as linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e os pontos em meia lua correspondem aos pontos tricríticos. Os símbolos F, CF e P denotam os estados ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético, respectivamente. 123
- 3.29 Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-2 ($J_1 < 0$) para $\lambda = 0.0, 0.1$ e 0.15 . As linhas contínuas correspondem às transições de segunda ordem e as linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e os pontos em meia lua correspondem aos pontos tricríticos. Os símbolos F, CF e P denotam os estados ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético, respectivamente. 124
- 3.30 Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-2 ($J_1 < 0$) para $\lambda = 0.6$. As linhas contínuas correspondem às transições de segunda ordem e as linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e o ponto em meia lua corresponde ao ponto tricrítico. Os símbolos F, CF e P denotam os estados ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético, respectivamente. O ponto em negrito corresponde ao ponto triplo. 125
- 3.31 Diagrama de fases do estado fundamental no plano $\alpha - \lambda$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg antiferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-4. A linha contínua corresponde à transição de segunda ordem, as linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e o ponto em negrito é o ponto crítico terminal quântico. Os símbolos AF, CAF e PQ denotam os estados fundamentais antiferromagnético, colinear antiferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente. 127

3.32	Comportamento da magnetização de subrede (parâmetro de ordem) em $T = 0$ dos estados AF e CAF como função do parâmetro de frustração α do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-4 para valores crescentes de λ indicados na figura.	130
3.33	Diagrama de fases do estado fundamental no plano $\Delta - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg antiferromagnético anisotrópico obtido via EFT-4. As linhas cheia e tracejada correspondem às transições de segunda e de primeira ordens. Os símbolos AF, PQ e CAF indicam os estados fundamentais antiferromagnético, paramagnético quântico e colinear antiferromagnético, respectivamente.	131
3.34	Diagrama de fases no plano $\Delta - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg antiferromagnético anisotrópico obtido via EFT-4 para $\lambda = 0.65$. A linha tracejada corresponde à transição de primeira ordem entre os estados fundamentais antiferromagnético (AF) e colinear antiferromagnético (CAF).	132
3.35	Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg antiferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-4 para $\lambda = 0.8$. As linhas contínuas correspondem às transições de segunda ordem e as linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem, os pontos em meia lua correspondem aos pontos tricríticos e o ponto em negrito indica o ponto crítico terminal. Os símbolos AF, CAF e P denotam os estados fundamentais antiferromagnético, colinear antiferromagnético e paramagnético, respectivamente. Mostra-se o desaparecimento da fases desordenada em $T = 0$ com transição direta entre as fases AF e CAF.	134

3.36	Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg antiferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-4 ($J_1 < 0$) para $\lambda = 0.0, 0.1, 0.3$ e 0.5 . As linhas contínuas correspondem às transições de segunda ordem e as linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e os pontos em meia lua correspondem aos pontos tricríticos. Os símbolos AF, CAF e P denotam os estados antiferromagnético, colinear antiferromagnético e paramagnético, respectivamente.	135
3.37	Diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-4 ($J_1 < 0$). As linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e o ponto em negrito é o ponto triplo quântico. Os símbolos F, CF e PQ denotam os estados fundamentais ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente.	136
3.38	Magnetizações dos estados F e CF no estado fundamental ($T = 0$) e com parâmetro de interação entre planos $\lambda = 0.1$ no limite isotrópico ($\Delta = 0$) em aglomerado com $N = 4$ spins.	137
3.39	Diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ do modelo $J_1 - J_2$ Ising obtido via EFT-4. A linha tracejada corresponde à transição de primeira ordem. Os símbolos F e CF denotam os estados fundamentais ferromagnético e colinear ferromagnético, respectivamente.	138
3.40	Diagrama de fases no plano $\Delta - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético obtido via EFT-4 na rede quadrada ($\lambda = 0.0$). As linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem. Os símbolos F, CF e PQ, indicam os estados fundamentais ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente.	139

- 3.41 Diagrama de fases no plano $\Delta - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético anisotrópico obtido via EFT-4 ($J_1 > 0$) para $\lambda = 0.1$. As linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem. Os símbolos F, CF e PQ, indicam os estados fundamentais ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente. O ponto em negrito corresponde ao ponto triplo quântico. 140
- 3.42 Diagrama de fases no plano $\Delta - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético anisotrópico obtido via EFT-4 para $\lambda = 0.21$. A linha tracejada corresponde a transição de primeira ordem. Os símbolos F e CF, indicam os estados fundamentais ferromagnético e colinear ferromagnético, respectivamente. 141
- 3.43 Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-4 ($J_1 < 0$) para $\lambda = 0.0, 0.1$ e 0.21 . As linhas contínuas correspondem às transições de segunda ordem, as linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e os pontos em meia lua correspondem aos pontos tricríticos. Os símbolos F, CF e P denotam os estados ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético, respectivamente. 142
- 3.44 Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-4 ($J_1 < 0$) para $\lambda = 0.5$. As linhas contínuas correspondem às transições de segunda ordem, as linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e o ponto em meia lua corresponde ao ponto tricrítico. Os símbolos F, CF e P denotam os estados ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético, respectivamente. O ponto em negrito corresponde ao ponto crítico terminal. 143

5.1	Comportamento da magnetização de subrede (parâmetro de ordem) em $T = 0$ dos estados AF e CAF como função do parâmetro de frustração α no modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via Teoria de Ondas de Spin Linear em ordem crescente de λ indicados na figura.	190
5.2	Comportamento da magnetização de subrede (parâmetro de ordem) em $T = 0$ dos estados AF e CAF como função do parâmetro de frustração α no modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnético anisotrópico na rede quadrada ($\lambda = 0$) obtido via Teoria de Ondas de Spin Linear para valores crescentes da anisotropia Δ indicados na figura.	191
5.3	Diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ do estado fundamental do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via Teoria de Ondas de Spin Linear. A linha cheia corresponde à transição de 2 ^a ordem e as tracejadas as transições de 1 ^a ordem e o ponto em negrito é o ponto crítico terminal quântico. Os símbolos AF, CAF e PQ denotam os estados antiferromagnético, colinear antiferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente.	192
5.4	Diagrama de fases no plano $\Delta - \alpha$ do estado fundamental do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnético anisotrópico na rede quadrada ($\lambda = 0$) obtido via Teoria de Ondas de Spin Linear para interação de primeiros vizinhos antiferromagnética ($J_1 > 0$). A linha cheia corresponde a transição de 2 ^a ordem e as tracejadas as transições de 1 ^a ordem e o ponto em negrito é o ponto crítico terminal quântico. Os símbolos AF, CAF e PQ denotam os estados antiferromagnético, colinear antiferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente.	193

- 5.5 Comportamento da magnetização de subrede (parâmetro de ordem) em $T = 0$ dos estados F e CF como função do parâmetro de frustração α no modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg ferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via Teoria de Ondas de Spin Linear em ordem crescente de λ indicado na figura. 194
- 5.6 Diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ do estado fundamental do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg ferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via Teoria de Ondas de Spin Linear para a interação de primeiros vizinhos ferromagnética. As linhas tracejadas correspondem às transições de 1ª ordem e o ponto em negrito é o ponto triplo quântico. Os símbolos F, CF e PQ denotam os estados ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente. 195
- 5.7 Diagrama de fases no plano $\Delta - \alpha$ do estado fundamental do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg ferromagnético anisotrópico na rede quadrada ($\lambda = 0$) obtido via Teoria de Ondas de Spin Linear. As linhas tracejadas correspondem às transições de 1ª ordem e o ponto em negrito é o ponto triplo quântico. Os símbolos F, CF e PQ denotam os estados ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente. 196

Lista de Tabelas

I.1	Valores teóricos e experimentais dos expoentes críticos	25
II.1	Valores para a temperatura crítica reduzida para o modelo de Ising de spin 1/2 em diversas topologias.	55
III.1	Valores estimados para o ponto crítico terminal quântico obtido pelos métodos CCM, FG, SWL, SE, EFT-2 e EFT-4.	129
IV.1	Comparação da energia média por spin no estado fundamental (em unidades de J) do modelo de Heisenberg Antiferromagnético de spin 1/2 numa rede quadrada calculada por vários métodos.	171
IV.2	Comparação da magnetização de subrede por spin em $T=0$ do modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin 1/2 numa rede quadrada calculada por vários métodos.	172

Capítulo 1

Introdução

1.1 Considerações Gerais

Nos tempos de hoje estamos na transição para um período de grandes e velozes transformações da sociedade, sobretudo no que diz respeito aos avanços da ciência e da tecnologia. Nesse sentido, o estudo de compostos magnéticos tem contibuído, em especial, para importantes resultados tanto do ponto de vista da física teórica quanto experimental na área da Física da Matéria Condensada em baixas dimensões. Dentre esses resultados, importantes e profundas implicações no comportamento dos materiais em baixas temperaturas são provenientes do conceito de frustração, com o aparecimento de novos e excêntricos fenômenos e de novos estados magnéticos, e suas possíveis conexões com o entendimento microscópico da supercondutividade em altas temperaturas. A presença de frustração magnética é decorrente da incapacidade apresentada pelo sistema em satisfazer todas as interações entre o conjunto de seus spins e minimizar a sua energia. Esta incapacidade pode ser originada como reflexo da natureza geométrica da distribuição dos spins na rede (frustração geométrica) ou de competições energéticas entre eles (interações competitivas). Como exemplo da aplicação da frustração geométrica podemos citar: o entendimento do funcionamento de redes neurais [1], na funcionalidade de proteínas em sistemas biológicos [2] e na supercondutividade em altas temperaturas [3], entre outros.

No domínio de baixas dimensões e temperaturas, a Física Quântica é fundamental na descrição microscópica dos sistemas físicos. Neste domínio os efeitos térmicos são desprezíveis e as flutuações nas grandezas físicas são decorrentes de efeitos puramente quânticos. Um protótipo teórico para estudar flutuações quânticas é o modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin $S = 1/2$ numa rede quadrada [4,5]. Em $T = 0 K$ (estado fundamental), tem sido provado através de diversas técnicas rigorosas (Monte Carlo, expansão em série, diagonalização exata) que este modelo apresenta ordem de longo alcance com uma redução da magnetização de subrede do seu valor clássico, isto é, $\Delta m_A = S - m_A(0)$. Este desvio da magnetização deve-se sobretudo às flutuações quânticas geradas pela superposição de estados de configurações de spins, cujo valor total da componente z do spin seja nula. O não entendimento correto do verdadeiro estado fundamental deste modelo, conduz a maior motivação para estudar as propriedades estática e dinâmica, incluindo uma variedade de interações. Para um modelo clássico ($S \rightarrow \infty$), o estado fundamental é caracterizado por spins numa rede (não frustrada) cristalina arranjados em direções opostas alternadas nos sítios. Denotamos este estado de Néel $|\psi_0\rangle_N$ como sendo o estado fundamental. Por outro lado, para o sistema quântico ($S < \infty$), $|\psi_0\rangle_N$ não é autoestado do Hamiltoniano Heisenberg AF e, conseqüentemente, não corresponde ao seu estado fundamental.

As flutuações quânticas são extremamente dependentes da dimensionalidade (d) da rede e do valor (S) do spin. Por exemplo, para a rede quadrada ($d = 2$) temos em $T = 0 K$ uma redução da magnetização da subrede Δm_A que deve decrescer monotonicamente com o aumento do valor S do spin, sendo nula esta redução no limite clássico ($\vec{S} = \infty$). Em uma dimensão as flutuações quânticas são tão intensas a ponto de desestabilizar a ordem AF no modelo de Heisenberg quântico ($S < \infty$), ou seja, este modelo é desordenado mesmo em $T = 0 K$ [4]. Em temperatura finita ($T > 0 K$), o modelo de Heisenberg isotrópico quântico é desordenado[6], devido as flutuações térmicas, em redes $d = 1, 2$, mas, em $d = 3$ tem uma ordem para $T < T_N$ (temperatura de Néel). Em duas dimensões e na presença de anisotropia na interação de troca no Hamiltoniano de Heisenberg, devido

a quebra de simetria de rotação, o sistema é ordenado para $T < T_N(\Delta)$ (onde Δ é a anisotropia de troca, tal que, $\Delta = 0$ e $\Delta = 1$ correspondem aos limites Heisenberg isotrópico e Ising, respectivamente). O valor $T_N(\Delta)$ decresce monotonicamente quando a anisotropia Δ diminui, e no limite $\Delta \rightarrow 0^+$ temos um comportamento assintótico do tipo $T_N(\Delta) \approx [\ln(1/\Delta)]^{-1}$.

Considere o modelo de Heisenberg AF com spin geral S , onde o crossover de dimensionalidade $d = 2$ para $d = 3$ é representado por um parâmetro λ , de modo que $\lambda = 0$ e $\lambda = 1$ correspondem aos limites de uma rede quadrada e cúbica simples, respectivamente. Fisicamente, o parâmetro λ acopla os planos da rede cúbica simples, tal que, para $\lambda = 0$ teremos um conjunto de planos desacoplados representando assim o modelo na rede quadrada. Portanto, a medida que λ cresce as flutuações quânticas diminuem gradativamente, a ponto de destruir alguma fase originariamente existente na rede quadrada. Ou seja, deve existir um valor característico λ_c no modelo no qual, para $\lambda < \lambda_c$ o sistema é governado por propriedades fundamentais em $d = 2$ e para $\lambda > \lambda_c$ com propriedades em $d = 3$.

Seja agora a presença da anisotropia de troca Δ como a mencionada anteriormente. A medida que esta anisotropia cresce em direção ao limite clássico do modelo de Ising ($\Delta = 1$) as flutuações quânticas decrescem de modo que, o desvio da magnetização Δm_A também deve decrescer gradativamente e, em $\Delta = 1$ espera-se que Δm_A seja nulo. Surge então uma questão teórica, e que será tema de investigação nesta tese, relacionada a existência num valor característico da anisotropia (Δ_c) pertencente ao intervalo $[0, 1]$. Existe Δ_c tal que para $\Delta < \Delta_c$ temos um regime quântico e para $\Delta > \Delta_c$ temos um regime clássico? Outros ingredientes podem ser introduzidos no Hamiltoniano de Heisenberg AF a fim de investigar as flutuações quânticas e previsão de novos estados magnéticos, como, por exemplo, desordem, frustração, deformação de rede, quebra de periodicidade (quase cristal), etc.

Em sistemas antiferromagnéticos a presença de frustração (geométrica ou competitiva) e de flutuações quânticas reduzem as correlações que estabilizam a fase AF, gerando

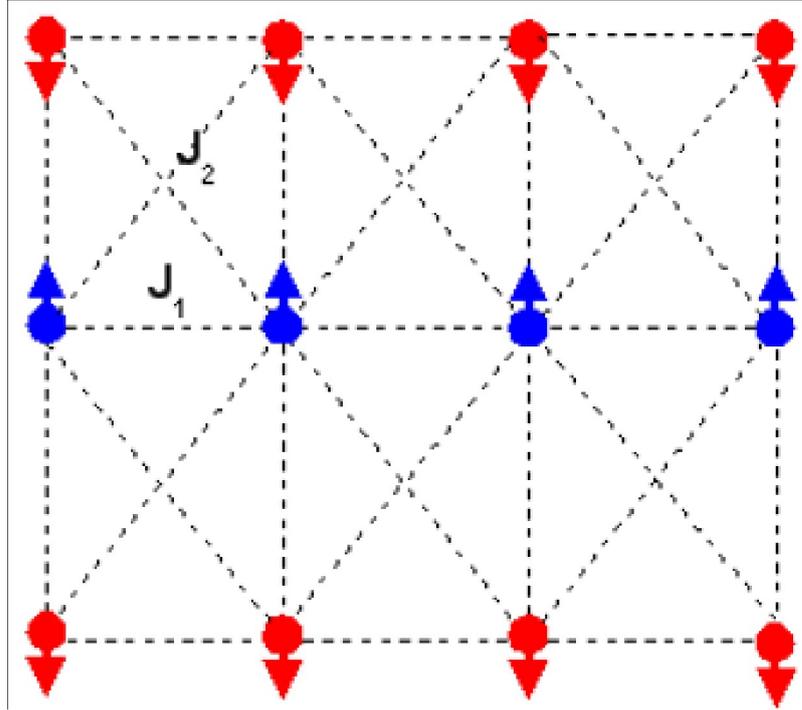


Figura 1.1: Configuração dos spins no ordenamento colinear no caso clássico na rede quadrada. J_1 e J_2 (ao longo das diagonais) correspondem as interações entre os spins primeiros e segundos vizinhos, respectivamente.

novos estados magnéticos. Por exemplo, na rede quadrada, Kohmoto e Friedel [7] analisaram o estado fundamental do modelo de Heisenberg de spin $S = 1/2$ com interações entre primeiros (J_1) e segundos (J_2) vizinhos (modelo $J_1 - J_2$ ¹). Observaram que para $J_2 \ll J_1$, o estado fundamental é o antiferromagnético (AF), enquanto que para $J_2 \gg J_1$, o estado fundamental é caracterizado, classicamente, com uma configuração de spins ordenados paralelamente ao longo da direção horizontal (vertical) e alternados em sentidos opostos na direção perpendicular vertical (horizontal), denominado de estado colinear antiferromagnético (CAF), como mostra a figura 1.1. Foi verificado que existem dois valores característicos da relação $\alpha \equiv J_2/J_1$ onde os estados AF e CAF se manifestam. O primeiro valor $\alpha = \alpha_{1c} \simeq 0.4$ e o segundo é $\alpha = \alpha_{2c} \simeq 0.6$, existindo,

¹Ver página 70.

assim, um estado intermediário desordenado na região $\alpha_{1c} < \alpha < \alpha_{2c}$. Na figura 1.2

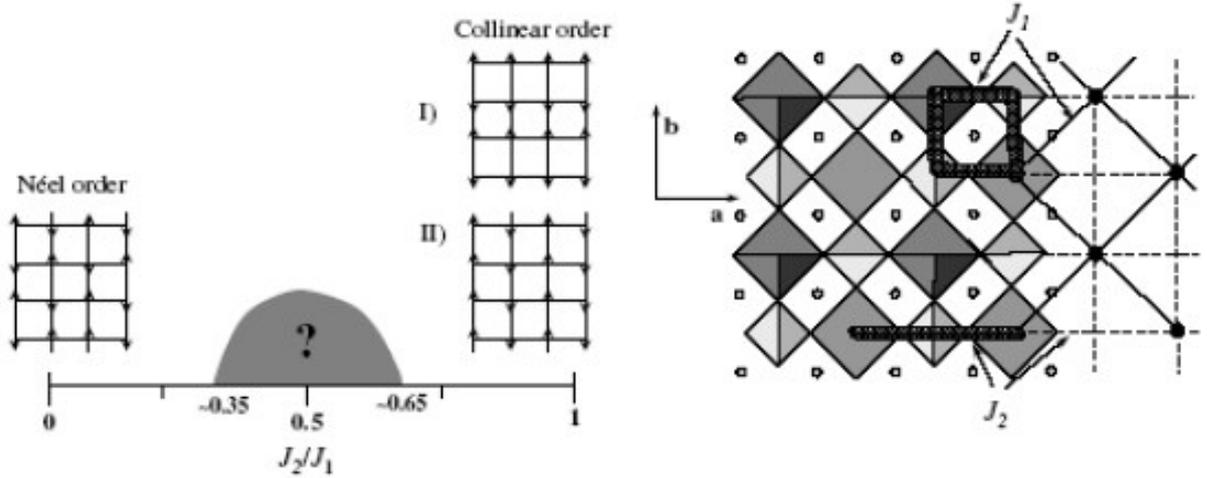


Figura 1.2: No lado esquerdo apresentamos o diagrama de fases no estado fundamental do modelo $J_1 - J_2$ na rede quadrada. Na região $0.35 \leq \alpha \leq 0.65$ o modelo apresenta um estado fundamental desordenado ainda desconhecido. No lado direito temos a estrutura dos compostos de óxidos de vanádio projetado ao longo da direção [001].

está esquematizado o diagrama de fases do estado fundamental do modelo $J_1 - J_2$ na rede quadrada. Existe ainda muita controvérsia sobre a ordem da transição de fase em $\alpha = \alpha_{1c}$ e $\alpha = \alpha_{2c}$ e como é o estado desordenado. De uma maneira geral acredita-se que em $\alpha = \alpha_{1c}$ temos uma transição de fase de segunda ordem entre o estado AF e o estado desordenado que denominaremos de paramagnético quântico (PQ), enquanto que em $\alpha = \alpha_{2c}$ temos uma transição de primeira ordem entre as fases PQ e CAF. Por outro lado, este estado desordenado tem característica diferente do paramagnético clássico que obedece a lei de potência tipo lei de Curie ($\chi_p \approx C/T$, T é a temperatura), uma vez que, o comportamento das propriedades termodinâmicas em baixa temperatura ($T \rightarrow 0$) é do tipo exponencial, manifestando, assim, o aspecto quântico do sistema com a presença de gap (diferença de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental). Por exemplo, enquanto na maioria dos sistemas o comportamento do calor específico em baixa temperatura é do tipo $c_0 \sim T^n$ (lei de potência), nesta fase paramagnética quântica

tica temos um comportamento exponencial $c_0 \approx e^{-\Delta E/T}$ (onde ΔE corresponde ao gap). O estado intermediário PQ não apresenta ordem global (longo alcance), mas sim local (curto alcance), que esquematicamente pode ser visualizado como sendo constituído de configurações de estados singletos (dois spins apontando em sentidos opostos), arranjados aleatoriamente sob toda a rede quadrada, lembrando o arranjo dipolar das moléculas de água, com polarização resultante nula (ausência de ordem de longo alcance). No caso do estado PQ, os “dipolos” podem ser visualizados através de diversos pares de spins numa configuração singlete $|+-\rangle$, gerando assim, uma idéia de um “líquido”. É comum chamar-se este estado paramagnético quântico de líquido de spins LS [8]. Especula-se que o estado LS esteja presente na fase supercondutora [9], que de alguma maneira, ainda não compreendida profundamente, seja responsável pelas propriedades dos compostos supercondutores de altas temperaturas (HTC), onde os pares de Copper estariam acoplados através do gap ($\sim J$), diferindo da teoria BCS, onde o acoplamento é via interação de fônons. A teoria BCS não é capaz de explicar todas as propriedades dos HTC, onde, certamente, o mecanismo, através deste estado LS, deve ser o fundamental para entender estes novos compostos.

Numa rede frustrada de pyrochlore (figura 1.3), que é uma rede tridimensional formada por tetraedros com os spins situados sobre os vértices, Bergman e colaboradores[10] verificaram a existência de uma transição da fase antiferromagnética para o estado líquido de spins.

Quanto ao aspecto da dimensionalidade, uma grande variedade de sistemas têm em até certo grau, propriedades de sistemas unidimensionais, bidimensionais ou quase bidimensionais. Dentre eles os sistemas magnéticos têm, sem sombra de dúvidas, um grande destaque devido a inúmeras quantidades de aplicações tecnológicas, como, por exemplo, na transmissão e armazenamento de dados. Diversos modelos teóricos têm sido propostos no intuito da compreensão do sistema e na descrição correta de suas propriedades. Em particular, o estado fundamental do modelo de Heisenberg de spin 1/2 em uma e em duas dimensões tem sido bastante estudado na literatura, com uma vasta gama de resul-

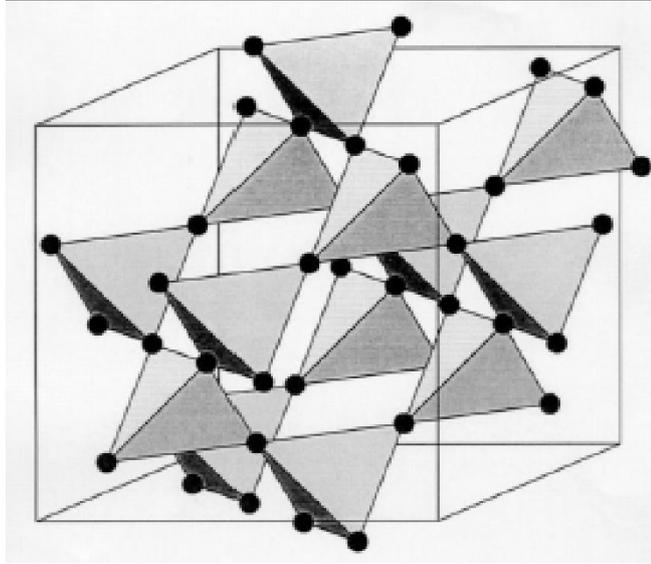


Figura 1.3: Representação esquemática da rede pyrochlore. Os círculos pretos indicam os sítios situados sobre os vértices dos tetraédros.

tados teóricos e experimentais como, por exemplo, a descoberta da transição spin-Peierls [11] no composto $CuGeO_3$ (exemplo de antiferromagneto $1d$ real de spin $S = 1/2$ com frustração), a transição de fase antiferromagnética (Néel) no isolante La_2CuO_4 [12], os férmions pesados [13], etc.

Nesta tese usamos como modelagem do nosso sistema de interesse o modelo de Heisenberg anisotrópico de spin $1/2$ frustrado através de interações competitivas (modelo $J_1 - J_2$). Voltamos nossa atenção, particularmente, a sistemas com acoplamento entre planos em seus primeiros vizinhos, numa rede cúbica simples, e com frustração somente nos planos. Simulamos teoricamente os comportamentos quase bidimensional do modelo para um pequeno fator λ de acoplamento planar, e no limite $\lambda = 0$ o caso bidimensional. Analisamos os comportamentos clássico e quântico do modelo em temperatura finita e no estado fundamental ($T = 0 K$) em função dos parâmetros de anisotropia de troca (Δ), de acoplamento entre planos (λ) e de frustração (α).

1.2 Modelagem magnética

1.2.1 O Hamiltoniano de Heisenberg

Descreveremos sucintamente [14,15] a maneira pela qual uma interação do tipo coulombiana juntamente com o princípio de exclusão de Pauli pode nos levar a um modelo como o descrito pelo Hamiltoniano de Heisenberg. Para isso vamos considerar um sistema com dois elétrons (p. ex. a molécula de H_2), cujo Hamiltoniano sem a presença de graus de liberdade de spin² é dado por

$$H = \left(\frac{\vec{p}_1^2 + \vec{p}_2^2}{2m} \right) + \left(\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{R}_1|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{R}_2|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{R}_1|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{R}_2|} \right), \quad (1.1)$$

onde \vec{p}_i ($i = 1, 2$) é o momento linear do elétron i , e é a sua carga elementar, m a sua massa, \vec{R}_i é a posição do íon (próton) i e \vec{r}_i é a posição do elétron ($i = 1, 2$).

A equação de autovalores no espaço das funções para o sistema é dada por

$$H\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E(1, 2)\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (1.2)$$

onde $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ é a função de onda orbital relativa a duas partículas de posições instantâneas \vec{r}_1 e \vec{r}_2 , e $E(1, 2)$ a energia de configuração das partículas.

De acordo com o princípio de exclusão de Pauli, dois elétrons restritos a mesma região do espaço não podem ter o mesmo conjunto de números quânticos (orbital e de spin). Isto implica na propriedade adicional (e fundamental) que as funções de onda devem obedecer: a simetria ou anti-simetria de acordo com o tipo de partícula. Se as partículas são férmions a função de onda total (incluindo variáveis de spin) é antisimétrica e se são bósons a função é simétrica. Assim, a função de onda total dos elétrons (envolvendo também os graus de liberdade de spin) deve ser anti-simétrica. Incluindo as variáveis de

²Aqui desprezamos a interação do tipo spin-órbita de modo que o Hamiltoniano fica independente das variáveis de spin.

spin σ_1, σ_2 temos

$$\Psi_{\sigma_1\sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi(\sigma_1, \sigma_2), \quad (1.3)$$

com

$$\Psi_{\sigma_1\sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\Psi_{\sigma_1\sigma_2}(\vec{r}_2, \vec{r}_1), \quad (1.4)$$

A “função de onda de spin” ou spinor $\chi(\alpha, \beta)$ representa o estado de dois spins com α e β caracterizando os estados individuais (para cima \uparrow e para baixo \downarrow). Estes spinores caracterizam duas configurações dos spins do elétron : paralelo ou spin 1 (chamada de configuração do estado tripleto) e antiparalelo ou spin 0 (configuração do estado singleto), ou seja,

$$\chi_t(S=1, m) \begin{cases} \chi(\uparrow\uparrow), m=1, \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi(\uparrow\downarrow) + \chi(\downarrow\uparrow)], m=0, \\ \chi(\downarrow\downarrow), m=-1, \end{cases} \quad (1.5)$$

$$\chi_s(S=0, m=0) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi(\uparrow\downarrow) - \chi(\downarrow\uparrow)], \quad (1.6)$$

onde m fornece a posição momentânea na qual o elétron está no orbital ou estado.

Devido ao termo de interação dos elétrons $\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$ a solução da Eq.(1.2) é obtida via teoria de perturbação. Essa teoria estabelece que a solução do problema consiste em resolver a equação secular

$$\det(H - E) = 0, \quad (1.7)$$

onde H é a matriz na base

$$\left\{ \Psi_1^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi_n(\vec{r}_1) \Phi_l(\vec{r}_2), \Psi_2^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi_n(\vec{r}_2) \Phi_l(\vec{r}_1) \right\}.$$

A Eq.(1.7) escrita em termos das auto energias é expressa por

$$\det \begin{bmatrix} \langle H \rangle_{11} - E & \langle H \rangle_{12} \\ \langle H \rangle_{21} & \langle H \rangle_{22} - E \end{bmatrix} = 0, \quad (1.8)$$

com o elemento de matriz

$$\langle H \rangle_{ij} = \int \Psi_i^{0*}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left(\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right) \Psi_j^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2, \quad (1.9)$$

onde

$$\langle H \rangle_{11} = \langle H \rangle_{22} = E_n^0(1) + E_l^0(2) + K, \quad (1.10)$$

e

$$\langle H \rangle_{12} = \langle H \rangle_{21} = J, \quad (1.11)$$

sendo $\Psi_i^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ e $E_n^0(i)$ as autofunções e auto-energias do Hamiltoniano sem o termo de interação $\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$.

Da Eq. (1.8) obtemos

$$E_1(1, 2) = E_n^0(1) + E_l^0(2) + K + J, \quad (1.12)$$

e

$$E_2(1, 2) = E_n^0(1) + E_l^0(2) + K - J, \quad (1.13)$$

com K e J definidas por

$$K = \int \Phi_n^*(\vec{r}_1) \Phi_l^*(\vec{r}_2) \left(\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right) \Phi_n(\vec{r}_2) \Phi_l(\vec{r}_1) d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2, \quad (1.14)$$

e

$$J = \int \Phi_n^*(\vec{r}_1) \Phi_l^*(\vec{r}_2) \left(\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right) \Phi_l(\vec{r}_2) \Phi_n(\vec{r}_1) d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2. \quad (1.15)$$

As autofunções simétrica e anti-simétrica respectivas são

$$\Psi_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Phi_n(\vec{r}_1) \Phi_l(\vec{r}_2) + \Phi_n(\vec{r}_2) \Phi_l(\vec{r}_1) \right], \quad (1.16)$$

$$\Psi_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Phi_n(\vec{r}_1) \Phi_l(\vec{r}_2) - \Phi_n(\vec{r}_2) \Phi_l(\vec{r}_1) \right]. \quad (1.17)$$

Como as funções totais devem ser anti-simétricas, os produtos correspondentes serão

$$\Psi_{\sigma_1 \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \begin{cases} \Psi_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot \chi_s(S=0, m=0), \\ \Psi_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot \chi_t(S=1, m=-1, 0, 1), \end{cases} \quad (1.18)$$

e

$$E_1^{\text{singlete}}(1, 2) = E_n^0(1) + E_l^0(2) + K + J, \quad (1.19)$$

$$E_1^{\text{triplete}}(1, 2) = E_n^0(1) + E_l^0(2) + K - J. \quad (1.20)$$

Aplicando o operador \mathbf{S}^2 em (1.18), obtemos

$$\mathbf{S}^2 \Psi_{\sigma_1 \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = (\mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) \Psi_{\sigma_1 \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \mathbf{S}(\mathbf{S} + 1) \hbar^2 \Psi_{\sigma_1 \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (1.21)$$

onde

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2, \quad (1.22)$$

é o spin total dos dois elétrons.

Distribuindo a Eq.(1.21) encontramos

$$\mathbf{S}^2 \Psi_{\sigma_1 \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = [\mathbf{S}_1(\mathbf{S}_1 + 1) \hbar^2 + \mathbf{S}_2(\mathbf{S}_2 + 1) \hbar^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2] \Psi_{\sigma_1 \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (1.23)$$

onde $S_1(S_1 + 1) \hbar^2$ e $S_2(S_2 + 1) \hbar^2$ são os autovalores dos operadores de spin \mathbf{S}_1^2 , \mathbf{S}_2^2 , respectivamente.

Para spin $\frac{1}{2}$ temos $S(S + 1) = \frac{3}{4}$ de maneira que (1.23) fica escrita como

$$\mathbf{S}^2 \Psi_{\sigma_1 \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \left[\frac{3}{2} \hbar^2 + 2 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \right] \Psi_{\sigma_1 \sigma_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2),$$

o que implica em

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2} \mathbf{S}^2 - \frac{3}{4}. \quad (1.24)$$

Para o estado singlete ($S = 0$) o operador $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ tem o autovalor

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = -\frac{3}{4}, \quad (1.25)$$

e para o estado tripleto ($S = 1$) o autovalor correspondente é

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{1}{4}. \quad (1.26)$$

Como consequência, o operador Hamiltoniano ficará na forma

$$\mathcal{H} = \frac{1}{4} (E^{\text{singlete}} + 3E^{\text{tripleto}}) - (E^{\text{singlete}} - E^{\text{tripleto}}) \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2, \quad (1.27)$$

com autovalores E^{singlete} quando aplicado ao estado singlete e E^{tripleto} quando aplicado aos estados tripletos. Redefinindo o zero de energia temos

$$\mathcal{H} = -J \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2, \quad J = (E^{\text{singlete}} - E^{\text{tripleto}})/2, \quad (1.28)$$

que é conhecida na literatura como *interação de troca* e representa a interação efetiva entre os spins eletrônicos.

Estendendo o tratamento para um sistema com N [16] spins reescrevemos (1.28) como

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.29)$$

onde \mathbf{S}_α ($\alpha = i, j$) representa os operadores de spins localizados nos sítios do cristal e a soma é realizada sobre os primeiros vizinhos, já que a integral de intercâmbio (1.15)

envolve a superposição de funções de onda que decrescem muito rapidamente para pontos distantes e são apreciáveis somente até os limites dos primeiros vizinhos. O Hamiltoniano da equação (1.29) é conhecido como **Modelo de Heisenberg**.

Se $J > 0$, o estado fundamental do sistema é aquele em que os spins ficam alinhados paralelamente que denominamos de estado ferromagnético. Para o caso $J < 0$, o estado fundamental ordena os spins antiparalelamente, o que é chamado de ordem antiferromagnética .

O modelo de Heisenberg, da forma como descrito anteriormente, é isotrópico com relação às variáveis de spin, isto é, o modelo caracteriza a não existência de uma direção preferencial no espaço para o ordenamento coletivo dos spins devido a interação mútua entre eles. Contudo, uma descrição mais realista do mundo intra-atômico requer a consideração de algum tipo de anisotropia³, fato que experimentalmente é facilmente justificável e matematicamente de fácil implementação. Por exemplo, nos cristais reais, as interações entre os spins em direções diferentes, muitas vezes apresentam magnitudes diferentes e valores diferentes de J para cada direção de acoplamento devem refletir esta propriedade. A fim de contemplar e exprimir, por mais que aproximadamente, os diversos tipos de anisotropia [17] presentes na natureza, uma reformulação no modelo de Heisenberg se fez necessária.

1.2.2 Anisotropias

Um primeiro tipo de anisotropia, que quando introduzido no Hamiltoniano (1.29) quebra a simetria rotacional do sistema e induz ordem de longo alcance em duas dimensões [18], é a interação dipolar

$$\mathcal{H}_{dipolar} = -4\mu_B^2 \sum_{(ij)} \left\{ \frac{\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - 3(\vec{r}_{ij} \cdot \mathbf{S}_i)(\vec{r}_{ij} \cdot \mathbf{S}_j)}{r_{ij}^3} \right\}, \quad (1.30)$$

³Os estudos da anisotropia começaram na década de 30, cujo trabalho mais completo foi o de Van Vleck [16]

onde $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ é o vetor posição que separa os íons i e j e μ_B é o magneton de Bohr.

Nos sólidos reais os elétrons apresentam acoplamentos **spin-órbita** com as distribuições de carga dos íons do cristal, que dão origem a campos magnéticos⁴ efetivos nas direções dos eixos cristalino introduzindo anisotropias nas interações de troca e definindo os eixos fáceis de magnetização. Estes eixos fáceis de magnetização são as direções nas quais a magnetização espontânea ocorre preferencialmente. A interação spin órbita, expressa matematicamente pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{\vec{L},\vec{S}} = \sum_i \xi(\vec{r}_i) \mathbf{L}_i \cdot \mathbf{S}_i, \quad (1.31)$$

é a responsável pela estrutura hiperfina do espectro atômico, sendo $\xi(\vec{r}_i) = \frac{1}{2m^2 r_i} \frac{d\phi(\vec{r}_i)}{dr_i}$, com $\phi(\vec{r}_i)$ a energia potencial elétrica entre os elétrons e o núcleo e \mathbf{L}_i e \mathbf{S}_i os momentos angulares orbital e de spin, respectivamente, no sítio i .

A Eq.(1.31) pode ser reescrita, com o auxílio da teoria de perturbação de segunda ordem [19], da seguinte forma

$$\mathcal{H}_{\vec{L},\vec{S}} = \sum_i \sum_i \Lambda_{\alpha\beta}^i \vec{S}_i^\alpha \vec{S}_i^\beta, \quad (1.32)$$

com

$$\Lambda_{\alpha\beta}^i = 2\xi^2 \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{\langle p | L_i^\alpha | l \rangle \langle l | L_i^\beta | p \rangle}{E_p^o - E_l^o}, \quad (1.33)$$

onde $\xi^2 = \langle \xi^2(\vec{r}_i) \rangle$ e E_n^o é o autovalor do Hamiltoniano não perturbado. Levando em conta apenas os termos diagonais do tensor $\Lambda_{\alpha\beta}^i = -D_i \delta_{\alpha z} \delta_{\beta z} - \Omega_i [\delta_{\alpha x} \delta_{\beta x} - \delta_{\alpha y} \delta_{\beta y}]$ chegamos na anisotropia ortorrômbica

$$\mathcal{H}_{ion} = - \sum_i D_i (S_i^z)^2 + \sum_i \Omega_i [(S_i^x)^2 - (S_i^y)^2], \quad (1.34)$$

que se reduz a anisotropia uniaxial

⁴A anisotropia também pode ocorrer devido a interação Zeeman, decorrente da existência de um campo externo que se sobrepõe a região da amostra com presença dos spins.

$$\mathcal{H}_{ion} = - \sum_i D_i (S_i^z)^2, \quad (1.35)$$

no limite de $\Omega_i = 0$.

O termo de anisotropia uniaxial só é relevante para $S > \frac{1}{2}$. Para $S = \frac{1}{2}$ a contribuição deste termo é apenas um *shift* na energia do sistema, já que da álgebra de spin, para cada componente $\nu = x, y, z$ do operador de spin $\frac{1}{2}$, temos $(S_i^\nu)^2 = \frac{1}{4}$. De acordo com o valor da anisotropia D_i , o sistema terá comportamento magnético dos spins no plano x-y ($D_i < 0$), no espaço ($D_i = 0$) e axial ($D_i > 0$).

O tratamento de modelos que apresentam estes tipos de anisotropia é obtido usando-se, por exemplo, o **modelo de Heisenberg anisotrópico com campo externo**

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [\eta_x S_i^x S_j^x + \eta_y S_i^y S_j^y + \eta_z S_i^z S_j^z] - H \sum_i S_i^z. \quad (1.36)$$

No limite de $\eta_z \ll \eta_x$ (η_y) o Hamiltoniano (1.36) reduz-se ao chamado **modelo XY ou planar**

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [\eta_x S_i^x S_j^x + \eta_y S_i^y S_j^y] - H \sum_i S_i^z. \quad (1.37)$$

No limite de $\eta_x = 0$ e $\eta_y = 0$ temos o **modelo de Ising com campo externo**

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z - H \sum_i S_i^z, \quad (1.38)$$

que para spin $\frac{1}{2}$ e utilizando a definição do operador de spin de Pauli

$$\boldsymbol{\sigma} = 2 \frac{\mathbf{S}}{\hbar}, \quad (1.39)$$

fica

$$\mathcal{H} = \frac{-J}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z. \quad (1.40)$$

Historicamente, talvez, o modelo estatístico mais famoso, formulado na tentativa de descrever a interação ferromagnética, seja o modelo proposto em 1925 por Ernest Ising, durante sua tese de doutoramento. Embora Ising tenha encontrado resultados inesperados⁵ para o caso unidimensional, o modelo se preserva como referência acadêmica consagrada e o estudo de modelos em dimensões superiores baseados neste modelo ainda se faz bastante presente nos nossos dias, avançando suas fronteiras sobre outras áreas do conhecimento.

Em duas dimensões, de acordo com a solução obtida por Onsager [20], o modelo de Ising apresenta ordem de longo alcance em $T > 0$. Diferentemente, o modelo de **Heisenberg isotrópico**, em uma e em duas dimensões ($d = 1, 2$) e com interação de curto alcance não apresenta ordem de longo alcance em $T > 0$. Este fato foi provado rigorosamente através do **Teorema de Mermin e Wagner** [6] baseado nas desigualdades :

$$|M(T, H)| \leq \begin{cases} \left[\frac{\pi^2 \beta^2 W}{\tan^{-1} \sqrt{\frac{\pi^2 S(S+1)W}{|HM(T,H)|}}} \right]^{\frac{1}{3}} S(S+1) |H|^{\frac{1}{3}}, d = 1 \\ \left[\frac{4\pi\beta W}{\log \left[1 + \frac{\pi^2 S(S+1)W}{|HM(T,H)|} \right]} \right]^{\frac{1}{2}} S(S+1), d = 2 \end{cases} \quad (1.41)$$

onde $W = \sum_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} |J(\mathbf{r} - \mathbf{r}')| |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-2} < \infty$, S é o valor do spin, $\beta = \frac{1}{K_B T}$ e H é o campo externo. No limite de campo nulo ($H = 0$) temos $M(T, 0) = 0$ para o intervalo $T > 0$. Para a interação $J(\vec{r} - \vec{r}')$ variando entre os primeiros vizinhos ou decaindo exponencialmente $e^{-\alpha|\vec{r}-\vec{r}'|}$ a condição $W < \infty$ é satisfeita e o Teorema de Mermin e Wagner pode ser aplicado.

⁵Em uma dimensão, o modelo de Ising não apresenta ordem ferromagnética para temperaturas finitas $T > 0$ o que levou Ising a supor que em dimensões superiores o mesmo ocorreria.

1.3 Transição de Fases e Fenômenos Críticos

Podemos caracterizar as transições de fases definindo um parâmetro ϕ , conhecido como parâmetro de ordem. Uma fase ordenada é caracterizada admitindo-se valor $\phi \neq 0$ para esse parâmetro e, o valor nulo caracteriza a fase não ordenada. Se durante a transição de fases o parâmetro de ordem *vai a zero continuamente* com a variação de algum outro parâmetro (como por exemplo a temperatura) a transição é contínua ou de segunda ordem. Se o mesmo parâmetro sofre descontinuidade a transição é de primeira ordem. Exemplos clássicos de parâmetro de ordem são: a diferença entre as densidades na transição de fases líquida e gasosa ($\phi = \rho_L - \rho_G$), a magnetização em uma transição ferro-para de um ferromagneto ($\phi = M$), entre outros. No primeiro e no segundo exemplos, $\phi \neq 0$ para toda isoterma T , tal que $T < T_c$, onde T_c é uma temperatura de transição característica do sistema observado. Todas as propriedades de cada fase do sistema são bem comportadas, com nenhum comportamento não regular manifestado para esse intervalo de temperaturas. Na Fig.1.4, mostramos as transições de fases sofridas por dois sistemas físicos microscopicamente diferentes: o sistema fluido e o ferromagneto, com os parâmetros de ordem como anteriormente mencionados. Como mostra a figura, estes sistemas apresentam comportamentos completamente análogos com respeito à transição de fases. Abaixo da isoterma crítica ($T = T_c$), as transições são descontínuas, com existência de um patamar à temperatura fixa, separando as duas fases distintas.

Sobre a isoterma crítica a diferença entre as densidades (magnetizações) vai a zero continuamente no fluido (ferromagneto). A transição de fases é crítica ou de segunda ordem. Esse tipo de transição é caracterizado por um comportamento não analítico na energia livre do sistema e conseqüentemente sobre suas derivadas. Nesse ponto o sistema se comporta de maneira completamente diferente da usual (abaixo de T_c) com características e propriedades excêntricas e com a manifestação de novos fenômenos (críticos),

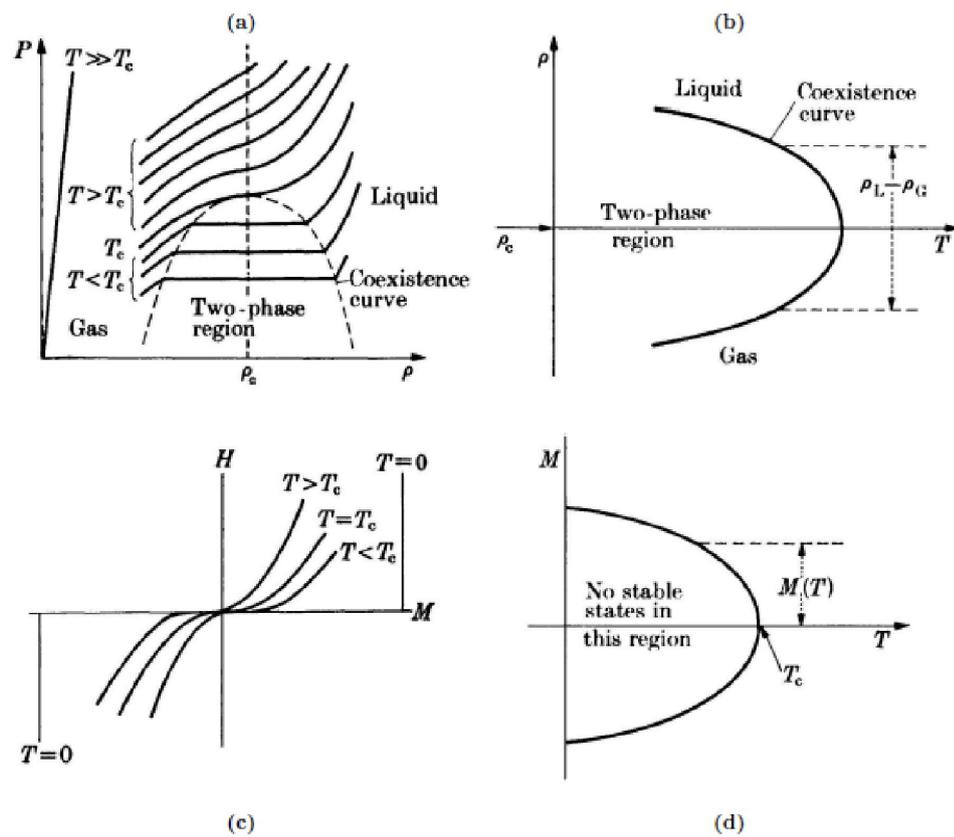


Figura 1.4: Equivalência entre os sistemas fluido e magnético quanto a transição de fases [23].

como, por exemplo, o da auto-similaridade, opalescência crítica⁶ (fluido), universalidade, entre outros.

Acima da temperatura crítica ($T > T_c$), o ferromagneto é completamente desordenado (fase paramagnética), com nenhuma direção preferencial de orientação dos spins. O grau de simetria do sistema aumenta consideravelmente em relação à fase ordenada (menos simétrica). Já o fluido não pode se condensar através de uma única operação de compressão isotérmica, isto é, só irá se liquefazer quando resfriado abaixo da temperatura crítica e logo após comprimido.

1.3.1 Transição de Fases Clássica

As transições de fases mencionadas na seção anterior são conhecidas como transição de fases clássica. Este tipo de transição de fases é regulada especificamente pelo efeito da temperatura sobre o sistema. São as flutuações de natureza térmica que conduzem o sistema a sofrer uma mudança brusca em suas propriedades, caracterizando assim fases com propriedades distintas, ou seja, a transição de fases. Elas podem ser de primeira ou de segunda ordem.

Nas transições de segunda ordem podemos, nas vizinhanças do ponto crítico ($T \simeq T_c$), expandir a energia livre em função do parâmetro de ordem (expansão de Landau), com coeficientes dados como funções dos campos termodinâmicos, e capturar o comportamento assintótico da energia livre e das propriedades termodinâmicas do sistema (dadas como derivadas do potencial) através de uma coleção de expoentes, chamados de expoentes críticos clássicos. No ponto de transição crítica “olhamos” o comportamento das grandezas termodinâmicas através dos expoentes a elas relacionados.

Por outro lado, a expansão de Landau para a energia livre apresenta inconsistência

⁶Se tomarmos um fluido transparente com densidade igual a densidade crítica e fazemos variar a sua temperatura, ao atravessar o ponto crítico o fluido se torna opaco. Isto acontece, devido a existência de flutuações de densidades sobre regiões de diferentes tamanhos, modificando o índice de refração do fluido, fazendo-o dispersar a luz em todo espectro visível. Este efeito está diretamente relacionado com a divergência da compressibilidade isotérmica, e é conhecido como opalescência crítica.

quando comparamos os resultados com medidas experimentais e conceitos mais rigorosos, tais como, universalidade dos expoentes críticos e amplitudes críticas das grandezas termodinâmicas. Este formalismo tem como ponto de partida a proposta de uma energia livre analítica em toda a região de temperatura, o que não corresponde ao verdadeiro comportamento da energia livre, como por exemplo, no modelo de Ising numa rede quadrada que apresenta solução exata. Neste modelo foi observado que próximo do ponto crítico $T = T_c$ e $H = 0$, a energia livre é singular, mostrando o caráter drasticamente diferente da expansão de Landau (aproximação de campo efetivo).

No caso magnético os expoentes críticos mais importantes são: β associado à magnetização a campo magnético nulo ($H = 0$), δ associado à magnetização sobre a isoterma crítica ($T = T_c$) e $H \neq 0$, γ da susceptibilidade e α do calor específico, ou seja,

$$\begin{aligned}\bar{M}(T, H = 0) &\sim (-t)^\beta, (t \rightarrow 0^-) \\ \bar{M}(T = 0, H) &\sim H^{1/\delta}, (H \rightarrow 0^+) \\ \chi_o(t) &\simeq \langle (M - \bar{M})^2 \rangle \sim |t|^{-\gamma} \\ C_o(t) &\simeq \langle (E - \bar{E})^2 \rangle \sim |t|^{-\alpha},\end{aligned}\tag{1.42}$$

onde $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ mede a “distância” do campo temperatura T até o seu valor crítico T_c e $\bar{M} = \langle M \rangle$ corresponde teoricamente ao valor médio da magnetização no ensemble canônico.

Outro parâmetro importante no estudo das transições contínuas é o comprimento de correlação ξ , relacionado com o expoente crítico ν . Esta grandeza mede a distância em que as flutuações de uma região do sistema afetam outra região. De outra forma, dois pontos do sistema são descorrelacionados se estão separados por uma distância maior que ξ . As correlações entre as propriedades (densidade-densidade, spin-spin,...) em dois pontos \vec{r}_1 e \vec{r}_2 do sistema são dadas pela função de correlação $\Gamma(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$. Por exemplo,

para o caso da função densidade $\rho(\vec{r})$ no fluido temos

$$\Gamma(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \langle \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) \rangle - \langle \rho(\vec{r}_1) \rangle \langle \rho(\vec{r}_2) \rangle, \quad (1.43)$$

e que depende apenas da distância entre os pontos para os sistemas homogêneos, isto é,

$$\Gamma(\vec{r}) = \langle \rho(\vec{r}) \rho(0) \rangle - \langle \rho(\vec{r}) \rangle \langle \rho(0) \rangle. \quad (1.44)$$

Experiências de espalhamento revelam um comportamento exponencial para a função de correlação para temperaturas acima e abaixo do ponto crítico

$$\Gamma(r) \sim e^{-r/\xi} \text{ para } r \gg 1 \text{ e } t \neq 0. \quad (1.45)$$

No ponto crítico ($T = T_c$) todas as partículas do sistema estão correlacionadas e ξ sofre divergências na forma

$$\xi \sim |t|^{-\nu}. \quad (1.46)$$

No ponto crítico o decaimento exponencial desaparece, e um comportamento tipo lei de potência aparece na função de correlação, dado por

$$\Gamma(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}, \quad r \gg 1, \quad (1.47)$$

definindo um novo expoente crítico η e d é a dimensão espacial.

De um modo geral, o expoente crítico μ associado a grandeza f é obtido através da seguinte relação,

$$\mu \equiv \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{\ln |f(t)|}{\ln |t|} \quad (1.48)$$

Uma característica dos fenômenos críticos é a de que os expoentes críticos de um sistema não são independentes entre si. Eles obedecem relações, chamadas de relações de escala. E ainda mais, embora a temperatura crítica T_c seja característica de cada sistema físico ou modelo, os expoentes críticos definem padrões de comportamento na

criticalidade.

Observando-se os expoentes críticos de diversos modelos e usando-se argumentos da Termodinâmica foram mostradas as seguintes desigualdades entre os expoentes:

Desigualdade de Rushbrooke

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2 \quad (1.49)$$

Primeira desigualdade de Griffiths

$$\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2 \quad (1.50)$$

Segunda desigualdade de Griffiths

$$\gamma \geq \beta(\delta - 1) \quad (1.51)$$

Desigualdade de Josephson

$$\nu d \geq 2 - \alpha \quad (1.52)$$

Desigualdade de Fisher

$$(2 - \eta)\nu \geq \gamma. \quad (1.53)$$

A partir da solução exata do modelo de Ising $2d$, onde foi verificado que próximo da criticalidade a energia livre tem uma parte predominantemente singular e que apresenta certas propriedades inerentes ao modelo, na década de 60, Widon (1966) postulou de uma maneira geral para transições de fase de segunda ordem, que na criticalidade a parte singular da energia livre é uma função homogênea generalizada do tipo

$$g_{\text{sing}}(\lambda^x t, \lambda^y H) = \lambda g_{\text{sing}}(t, H), \quad (1.54)$$

onde x e y são dois expoentes (críticos) não conhecidos e λ é um parâmetro qualquer.

A partir da hipótese (1.54) foi possível mostrar que na realidade as desigualdades entre

os expoentes críticos são na realidade igualdades, e estas foram plenamente verificadas através de medidas experimentais. Foi somente na década de setenta que esta hipótese da energia livre foi compreendida com a formulação de Kadanoff das idéias do grupo de renormalização. Próximo da criticalidade, o sistema é invariante por escala, ou seja, a Física predominante para o sistema com $N \gg 1$ spins é a mesma olhando numa escala reduzida com $1 \ll N' < N$ spins, de tal modo que podemos assumir que $l \equiv (\frac{N}{N'})^{1/d}$ corresponde ao nosso fator de escala. Na Mecânica Estatística, a Física é representada através da função de partição $Z_N(T, H)$, assim sendo, próximo da criticalidade ($T = T_c, H = 0$) a função de partição é invariante por escala, ou seja,

$$Z_{N'}(t', H') \simeq Z_N(t, H), \quad (1.55)$$

onde $t' = \lambda^x t$ e $H' = \lambda^y H$. Da Eq.(1.55) obtemos uma relação entre a energia livre (singular) por partícula $g_N(t, H) = -\frac{k_B T}{N} \ln Z_N(t, H)$ que é dada por

$$g_{N'}(t', H') = l^d g_N(t, H), \quad (1.56)$$

onde escolhendo $\lambda = l^d$ justificamos a hipótese de Widon dada pela Eq.(1.54). Na abordagem do grupo de renormalização, diminuição dos graus de liberdade do sistema, os expoentes críticos x e y são obtidos numa aproximação e assim todos os outros expoentes $\{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta, \nu\}$ ficam diretamente determinados. Existem diversos métodos de grupo de renormalização, onde x e y são determinados mostrando cada um a sua versatilidade.

1.3.2 Classe de Universalidade

Uma característica importante dos expoentes críticos é a relacionada ao aspecto da universalidade. Isto reflete o fato de que, sistemas físicos com características micro e macroscópicas completamente diferentes, possuem o mesmo conjunto de expoentes críticos, isto é, podem ser incorporados a uma mesma categoria ou classe, denominada de classe de universalidade. Na criticalidade, a forma das interações microscópicas dos cons-

tituintes de uma mesma classe de universalidade torna-se irrelevante.

Essas classes de universalidade, em modelos com interação de curto alcance, são determinadas pelos seguintes fatores:

1) Simetria do Hamiltoniano (n), que refletirá no número de componentes do parâmetro de ordem. Assim sendo, $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$ e $n = \infty$ correspondem aos limites dos modelos de Ising, XY, Heisenberg e esférico, respectivamente;

2) Dimensão espacial (d).

Não depende da topologia da rede.

3) O caráter de curto alcance das interações.

Por exemplo, para o modelo de Ising anisotrópico, com interações J_x e J_y , numa rede quadrada foi provado rigorosamente que seus expoentes críticos são independentes da razão $r = J_y/J_x$. Verifica-se também que as redes com a mesma dimensionalidade, honeycomb (hexagonal), kagomé e triangular têm o mesmo conjunto de expoentes críticos da rede quadrada. Comportamento similar é mostrado via simulação de Monte Carlo para o caso tridimensional (cúbica simples-sc, cúbica de corpo centrado-bcc e cúbica de face centrado-fcc), mostrando uma certa independência destes expoentes com a topologia da rede. Baseado em informações teóricas e de resultados experimentais, observa-se ainda que, o comportamento universal dos expoentes críticos é refletido na simetria do Hamiltoniano. Isto é, simetrias distintas (modelos de Heisenberg, XY e Ising 3d) apresentam comportamento crítico diferentes.

Na tabela I.1, apresentamos alguns resultados dos valores teóricos e experimentais dos expoentes críticos $\beta, \gamma, \delta, \alpha, \nu$ e η . Para a simetria Ising os expoentes críticos são distintos quando analisados em dimensões diferentes $d = 2$ e $d = 3$, mas com o uso de topologias diferentes numa mesma dimensão estes expoentes são os mesmos, definindo uma classe de universalidade.

Devemos lembrar que para uma rede frustrada, como por exemplo o Modelo de Ising Antiferromagnético numa rede triangular (ou cúbica de face centrada-fcc), a hipótese de universalidade é violada quando comparada com os expoentes para o sistema ferro-

MODELO	β	γ	δ	α	ν	η
Ising 2d	1/8	7/4	15	0(log)	1	1/4
Ising 3d	0.33	1.24	4.8	0.10	0.63	0.04
XY 3d	0.34	1.30	4.8	-0.01	0.66	0.04
Heisenberg 3d	0.36	1.39	4.8	-0.12	0.71	0.04
Campo Médio	1/2	1	3	0(desc)	1/2	0
MATERIAIS	β	γ	δ	α	ν	η
<i>Fe</i>	0.39	1.33	4.35	-0.11	-	-
<i>Co</i>	0.44	1.23	3.35	-0.095	-	-
<i>Ni</i>	0.38	1.34	4.58	-0.10	-	-
Fe _{0.90} Al _{0.10}	0.41	1.33	4.28	-0.16	-	-
Fe _{0.80} Al _{0.20}	0.42	1.35	4.26	-0.20	-	-
Gd _{0.67} Co _{0.33}	0.41	1.16	3.6	0.02	-	-
Gd _{0.80} Au _{0.20}	0.44	1.29	3.96	-0.17	-	-

Tabela I.1: Valores teóricos e experimentais dos expoentes críticos

magnético, uma vez que na rede frustrada temos ausência de ordem magnética ($T_c = 0$) não definindo assim expoentes críticos. Outra característica marcante dessa classe de universalidade é a independência dos expoentes críticos com o valor S do spin, onde por exemplo, para o Modelo de Heisenberg $3d$ com spin $S = 1/2$ (quântico) ou seu equivalente clássico ($S \rightarrow \infty$) bem como o seu equivalente quântico antiferromagnético numa rede $3d$ não frustrada possuem os mesmos expoentes críticos.

Do ponto de vista experimental, tem-se verificado a violação da classe de universalidade em sistemas que apresentam crossover de dimensionalidade como, por exemplo, a dependência do expoente β como uma função do tamanho l do filme fino formado por níquel. Foi verificado que para o filme com poucas camadas ($1 < l \leq 4$) a classe de universalidade é Ising $2d$; na região $4 < l < 8$ a classe de universalidade não é bem estabelecida (dimensão espacial e simetria) e finalmente para $l > 8$ (“bulk”) a classe é do tipo Heisenberg $3d$.

No que se refere a modelos com interação de longo alcance, um estudo mais aprofundado não está bem estabelecido na literatura. Alguns resultados relativos aos expoentes críticos são: Para interação do tipo $J_{ij} = \frac{J}{r^{p}}$, a análise de escala de tamanho finito no

modelo de Ising tem indicado que os expoentes são do tipo campo médio e dependem monotonicamente de p , nas regiões clássica ($d < p \leq \frac{3d}{2}$) e não clássica ($\frac{3d}{2} < p < 2d$), respectivamente.

1.3.3 Transição de Fases Quântica

As transições de fases quânticas ocorrem como consequência do princípio de Incerteza de Heisenberg. Elas são causadas por flutuações de natureza não térmica, quando algum parâmetro contido no Hamiltoniano como, por exemplo, o campo magnético, a dopagem em um supercondutor de alta temperatura crítica, campo transversal, diluição, frustração, etc, etc... é mudado.

Um exemplo importante de transição de fases quântica é a condensação de Bose-Einstein. Esta é a única transição de fases *puramente quântica*, que ocorre mesmo não existindo interação entre as partículas. Sua natureza intrínseca está relacionada à simetria das funções de onda das partículas num gás de bósons. Partículas bosônicas possuem spin inteiro e não obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, podendo ocupar os estados quânticos com qualquer número de ocupação. De acordo com Einstein, quando a temperatura de um sistema como este é bastante reduzida ou quando a quantidade de partículas aumenta, estas passam a se condensar no estado fundamental. A condensação ocorre quando a separação média entre as partículas torna-se comparável ao comprimento de onda de “de Broglie”. Dimensões estas onde os efeitos quânticos se manifestam. Einstein calculou as propriedades termodinâmicas do gás ideal de Bose e encontrou que no limite de altas temperaturas e densidades baixas seu comportamento é similar a de um gás ideal de partículas clássicas. Mostrou ainda, que o calor específico tende a zero em baixas temperaturas. Relativamente às densidades, mostrou que as equações de estado não valiam acima de uma densidade chamada de crítica, a qual dependia somente da temperatura T .

Da mesma forma que as transições de fase clássicas, as transições de fases quânticas podem ser classificadas como de primeira ou de segunda ordem. Seja g algum parâmetro

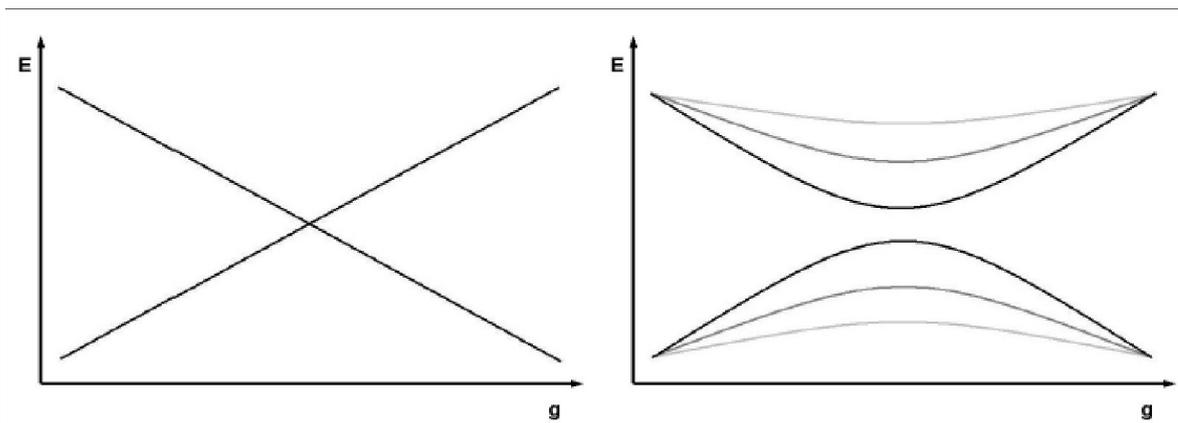


Figura 1.5: No lado esquerdo mostramos o cruzamento dos níveis de energia e no direito esses níveis se repelem, a medida que g se aproxima do valor crítico g_c .

contido no Hamiltoniano que descreve o sistema e δ a distância até a instabilidade (transição) quântica dado por

$$\delta = g - g_c.$$

Dependendo da forma do Hamiltoniano, uma das duas situações seguintes pode ocorrer: na primeira, nas transições de primeira ordem, um comportamento não analítico na energia do estado fundamental pode ser alcançado através de uma variação no parâmetro g , produzindo um cruzamento entre os níveis desses dois estados (fundamental e primeiro estado excitado). Isto é, para um valor $g = g_c$ o primeiro estado excitado se torna o estado fundamental do sistema. Na segunda, nas transições de segunda ordem, a escala característica das flutuações acima do estado fundamental se anula a medida que g se aproxima de g_c , na forma $J|g - g_c|^{z\nu}$, onde J é a escala de energia, z é o expoente dinâmico. Neste caso não há cruzamento de níveis, que se repelem no ponto de transição. Na figura 1.5 apresentamos esquematicamente o que acontece em cada um dos casos mencionados.

As transições (críticas) de fase quânticas são, como as transições clássicas, caracteri-

zadas por divergências de um comprimento de correlação característico,

$$\xi \sim \delta^{-\nu}, \quad (1.57)$$

e analogamente ao caso espacial, existem as flutuações no parâmetro de ordem no tempo. Nas proximidades do ponto crítico essa correlação diverge na forma

$$\tau \sim \xi^z \sim \delta^{-z\nu}. \quad (1.58)$$

Se $z \neq 1$, as correlações divergem de forma diferente espacialmente e no tempo, gerando uma anisotropia entre essas direções.

Sejam $\hbar\omega$ e $k_B T$, as energias associadas as flutuações quânticas (de frequência ω) e associadas as flutuações de temperatura (clássicas), respectivamente, dizemos que um sistema quântico se comporta classicamente, quando

$$\hbar\omega \ll k_B T. \quad (1.59)$$

Devido à Eq.(1.58), as flutuações quânticas na energia irão a zero na forma:

$$\hbar\omega \sim \delta^{z\nu}. \quad (1.60)$$

Disto observamos que, para $T_c \neq 0 K$ sempre é possível encontrar uma temperatura suficientemente próxima de T_c tal que a Eq.(1.58) é satisfeita e o sistema se comporta classicamente, mesmo que o modelo apresente ingredientes de natureza essencialmente quântica. Entretanto, se a transição ocorre em temperatura nula, não podemos satisfazer a Eq.(1.58) e a Mecânica Quântica será fundamental para descrever o comportamento crítico do sistema. Na figura 1.6 apresentamos o diagrama com transição de fase clássica ($T \neq 0 K$) e quântica ($T = 0 K$). Em uma experiência realizada, a medida que nos aproximamos do ponto de transição em $T \neq 0 K$ as flutuações de natureza clássica são predominantes. Entretanto, baixando-se arbitrariamente a temperatura as flutuações

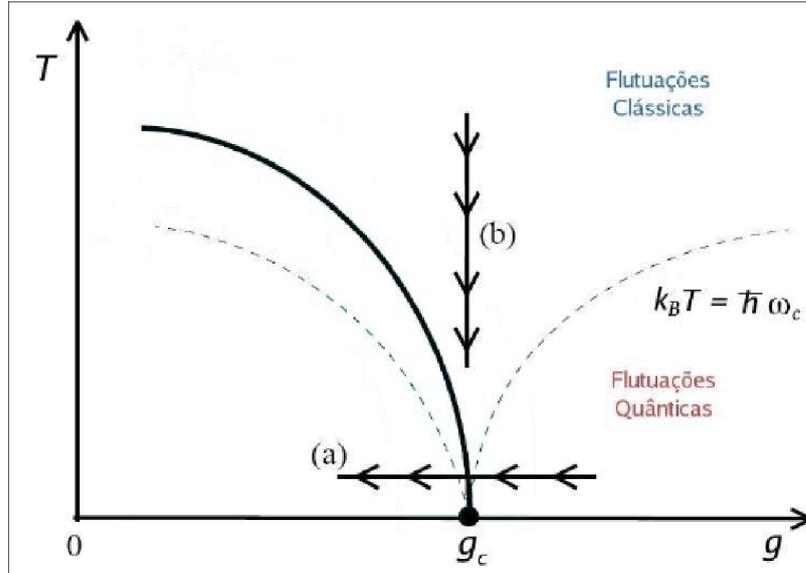


Figura 1.6: Diagrama de fases na vizinhança do ponto crítico g_c .

clássica e quântica passam a competir tornando-se cada vez mais difícil diferenciá-las num experimento real. No limite $T \rightarrow 0$ K, temos o predomínio das flutuações quânticas sobre as térmicas.

1.3.4 Teoria de Escala em Transição de Fases Quântica

Seguindo a hipótese de Kadanoff, podemos reescalar os parâmetros do Hamiltoniano (g) e as distâncias à instabilidade (δ e τ) através do fator de escala $b = L/L'$ na forma

$$g' = b^{-y} g, \quad (1.61)$$

$$\delta' = b^a \delta, \quad (1.62)$$

$$\tau' = b^z \tau, \quad (1.63)$$

onde L e L' são as dimensões lineares antiga e nova do sistema.

Reescalando o comprimento de correlação encontramos a relação entre os expoentes ν e a , isto é

$$\xi'(|\delta'|) = \frac{\xi(|\delta|)}{b}. \quad (1.64)$$

Utilizando a Eq.(1.62) encontramos,

$$\xi'(|b^a \delta|) = \frac{\xi(|\delta|)}{b}. \quad (1.65)$$

Da arbitrariedade do valor de b podemos fazer $b^a |\delta| = 1$ ($b = |\delta|^{-1/a}$) e assim teremos,

$$\xi = |\delta|^{-1/a} \xi', \quad (1.66)$$

e

$$\nu = 1/a. \quad (1.67)$$

Para encontrarmos a relação do expoente dinâmico z com y , devemos exigir que a relação de incerteza da energia,

$$\Delta E \Delta \tau \geq \hbar, \quad (1.68)$$

seja invariante por transformação de escala, ou seja,

$$\Delta E \Delta \tau = \Delta E' \Delta \tau'.$$

Cuja implicação matemática é

$$b^{(z-y)} \Delta E \Delta \tau = \Delta E \Delta \tau, \quad (1.69)$$

$$z = y. \quad (1.70)$$

Analizamos a dinâmica nas transições de fase à temperatura nula, observando a relação equivalente à relação de Josephson. Para isso, observamos o comportamento sin-

gular da densidade de energia em temperatura nula, isto é:

$$f_s = \frac{F_s}{L^d} = gf(\delta), \quad (1.71)$$

que reescalado usando $L' = L/b$ será dada por

$$f'_s = \frac{F_s}{(L')^d} = b^d f_s = g'f(|\delta'|). \quad (1.72)$$

Com o auxílio das Eqs.(1.61) e (1.62) e usando $b = |\delta|^{-1/a}$, teremos

$$\frac{f_s}{g} = |\delta|^{\frac{y+d}{a}} f(1). \quad (1.73)$$

Usando as Eqs. (1.67) e (1.70) obtemos a forma escalada da energia livre na forma

$$f_s \propto |\delta|^{\nu(d+z)}. \quad (1.74)$$

Mas, a parte singular da densidade de energia tem o comportamento dado por

$$f_s \propto |\delta|^{2-\alpha}, \quad (1.75)$$

de modo que os expoentes satisfazem a seguinte igualdade

$$2 - \alpha = \nu(d + z), \quad (1.76)$$

definindo uma dimensão efetiva $d_{\text{efetiva}} = d + z$. Uma característica importante da transição quântica é o mapeamento dos expoentes críticos através da transição de natureza clássica. Isto é, quando $z = 1$ existe uma isotropia entre o espaço e o tempo, com isso a natureza do modelo quântico em d dimensões é identificada pelo modelo equivalente clássico em $d + 1$ dimensões, dimensão na qual as relações de escala são verificadas.

Para uma consulta mais completa sobre as transições de fases e as relações de escala

recomendamos a ref.[21].

1.4 Organização da Tese

Esta tese foi organizada da seguinte maneira :

- No capítulo 2 apresentamos uma introdução teórica sobre a Teoria de Campo Efetivo, fundamentada nas identidades de Callen Suzuki, e da Técnica do Operador Diferencial. Exemplificamos o uso da técnica aplicando no modelo de Ising e Heisenberg quântico de spin $1/2$ anisotrópico. Mostramos como esta técnica pode ser aplicada tanto no caso ferromagnético (F) como antiferromagnético (AF). Discutimos diversas aproximações.

- No capítulo 3, apresentamos sucintamente as propriedades dos compostos de vanádio que são estruturas quase bidimensionais com uma forte anisotropia no plano e um pequeno acoplamento entre planos. Aplicamos a Teoria de Campo Efetivo ao modelo de Heisenberg com interações competitivas na rede cúbica simples introduzindo um acoplamento entre os planos. Simulamos o comportamento quase bidimensional e caracterizamos as fases presentes no modelo e sua estabilidade quanto ao tipo de interação de primeiros vizinhos e a frustração presente. Fazemos a discussão dos resultados obtidos dos procedimentos descritos, analisando os casos com aglomerados com $N=2$ e $N=4$ spins. Analisamos os diagramas de fases no estado fundamental e também à temperatura finita.

- No capítulo 4, introduzimos ao estudo da Teoria de Ondas de Spins Linear e aplicamos a técnica ao modelo descrito no capítulos 5, fazendo a análise e a discussão dos resultados. Finalizamos no capítulo 6 apresentado as considerações finais e as perspectivas futuras.

Referências

- [1] H. Frauenfelder, P.G. Wolynes e R. H. Austin, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S419 (1999).
- [2] H. M. Harreis, C. N. Likos e H. Löwen, *Biophys. J.* **84**, 3607 (2003).
- [3] M. W. Long, *J. Phys. Cond. Matter* **3**, 6387 (1991); M. Hanawa, Y. Muraoka, T. Sakakibara, T. Yamaura e Z. Hiroi, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 187001 (2001); T. Yildirim, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 057010 (2008); Q. Si e E. Abrahams, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 177203 (2008).
- [4] E. Manousakis, *Rev. Mod. Phys.* **63**, 1 (1991).
- [5] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **86**, 694 (1952); T. Oguchi, *ibid* **117**, 117 (1960); R. Kubo, *ibid* **87**, 568 (1952); J. D. Reger e A. P. Yuong, *Phys. Rev. B* **37**, 5493 (1988).
- [6] N. D. Mermin e H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [7] M. Kohmoto e J. Friedel, *Phys. Rev. B* **38**, 7054 (1988).
- [8] P. W. Anderson, *Science* **235** 1196 (1987).
- [9] S. Sachdev, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 913 (2003).
- [10] D. L. Bergman, G. A. Fiete e L. Balents, *Phys. Rev. B* **73**, 134402 (2006).
- [11] Masashi Hase, Ichiro Terasaki e Kunimitsu Uchinokura, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3651–3654 (1993).

- [12] L. Siurakshina, D. Ihle e R. Hayn, *Phys. Rev. B* **61**, 14601 (2000).
- [13] F. Steglich, C. Geibel, R. Modler et al, *J. Low Temp. Phys.* **99**, 267 (1995); F. Steglich, C. Geibel, R. Helfrich et al, *J. Phys. Chem. Solids* **59**, 2190 (1998).
- [14] J. Cabral Neto, Dissertação de Mestrado, UFSCAR-1999.
- [15] Edgar Bublitz Filho, Dissertação de Mestrado *Transição de Fase Quântica Induzida por Campo Externo*, UFAM-2003.
- [16] J. H. Van Vleck, *Phys. Rev.* **52**, 1178 (1937).
- [17] A. H. Morrish, “*The Physical Principles of Magnetism*”, John Wiley - Sons (1965).
- [18] A. S. de Arruda, *Efeitos da Interação Dipolar e da Anisotropia Uniaxial em Sistemas Magnéticos*, Tese de Doutorado, UFF (1995).
- [19] A. S. Chakravarty, “*Introduction to the Magnetic Properties of Solids*”, John Wiley e Sons (1980).
- [20] L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117-149 (1944).
- [21] M. A. Continentino, *Quantum Scaling in Many-Body Systems*, Ed. Word Scientific (2001).

Capítulo 2

Teoria de Campo Efetivo

2.1 Introdução

Modelos exatamente solúveis em Física da Matéria Condensada são raros. A dificuldade em encontrar soluções exatas em temperatura finita, reside no fato de que o cálculo da função de partição

$$Z = \text{Tr}(\exp(-\beta\mathcal{H})), \quad (2.1)$$

onde \mathcal{H} é o operador associado ao observável energia do sistema, é impraticável devido ao número muito grande de configurações diferentes que o sistema pode assumir. Por exemplo, para N spins de intensidade S , o número de configurações é $(2S + 1)^N$. Desta forma a solução exata no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$) não pode ser encontrada para a grande maioria dos modelos! Para um modelo quântico temos que diagonalizar uma matriz de ordem $(2S + 1)^N$, que, certamente, é impossível de ser abordado no limite termodinâmico mesmo com todos os recursos computacionais disponíveis.

Embora raras, as soluções analíticas fechadas de alguns modelos, como por exemplo, o modelo de Ising $1d$ e $2d$ (sem campo) nos ajudam a justificar os limites de validade do uso de técnicas aproximadas. Assim, podemos criar uma hierarquia entre as técnicas aproximativas comparando seus resultados quando aplicadas a modelos exatamente solúveis. A

conveniência do uso de uma ou de outra técnica recai então, no grau de precisão que deseja alcançar ou no limite do esforço computacional que a técnica exige. Dentre essas técnicas, os métodos de simulação computacional (como por exemplo, a diagonalização numérica e Monte Carlo) e a expansão em série de altas temperaturas são consideradas técnicas rigorosas. Contudo, essas técnicas envolvem esforços computacionais demasiadamente grandes quando aplicados a sistemas complexos, inviabilizando muitas vezes o seu uso. Como exemplo podemos citar o caso de modelos quânticos frustrados que apresenta o problema do sinal negativo quando é usado Monte Carlo Quântico.

Dentre as várias técnicas aproximativas, as Teorias de Campo Efetivo (EFT) têm sido aplicadas ao estudo do comportamento crítico de sistemas magnéticos em d dimensões e vem apresentando resultados qualitativamente adequados quando comparadas às técnicas mais sofisticadas. Esta teoria, fundamenta-se nas identidades rigorosas de correlações de spins propostas por Callen [1] em 1963 para o modelo de Ising-1/2 e generalizadas para spin qualquer por Suzuki [2] em 1965 e que tem sido bastante utilizada. Grande parte deste trabalho é baseado no uso da EFT em aglomerados finitos com $N=2$ e $N=4$ spins no modelo de Heisenberg anisotrópico com interações competitivas (modelo $J_1 - J_2$), tendo como os casos limites Ising ($\Delta = 1$) e Heisenberg isotrópico ($\Delta = 0$). O diagrama de fases para esses modelos é perfeitamente conhecido no estado fundamental ($J_1 > 0$)¹. Em $T \neq 0$ K, o diagrama de fases não possui solução exata, sendo ainda fonte de investigação teórica, buscando desvendar o verdadeiro comportamento qualitativo do diagrama utilizando-se as mais diferentes técnicas. Os nossos resultados encontrados estão em concordância qualitativa com resultados mais rigorosos. O uso da EFT em sistemas complexos com transição de fases quântica é um dos pontos de interesse neste trabalho.

¹A grande maioria de resultados teóricos disponíveis na literatura para esse modelo pelas mais diferentes técnicas são para o caso com interação de primeiros vizinhos AF ($J_1 > 0$). O diagrama de fases com a interação de primeiros vizinhos ferromagnética ($J_1 < 0$) é pouco conhecido.

2.2 A Identidade de Callen-Suzuki

Seja a seguinte decomposição do Hamiltoniano \mathcal{H} que descreve de forma mais completa possível um sistema com N spins S , dada por

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}', \quad (2.2)$$

onde \mathcal{H}_Ω é a parte de \mathcal{H} que preserva todas as interações relevantes do sistema com N_Ω spins e sua vizinhança (primeiros, segundo, etc..., número finito de vizinhos) e \mathcal{H}' é independente dos spins contidos na região Ω , mas que contém spins da vizinhança.

Em particular, para o caso Ising temos

$$\mathcal{H}^{\text{Ising}} = \mathcal{H}_\Omega^{\text{Ising}} + \mathcal{H}'^{\text{Ising}}, \quad (2.3)$$

e, é sempre válida a relação de comutação

$$[\mathcal{H}_\Omega^{\text{Ising}}, \mathcal{H}'^{\text{Ising}}] = [\mathcal{H}_\Omega^{\text{Ising}}, \mathcal{H}_\Omega^{\text{Ising}} + \mathcal{H}'^{\text{Ising}}] = [\mathcal{H}_\Omega^{\text{Ising}}, \mathcal{H}'^{\text{Ising}}] = 0 \quad (2.4)$$

pois,

$$[S_i^\mu, S_j^\mu] = 0 \quad \forall ij. \quad (2.5)$$

No caso Heisenberg, devido às conhecidas relações de comutação

$$[S_l^a, S_p^b] = i\hbar S_l^c \epsilon_{abc} \delta_{lp}, \quad (2.6)$$

onde a, b e $c = x, y, z$ e $\epsilon_{abc} = 1$ se abc for a ordem cíclica (xyz, yzx, zxy) , $\epsilon_{abc} = -1$ se abc for anticíclica (xzy, zyx, yxz) e $\epsilon_{abc} = 0$ quando dois ou mais índices forem iguais, teremos

$$[S_i^a, S_i^b] \neq 0, a \neq b \quad (2.7)$$

com $S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$. Isto implica na não comutatividade dos Hamiltonianos \mathcal{H}_Ω e \mathcal{H}' ,

isto é:

$$[\mathcal{H}_\Omega, \mathcal{H}'] \neq 0.$$

Disto e da definição de média térmica na Mecânica Estatística de um observável A ,

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr}(Ae^{-\beta\mathcal{H}})}{Z}, \quad (2.8)$$

sendo

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta\mathcal{H}}), \quad (2.9)$$

a função de partição e

$$\beta = \frac{1}{k_B T}, \quad (2.10)$$

fazemos duas observações:

(i) No caso de spins “clássicos”, um operador A_Ω dado como função de operadores σ restritos ao subespaço Ω , terá sua média térmica dada por

$$\langle A_\Omega \rangle = \frac{\text{Tr}(A_\Omega e^{-\beta(\mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}')}}{Z} = \frac{\text{Tr}' e^{-\beta\mathcal{H}'} \text{Tr}_\Omega(A_\Omega e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega})}{Z}, \quad (2.11)$$

supondo que $[\mathcal{H}_\Omega, \mathcal{H}'] = 0$. Desta forma, teremos

$$\begin{aligned} \langle A_\Omega \rangle &= \frac{1}{Z} \left[\text{Tr}' e^{-\beta\mathcal{H}'} \cdot \left(\frac{\text{Tr}_\Omega(e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega})}{\text{Tr}_\Omega(e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega})} \right) \cdot \text{Tr}_\Omega(A_\Omega e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega}) \right], \\ &= \frac{1}{Z} \left[\text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}} \cdot \left(\frac{\text{Tr}_\Omega(A_\Omega e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega})}{\text{Tr}_\Omega(e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega})} \right) \right], \\ &= \frac{1}{Z} [\text{Tr}(e^{-\beta\mathcal{H}} X)] = \langle X \rangle, \\ \langle A_\Omega \rangle &= \langle f(\sigma \in \Omega) \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr}_\Omega(A_\Omega e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega})}{\text{Tr}_\Omega(e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega})} \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Podemos generalizar a Eq.(2.12) calculando a média térmica do produto de operadores AB , isto é,

$$\langle AB \rangle = \left(\frac{\text{Tr}_\Omega(ABe^{-\beta\mathcal{H}_\Omega})}{\text{Tr}_\Omega(e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega})} \right). \quad (2.13)$$

Se A é como definido anteriormente e considerando B como uma função de operadores que não pertencem ao aglomerado Ω ($B = g(\sigma \notin \Omega)$), então

$$B = g(\sigma \notin \Omega).1_\Omega, \quad (2.14)$$

onde 1_Ω é a resolução da unidade relativa ao subespaço Ω , a média será:

$$\langle AB \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr}_\Omega(A_\Omega B 1_\Omega e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega})}{\text{Tr}_\Omega(e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega})} \right\rangle = \langle \{B\} \frac{\text{Tr}_\Omega(A_\Omega e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega})}{\text{Tr}_\Omega(e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega})} \rangle. \quad (2.15)$$

Com o intuito de exemplificar de forma bastante simples o que até aqui foi mostrado, passamos ao tratamento do seguinte Hamiltoniano de Ising,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j, \quad (2.16)$$

onde J ($J > 0$ e $J < 0$ correspondem aos sistemas ferromagnético e antiferromagnético, respectivamente) é o parâmetro de troca, (i, j) denota a soma sobre os primeiros vizinhos numa rede de Bravais e $\sigma_i = \pm 1$ é a variável de spin $1/2$ em cada sítio $i(j)$. Com aglomerado de um único spin o Hamiltoniano (2.16) ficará:

$$\mathcal{H}_\Omega = \mathcal{H}_1 = -J \sum_{\substack{\vec{\delta}_1 \\ 1+\delta_1}} \sigma_{1+\vec{\delta}_1} \cdot \sigma_1 \quad (2.17)$$

Com o uso da Eq.(2.11), e fazendo $K = \beta J$ obtém-se a magnetização por spin

$$\langle \sigma_1 \rangle = \left\langle \frac{\text{tr}_\Omega(\sigma_1 e^{\sum_{\vec{\delta}_1} K \sigma_{1+\vec{\delta}_1}})}{\text{tr}_\Omega(e^{\sum_{\vec{\delta}_1} K \sigma_{1+\vec{\delta}_1}})} \right\rangle. \quad (2.18)$$

Calculando o traço parcial encontra-se o seguinte resultado

$$\langle \sigma_1 \rangle = \left\langle \tanh \left(K \sum_{\vec{\delta}_1} \sigma_{1+\vec{\delta}_1} \right) \right\rangle, \quad (2.19)$$

conhecido na literatura como Identidade de Callen-Suzuki [1, 2].

Tahir Kheli e Taggart [3] utilizaram as identidades de Callen-Suzuki no cálculo das funções de correlação e temperatura crítica do modelo de Ising $2d$, no método de expansão em série de altas temperaturas.

(ii) No caso de sistemas quânticos, as relações de comutação, intrínsecas à natureza física do problema, proíbem a comutatividade entre \mathcal{H}_Ω e \mathcal{H}' . Desta forma, a Eq.(2.11) não é mais exata. Entretanto, diversos autores têm utilizado esta expressão de forma aproximada, seguindo os passos de Sá Barretto e Fittipaldi [4] que a aplicaram no modelo de Ising com campo transversal.

2.3 A Técnica do Operador Diferencial

Ao calcularmos a média de algum observável físico A_Ω relativa ao traço parcial $T_{r\Omega}$ associado ao Hamiltoniano \mathcal{H}_Ω , verificamos que o resultado apresenta a forma de uma função dos parâmetros K contidos em \mathcal{H}_Ω e dos operadores σ_i da vizinhança de Ω , isto é,

$$\langle f(K, \sigma_i \in \mathcal{H}') \rangle = \left\langle \frac{T_{r\Omega}(A_\Omega e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega})}{T_{r\Omega}(e^{-\beta \mathcal{H}_\Omega})} \right\rangle. \quad (2.20)$$

Para aglomerados com um e dois sítios, por exemplo, estes operadores σ_i aparecem no argumento das funções tais como senos, cossenos e tangentes hiperbólicas, como visto na Eq.(2.19). Isto oferece uma dificuldade adicional no cálculo das médias e na determinação correta das propriedades termodinâmicas do sistema. A primeira aproximação buscando contornar esta dificuldade, a de campo médio usual (MFA), consiste em tomar a média

do argumento, como, por exemplo, usando a Eq.(2.19), obtém-se:

$$\langle \sigma_1 \rangle = m \simeq \tanh \left\langle \left(K \sum_{\vec{\delta}_1} \sigma_{1+\vec{\delta}_1} \right) \right\rangle = \tanh K \sum_{\vec{\delta}_1} \langle \sigma_{1+\vec{\delta}_1} \rangle = \tanh(zKm), \quad (2.21)$$

para z vizinhos do aglomerado. Tomando o limite $m \rightarrow 0$, encontramos a temperatura de transição de fase

$$\frac{k_B T_c}{J} = z.$$

Uma forma mais conveniente e que apresenta melhores resultados que a MFA, é obtida aplicando-se a Técnica do Operador Diferencial, desenvolvida por Honmura e Kaneyoshi [5]. Para isto, considere a seguinte expansão em série de potências do operador $e^{\alpha D}$,

$$e^{\alpha D_x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} D_x^n, \quad (2.22)$$

onde $D_x^n = \left(\frac{d}{dx}\right)^n$ indica a n -ésima diferenciação e α é um número real.

Aplicando-se a Eq.(2.22) a uma função de uma variável x , $g(x)$, encontramos

$$e^{\alpha D_x} g(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} D_x^n g(x) = g(x + \alpha). \quad (2.23)$$

Fazendo $x = 0$, a Eq.(2.23) reduz-se a:

$$g(\alpha) = g(x + \alpha) |_{x=0} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} D_x^n g(x) |_{\vec{x}=0} = e^{\alpha D_x} g(x) |_{\vec{x}=0}. \quad (2.24)$$

Considerando α um operador de spins da forma

$$\alpha = K \sum_{i \in \mathcal{H}^l} \sigma_i, \quad (2.25)$$

generalizamos a Eq.(2.24), com $\sigma_i \in \mathcal{H}^l$ e K um parâmetro do Hamiltoniano. O uso da Eq.(2.24) com α como indicado na Eq.(2.25) nos permite retirar os operadores do

argumento das funções, isto é

$$g(\alpha) = g\left(K \sum_{i \in \mathcal{H}} \sigma_i\right) = e^{\frac{(K \sum \sigma_i) D_x}{i \epsilon \mathcal{H}^l}} g(x) \Big|_{\vec{x}=0} \quad (2.26)$$

e o valor médio da função de operadores de spins será dado por:

$$\langle g(\alpha) \rangle = \left\langle e^{\frac{(K \sum \sigma_i) D_x}{i \epsilon \mathcal{H}^l}} \right\rangle g(x) \Big|_{\vec{x}=0}, \quad (2.27)$$

com a retirada de $g(x)$ de dentro da média, visto a sua independência de qualquer configuração dos spins em \mathcal{H}^l .

Se $g(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ é uma função de n variáveis, podemos diretamente generalizar a Técnica do Operador Diferencial a partir da relação:

$$\exp(\vec{\alpha} \cdot \vec{D}) g(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \Big|_{x=0} = g(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_n), \quad (2.28)$$

onde $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_n)$, $\vec{D} = (D_1, D_2, \dots, D_n)$, $D_n = \partial / \partial x_n$ com $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$.

Aplicando o resultado da Eq.(2.27) na Eq.(2.19), encontramos:

$$m = \langle \sigma_1 \rangle = \left\langle \exp \left[K \sum_{\vec{\delta}_1}^z \sigma_{1+\vec{\delta}_1} D_x \right] \right\rangle \tanh x \Big|_{x=0}. \quad (2.29)$$

Expandindo o somatório anterior, reescrevemos a Eq.(2.29),

$$m = \langle \sigma_1 \rangle = \left\langle \left[\prod_{\vec{\delta}_1}^z \exp(K \sigma_{1+\vec{\delta}_1} D_x) \right] \right\rangle \tanh x \Big|_{x=0}. \quad (2.30)$$

No caso particular que estamos considerando² ($S = 1/2$), podemos reescrever (2.30)

²Para o caso de spin $S = 1$ é possível mostrar que $e^{\varphi \hat{s}} = A(\lambda) + B(\lambda) \hat{s} + C(\lambda) \hat{s}^2$, onde $A(\lambda) = 1$, $B(\lambda) = \sinh \lambda$ e $C(\lambda) = \cosh \lambda - 1$.

de uma forma mais conveniente utilizando as propriedades das matrizes de Pauli, ou seja,

$$\sigma_i^2 = \sigma_i^{2n} = 1 \text{ e } \sigma_i^{2n+1} = \sigma_i, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.31)$$

Com isto, verificamos facilmente a chamada identidade de van der Waerden, isto é:

$$e^{\lambda \sigma_i} = \cosh \lambda + \sigma_i \sinh \lambda, \quad \forall \lambda. \quad (2.32)$$

Substituindo a Eq.(2.34) na Eq.(2.30), ficaremos,

$$m = \langle \sigma_1 \rangle = \left\langle \prod_{\substack{z \\ \vec{\delta}_1}} (\cosh(KD_x) + \sigma_{i+\vec{\delta}_1} \sinh(KD_x)) \right\rangle \tanh x \Big|_{x=0}. \quad (2.33)$$

A Eq.(2.33) é exata, porém, sua manipulação matemática é bastante dificultada devido as multicorrelações entre os spins da vizinhança dela decorrentes. A essa altura, algum tipo de aproximação deve ser tomada para produzir o desacoplamento nas funções de correlação. Em particular, o caso de uma rede unidimensional ($z = 2$) foi resolvido exatamente anos atrás por Sá Barreto e Fittipaldi [6]. Uma denotação para este acoplamento de funções de correlação é conhecida como equações de Dobrushim-Landford-Ruelle [7] muito usada em teoria de campo [8].

A fim de melhor justificar o uso de alguma aproximação no desenvolvimento da equação de estado (2.33), vamos considerar uma rede quadrada ($z = 4$) e o conjunto $\{\sigma_a, \sigma_b, \sigma_c, \sigma_d\}$ como sendo os spins externos primeiros vizinhos, conforme esquematizado na figura 2.1.

Antes de prosseguir devemos mencionar uma propriedade fundamental que envolve as combinações das funções hiperbólicas contendo o operador diferencial, que é $\hat{\varphi}_{PAR}(D_x) \tanh x \Big|_{x=0} = 0$, onde $\hat{\varphi}_{PAR}(D_x)$ é qualquer operador par, por exemplo, $\hat{\varphi}_{PAR}(D_x) = \cosh^4(KD_x)$. Atento a esta propriedade podemos desenvolver a Eq.(2.33) para $z = 4$,

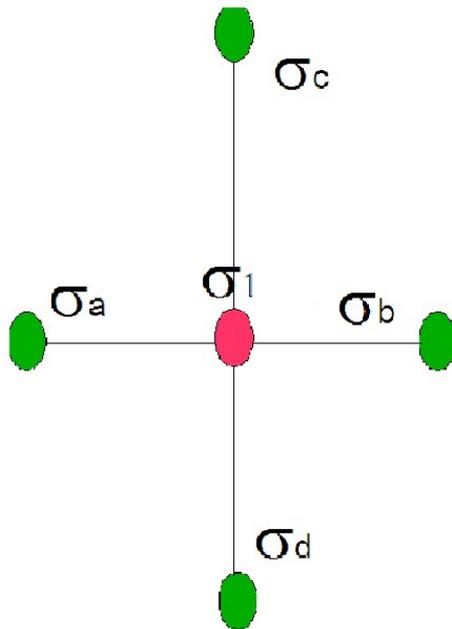


Figura 2.1: Aglomerado com um spin central σ_1 na rede quadrada e seus vizinhos mais próximos $\{\sigma_a, \sigma_b, \sigma_c, \sigma_d\}$.

conforme os spins do aglomerado da figura 2.1, obtendo

$$\begin{aligned}
m &= \frac{A_1(k)}{4} (\langle \sigma_a \rangle + \langle \sigma_b \rangle + \langle \sigma_c \rangle + \langle \sigma_d \rangle) \\
&+ \frac{A_3(k)}{4} (\langle \sigma_a \sigma_b \sigma_c \rangle + \langle \sigma_a \sigma_b \sigma_d \rangle + \langle \sigma_b \sigma_c \sigma_d \rangle) \\
&+ \langle \sigma_a \sigma_c \sigma_d \rangle,
\end{aligned} \tag{2.34}$$

onde $A_1(k) = 4\alpha_x^3 \beta_x \tanh x |_{x=0}$, $A_3(k) = 4\alpha_x \beta_x^3 \tanh x |_{x=0}$, $\alpha_x = \cosh(KD_x)$ e $\beta_x = \sinh(KD_x)$. Da Eq.(2.34) temos do lado esquerdo uma variável contendo apenas um spin, que a definimos como magnetização por spin. Do lado direito variáveis contendo até três spins, que a definimos como função de correlação. Se tentarmos calcular esta função de correlação através do uso da Eq.(2.13), prosperamos funções de correlação de cinco spins, e, se assim continuarmos geraremos um conjunto infinito de equações acopladas. Por isto faz-se necessário aplicar algum tipo de aproximação a fim de obter as propriedades termodinâmicas do sistema.

Uma das primeiras aproximações e ainda bastante utilizadas com esse intuito é do tipo [9],

$$\langle \sigma_k \sigma_l \sigma_m \dots \rangle \simeq \langle \sigma_k \rangle \langle \sigma_l \rangle \langle \sigma_m \rangle \dots, \tag{2.35}$$

com $k \neq l \neq m \neq \dots$, no mesmo espírito da aproximação RPA (Random Phase Approximation) do formalismo da Função de Green.

Com uso da Eq.(2.35) na Eq.(2.34) e o uso da propriedade da invariância translacional, isto é, $\langle \sigma_i \rangle = m \forall i$, obtemos,

$$m = \sqrt{\frac{1 - A_1(K)}{A_3(K)}}. \tag{2.36}$$

A Eq.(2.36) representa o resultado da magnetização por spin obtida de forma aproximada na teoria de campo efetivo em aglomerado com $N = 1$ spin (effective-field theory- EFT-1), e tem como consequência imediata valores clássicos para os expoentes críticos, em particular, temos $\beta = 1/2$. No limite $m \rightarrow 0$, da Eq.(2.36) a temperatura crítica resolvendo numericamente a equação auto consistente $A_1(K_c) = 1$, obtendo $K_c^{-1} \equiv \tau_c = 3.09$

que podemos comparar com a solução exata $\tau_c = 2.27$ e de campo médio usual, $\tau_c = 4.0$.

Outras redes cúbicas podem ser tratadas analogamente, então nesta aproximação EFT-1 obtemos a seguinte expressão para a equação de estado:

$$m \simeq (\alpha_x + m\beta_x)^z \tanh x \Big|_{x=0} . \quad (2.37)$$

No desenvolvimento da Eq.(2.37), encontramos expressões autoconsistentes do tipo

$$m = m(T, K, m) = A_0 + A_1 m + \dots + A_z m^z = \sum_{p=0}^z A_p^{(z)} m^p, \quad (2.38)$$

sendo

$$A_p^{(z)} = \frac{z!}{p!(z-p)!} \alpha_x^{z-p} \beta_x^p \tanh x \Big|_{x=0} . \quad (2.39)$$

Devido a simetria de inversão na ausência de campo magnético, isto é, $m(T, K, m) = m(T, K, -m)$, somente os termos de índice ímpares sobrevivem. Desta maneira teremos:

$$m = \sum_{p=0}^z A_{2p+1}^{(z)} m^{2p+1}. \quad (2.40)$$

Próximo da criticalidade, $m \simeq 0$, da Eq.(2.40) obtemos o expoente crítico clássico $\beta = 1/2$ e a temperatura crítica resolvendo a equação abaixo

$$A_1^{(z)}(K_c) = 1 \quad (2.41)$$

que após resolver numericamente encontramos $\tau_c = 5.07, 7.06$ e 11.04 para as redes sc ($z = 6$), bcc ($z = 8$) e fcc ($z = 12$), respectivamente. Notamos que a medida que o número de coordenação (z) cresce temos uma convergência de τ_c para o valor obtido por campo médio $\tau_c = z$, o que mostra consistência nos resultados uma vez que a medida que o número de coordenação cresce, um dado sítio da rede interage com mais vizinhos, e no limite $z \rightarrow \infty$ teremos um modelo tipo interação de longo alcance, que equivale a aproximação de campo médio usual.

Quando comparamos EFT-1 com a aproximação de campo médio temos em baixa dimensionalidade, onde as flutuações térmicas são mais intensas, valores ligeiramente melhores, mas, certamente, o grande trunfo está no caso limiar da rede linear ($z=2$). Enquanto EFT-1 obtém o resultado exato $\tau_c = 0$, MFA em aglomerado com $N = 1$ spin encontra erroneamente o valor $\tau_c = 2.0$.

Inicialmente, a Técnica do Operador Diferencial tratava exclusivamente do estudo de sistemas com simetria Ising, devido ao tamanho ($N = 1$) do aglomerado até então utilizado. Com o desenvolvimento da técnica, aglomerados maiores ($N = 2, 4, \dots$) foram incorporados, e a partir de então modelos de simetria Heisenberg passaram a ser tratados. A aplicação da técnica ao modelo de Heisenberg de spin-1/2 ferromagnético [10-16] em aglomerados com dois spins apresentou resultados satisfatórios em redes tridimensionais. Em duas dimensões, entretanto, os resultados encontrados não foram satisfatórios, sobretudo no limite isotrópico do modelo onde prevê $T_c \neq 0 K$, em contradição com o teorema de Mermin-Wagner [17] onde $T_c = 0 K$ nesse limite de dimensionalidade. Desde então, esta técnica tem sido aplicada para estudar uma grande variedade de modelos magnéticos, tais como fase de vidro de spin [18], sistemas desordenados [19], efeitos de superfícies [20], sistemas amorfos [21], modelo Blume-Emery-Griffiths (BEG) [22], modelo de Potts [23], metamagneto Ising com campo transversal [24], e, mais recentemente, esta tem sido estendida para estudar o metamagneto de Heisenberg [25], Heisenberg quântico antiferromagnético [26] e para tratar de filmes finos e super-redes [27] dos modelos de Ising e Heisenberg antiferromagnético decorado e diluído.

Em aglomerados de tamanho (N) e até mesmo no caso com $N = 1$, é comum o uso de desacoplamento em que desprezamos as flutuações dos spins, e isto nos traz como consequência resultados universais para os expoentes críticos tipo campo médio, mas com valores melhores para T_c . Este método apesar de apresentar inconsistência para os expoentes críticos, tem se mostrado bastante versátil na descrição qualitativa de diagramas de fase em modelos de spins.

2.4 Outras Aproximações na Teoria de Campo Efetivo

A análise do comportamento quantitativo da Teoria de Campo Efetivo tem revelado que os seus resultados são distantes dos resultados exatos encontrados pelo método de Monte Carlo [28] e expansão em série. Além disso, a EFT³ não identifica a topologia da rede, oferecendo os mesmos valores da temperatura crítica para diferentes redes. Por exemplo, a Teoria de Campo Efetivo em aglomerado com um spin EFT-1, apresenta os seguintes resultados [29]: rede kagomé e rede quadrada ($z = 4$) $T_c = 3.09$, rede triangular e rede cúbica simples ($z = 6$) $T_c = 5.073$, aumentando monotonicamente a temperatura crítica com o número de coordenação (z). No diagrama apresentamos a convergência da temperatura crítica no limite $z \rightarrow \infty$, isto é:

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \left[\frac{T_c^{EFT-1}}{z} = 1.0 \right], \quad (2.42)$$

correspondendo ao valor de campo médio (MFA). No limite de coordenação ($z \rightarrow \infty$) teremos que o íon i interage (em média) com a mesma magnitude com todos os sítios da rede cristalina, introduzindo assim no sistema uma interação de longo-alcance apresentando os mesmos resultados da aproximação de campo médio de Curie-Weiss. Certamente, os resultados obtidos para a temperatura crítica por EFT são superiores a MFA ($T_c^{MFA} = 4.0$ rede quadrada, $T_c^{MFA} = 6.0$ rede cúbica simples), mas ambas metodologias apresentam expoentes críticos universais de campo médio ($\beta = 1/2, \alpha = 0, \nu = 1, \eta = 0, \delta = 3$). Resultados mais rigorosos [30] indicam para essas redes: rede kagomé $T_c = 2.143$, rede quadrada $T_c = 2.269$, rede triangular $T_c = 3.641$ e rede cúbica simples $T_c = 4.511$.

Kaneyoshi e colaboradores [31] utilizaram um outro desacoplamento nas funções de

³Estamos nos referindo explicitamente ao caso de aglomerado com um único spin EFT-1. Com $N=2$, por exemplo, é possível distinguir a topologia da rede observando a quantidade de vizinhos comuns aos sítios do aglomerado. Para as redes quadrada (q) e kagomé (k) dos quatro primeiros vizinhos, são comuns $z_q = 0$ e $z_k = 1$, respectivamente. Nas redes triangular (t) e cúbica (c), tem-se $z_t = 2$ e $z_c = 0$.

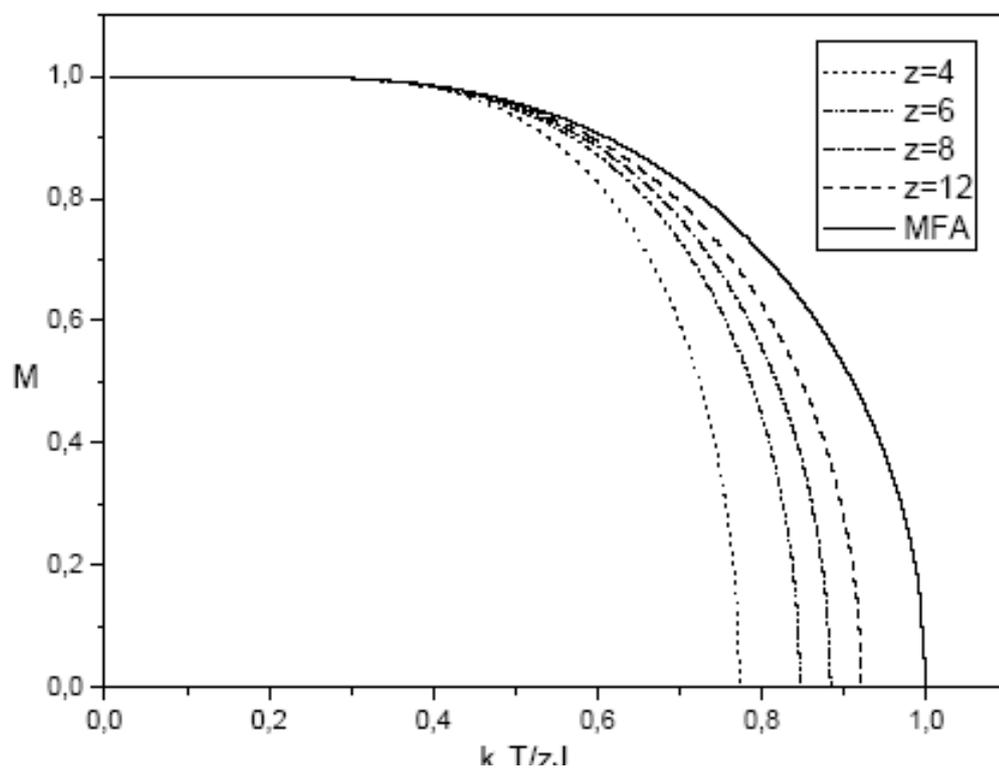


Figura 2.2: Convergência da temperatura crítica T_c obtida por EFT-1 para o valor obtido por MFA.

correlação na tentativa de encontrarem melhores resultados para a temperatura crítica na técnica do operador diferencial. Esse desacoplamento leva em consideração as flutuações dos spins pertencentes ao aglomerado. Desta maneira a correlação de curto alcance entre os spins do aglomerado e da sua vizinhança são embutidas na teoria escrevendo

$$\sigma_v \simeq \langle \sigma_v \rangle + \lambda(\sigma_1 - \langle \sigma_1 \rangle), \quad (2.43)$$

onde σ_v é o spin da vizinhança v do spin σ_1 do aglomerado com um único spin e λ representa o campo de reação de Onsager [31], [32]. Aplicando esse desacoplamento na Eq.(2.35) encontramos o seguinte resultado:

$$m = A(\lambda)m + C(\lambda)m^3, \quad (2.44)$$

sendo

$$A(\lambda) = 4A_1(K) + 12A_3(K)\lambda^2 - 8A_3(K)\lambda^3, \quad (2.45)$$

$$C(\lambda) = 4A_3(K)(1 - 3\lambda^2 + 2\lambda^3). \quad (2.46)$$

Tomando o limite $m \rightarrow 0$ na Eq.(2.44), encontramos a expressão para a temperatura crítica dada por:

$$A(\lambda_c) = 4A_1(K_c) + 12A_3(K_c)\lambda_c^2 - 8A_3(K_c)\lambda_c^3 = 1, \quad (2.47)$$

com λ_c ainda desconhecido.

Fazendo na Eq.(2.15) $B = \sigma_2$, desenvolvendo o formalismo do operador diferencial e usando a cinemática do spin $\sigma_i^2 = \sigma_i$, encontramos:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle &= A_1(K) + A_1(K)(\langle \sigma_2 \sigma_3 \rangle + \langle \sigma_2 \sigma_4 \rangle + \langle \sigma_2 \sigma_5 \rangle) + \\ &A_3(K)(\langle \sigma_3 \sigma_4 \rangle + \langle \sigma_3 \sigma_5 \rangle + \langle \sigma_4 \sigma_5 \rangle) + A_3(K)\langle \sigma_3 \sigma_4 \sigma_5 \rangle. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Substituindo a aproximação dada pela Eq.(2.43) na Eq.(2.44), obtemos

$$\begin{aligned}
m^2 + \lambda(1 - m^2) &= A_1(K) + 3[A_1(K) + A_3(K)]m^2 + A_3(K)m^4 + \\
&3[A_1(K) + A_3(K) + 2A_3(K)m^2](1 - m^2)\lambda^2 - \\
&8A_3(K)m^2(1 - m^2)\lambda^3 + A_3(K)(1 + 3m^2)(1 - m^2)\lambda^4.
\end{aligned} \tag{2.49}$$

A magnetização e o parâmetro λ são obtidos autoconsistentemente resolvendo as equações (2.44) e (2.49). Na criticalidade ($m \rightarrow 0$) teremos,

$$\lambda_c = A_1(K_c) + 3[A_1(K_c) + A_3(K_c)]\lambda_c^2 + A_3(K_c)\lambda_c^4. \tag{2.50}$$

Das equações (2.47) e (2.50) chegamos aos resultados $T_c = 2/\ln 2$ e $\lambda_c = 1/3$. Para um número de coordenação qualquer escrevemos:

$$T_c = \frac{2}{\ln \frac{z}{z-2}}, \tag{2.51}$$

$$\lambda_c = \frac{1}{z-1} \tag{2.52}$$

Taggart e Fittipaldi [33] sugeriram uma alternativa para se obter as funções de correlação, e denominaram de aproximação do triplo médio. Escolhendo $\{B\} = \coth K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}}$ tem-se na Eq.(2.15),

$$\langle B\sigma_1 \rangle = \left\langle B \tanh\left(K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}}\right) \right\rangle = 1. \tag{2.53}$$

Para a rede quadrada teremos,

$$1 = 4\mathcal{A}(K)\langle\sigma_1\sigma_2\rangle + 4\mathcal{B}(K)\langle\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4\rangle, \tag{2.54}$$

com

$$\mathcal{A}(K) = \frac{1}{8}[\coth(4K) + 2\coth(2K)], \tag{2.55}$$

$$\mathcal{B}(K) = \frac{1}{8}[\coth(4K) - 2\coth(2K)]. \quad (2.56)$$

Considerando, por exemplo, o valor médio da variável σ_p ($p \neq 1, 2, 3, 4$) e tomando como base a Eq.(2.54) encontramos

$$\langle \sigma_p \rangle = 3\mathcal{A}(K) \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_p \rangle + \mathcal{B}(K) \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \sigma_p \rangle. \quad (2.57)$$

Com o auxílio da invariância translacional $m = \langle \sigma_i \rangle$, zendo $\tau \equiv \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_p \rangle$ e $Q = \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \sigma_p \rangle$ a equação anterior será reescrita na forma

$$m = 3\tau\mathcal{A}(K) + Q\mathcal{B}(K). \quad (2.58)$$

Na aproximação do tripleto médio, seguindo os argumentos de Taggart e Fittipaldi, em $T = T_c$ temos $Q = 0$, e portanto das Eqs.(2.58) e (2.34), obtemos a temperatura crítica de forma autoconsistente a partir da seguinte expressão

$$A_3(K_c) = 3\mathcal{A}(K_c)[1 - 3A_1(K_c)], \quad (2.59)$$

isto é, $T_c = K_c^{-1} = 2,680$.

Taggart [34] desenvolveu outro tipo de aproximação fazendo uso de desacoplamento na equações (2.54) e (2.57) usando a Eq.(2.43) e obteve para a rede quadrada um valor para a temperatura crítica mais próximo do valor exato ($T_c = 2.269$), isto é, $T_c = 2.490$.

Podemos melhorar quantitativamente os resultados obtidos para a temperatura crítica com o aumento do número de spins no aglomerado. Por exemplo, em aglomerado com $N=2$ spins o Hamiltoniano reduzido será dado por

$$\mathcal{H} = K\sigma_1\sigma_2 + K\sigma_1 \sum_{\delta_1} \sigma_{1+\delta_1} + K\sigma_2 \sum_{\delta_2} \sigma_{2+\delta_2}. \quad (2.60)$$

Definindo $A_\Omega = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2)$ e substituindo a Eq.(2.) na Eq.(2.15) obtemos a seguinte

expressão para a magnetização por spin

$$m = \left\langle \frac{\sinh(a_1 + a_2)}{\cosh(a_1 + a_2) + e^{-2K} \cosh(a_1 - a_2)} \right\rangle,$$

onde $a_n = K \sum_{\delta_1} \sigma_{n+\delta_n}$ ($n = 1, 2$).

Através das definições dos operadores diferenciais $D_x \equiv \partial/\partial x$ e $D_y \equiv \partial/\partial y$ relativos a cada variável independente de spin (a_1, a_2) reescrevemos a Eq.(2.60) na forma

$$m = \left\langle e^{K \sum_{\delta_1}^{z-1} \sigma_1 + \delta_1 D_x} \cdot e^{K \sum_{\delta_2}^{z-1} \sigma_2 + \delta_2 D_y} \right\rangle g(x, y) |_{x,y=0}, \quad (2.61)$$

com

$$g(x, y) = \frac{\sinh(x + y)}{\cosh(x + y) + e^{-2K} \cosh(x - y)}. \quad (2.62)$$

Dentre os z vizinhos dos sítios do aglomerado observamos que z' destes são vizinhos comuns. Desta maneira a Eq.(2.61) assume a forma

$$m = \left\langle \prod_{\delta_1}^{z-1-z'} e^{K \sigma_1 + \delta_1 D_x} \prod_{\delta_2}^{z-1-z'} e^{K \sigma_2 + \delta_2 D_y} \prod_{\delta}^{z'} e^{K \sigma_{\delta} + \delta(D_x + D_y)} \right\rangle g(x, y) |_{x,y=0}, \quad (2.63)$$

onde $\prod_{\delta_1}^{z-1-z'}$ e $\prod_{\delta_2}^{z-1-z'}$ representam os produtórios entre os operadores de spins vizinhos de cada sítio 1 e 2 do aglomerado não comuns e cada $\prod_{\delta}^{z'}$ representa o produtório entre os spins comuns.

Usando a Eq.(2.32) reescrevemos a Eq.(2.61) na forma

$$m = \left\langle \prod_{\delta_1}^{z-1-z'} (C_x + \sigma_{1+\delta_1} S_x) \prod_{\delta_2}^{z-1-z'} (C_y + \sigma_{2+\delta_2} S_y) \prod_{\delta}^{z'} (C_{x+y} + \sigma_{\delta} S_{x+y}) \right\rangle g(x, y) |_{x,y=0}, \quad (2.64)$$

onde $C_\mu(\mu = x, y) = \cosh KD_\mu$, $S_\mu = \sinh KD_\mu$, $C_{x+y} = \cosh K(D_x + D_y)$ e $S_{x+y} = \sinh K(D_x + D_y)$.

Na teoria de campo efetivo com aglomerado com um único spin (EFT-1), apenas o número de primeiros vizinhos (z) está presente no formalismo e desta maneira redes com topologias diferentes apresentam o mesmo valor para a temperatura crítica (T_c). Com a teoria de campo efetivo em aglomerado com N=2 spins (Eq.2.63) podemos distinguir as topologias e encontrar diferentes valores para T_c observado o número de vizinhos comuns (z') em cada caso. Por exemplo, temos para a rede quadrada ($z = 4$, $z' = 0$) e para a rede Kagomé ($z = 4$, $z' = 2$), para as redes triangular e cúbica simples ($z = 6$, $z' = 2$) e ($z = 6$, $z' = 0$), respectivamente.

Para resolver a Eq.(2.63) vamos novamente utilizar a aproximação de Zernike. Com isto teremos:

$$m = (C_x + mS_x)^{z-1-z'}(C_y + mS_y)^{z-1-z'}(C_{x+y} + mS_{x+y})^{z'}g(x, y)|_{x,y=0}. \quad (2.65)$$

Expandindo até a primeira ordem de m na Eq.(2.64) encontraremos

$$m \simeq A^{z,z'}(K)m \quad (2.66)$$

com

$$A^{z,z'}(K) = \frac{[2(z - z' - 1)(C_x)^{z-z'-2}(C_y)^{z-z'-1}S_x + z'S_{x+y}(C_x)^{z-1}(C_y)^{z-1}(C_{x+y})^{z'-1}]g(x, y)|_{x,y=0}}{z'S_{x+y}(C_x)^{z-1}(C_y)^{z-1}(C_{x+y})^{z'-1}} \quad (2.67)$$

Na temperatura crítica $m \rightarrow 0$ e a Eq.(2.65) torna-se

$$A^{z,z'}(K) = 1. \quad (2.68)$$

Na tabela (II.1) apresentamos os valores da temperatura crítica do modelo de Ising de spin 1/2 para várias topologias de rede com melhoria dos resultados encontrados via EFT-2 comparativamente aos resultados em EFT-1, com uma lenta convergência aos resultados

Redes	EFT-1	EFT-2	Exato/Séries
Kagomé	3.090	2.923	2.143
Quadrada	3.090	3.025	2.269
Triangular	5.073	4.950	3.641
Cúbica Simples	5.073	5.039	4.511

Tabela II.1: Valores para a temperatura crítica reduzida para o modelo de Ising de spin 1/2 em diversas topologias.

exatos.

2.5 Transição de Fase Descontínua e Energia Livre

A presença de transições de fase onde o parâmetro de ordem não se anula na temperatura de transição, gera uma complicação a ser contornada na Teoria de Campo Efetivo. Além das equações de estado, geradas pelas médias na Teoria de Campo Efetivo, uma outra equação é necessária para construirmos a linha de transição de primeira ordem: a igualdade das energias livres (construção de Maxwell) das fases de cada lado da linha de transição. Vamos adotar o mesmo procedimento seguido no trabalho de doutorado [37] de J.R.Viana no qual a energia livre ϕ tem a seguinte forma:

$$\phi = \Omega_1(T, \alpha, \lambda) + \Omega_2(T, \alpha, \lambda)\Phi(m, T, \alpha, \lambda) \quad (2.69)$$

com $\Omega_1(T, \alpha, \lambda)$ e $\Omega_2(T, \alpha, \lambda)$ funções arbitrárias que não influenciam nos diagramas de fase e consideradas independentes das fases as quais pertencam. A condição de mínimo de energia ocorre para

$$\frac{\partial \phi}{\partial m} = 0, \quad (2.70)$$

implicando em

$$\frac{\partial \Phi(m, T, \alpha, \lambda)}{\partial m} = 0. \quad (2.71)$$

Disto é proposta a seguinte expansão para Φ :

$$\Phi(m, T, \alpha, \lambda) = A_o m + \frac{1}{2}(A_1(T, \alpha, \lambda) - 1)m^2 + \sum_{p=2}^n \frac{1}{p+1} A_p(T, \alpha, \lambda) m^{p+1}, \quad (2.72)$$

com T, α e λ como anteriormente descritos. De tal forma que sua derivada em relação ao parâmetro de ordem

$$\frac{\partial \Phi}{\partial m} = A_o + (A_1 - 1)m + \sum_{p=2}^n A_p(T, \alpha, \lambda) m^p \quad (2.73)$$

$$m = \sum_{p=0}^n A_p(T, \alpha, \lambda) m^p \quad (2.74)$$

é a forma da magnetização desejada.

Para o caso AF e sem a presença de campo magnético externo ($H = 0$), a rede é bipartida, ou seja, apresenta duas subredes com magnetizações simétricas, valendo a condição de contorno,

$$m = m_A = -m_B, \quad (2.75)$$

e os coeficientes de ordem par da Eq.(2.74) são nulos. Com campo externo aplicado, teremos a magnetizações total e de subrede, respectivamente, dadas por:

$$m = \frac{m_A + m_B}{2} \quad (2.76)$$

$$m_s = \frac{m_A - m_B}{2} \quad (2.77)$$

e todos os coeficientes A_p estão presentes nas expansões da energia livre e das magnetizações.

Por exemplo, transições de fase de segunda ordem têm sido previstas por simulação de Monte Carlo entre as fases (F) e (P) no Modelo de Heisenberg Frustrado. Igualando

as energias livres das referidas fases encontraremos expressões do tipo

$$\sum_{p=0}^3 \frac{A_{2p+1} m^{2p}}{p+1} = 1. \quad (2.78)$$

Resolvendo simultaneamente esta equação com a equação de estado encontramos a temperatura de transição e a magnetização à α fixo. Se $m = 0$ a transição será crítica (2ª ordem), em caso contrário será descontínua (1ª ordem).

Referências

- [1] H. B. Callen, *Phys. Lett.* **4**, 161 (1963).
- [2] M. Suzuki, *Phys. Lett.* **19**, 267 (1965).
- [3] R. A. Tahir-Khel e G. B. Taggart, *Phys. Rev.* **188**, 1142 (1969);
- [4] F. C. Sá Barreto e I. P. Fittipaldi, *Phys. A* **129**, 360 (1985).
- [5] R. Honmura e T. Kaneyoshi, *Progr. Theor. Phys.* **60**, 635 (1978).
- [6] F. C. Sá Barreto e I. P. Fittipaldi, *Rev. Brasileira de Física* **11**, 745 (1981).
- [7] R. P. Dobrushim, *Theor. Prob. Appl.* **13**, 197 (1969); O. E. Landford e D. Ruelle, *Commun. Math. Phys.* **13**, 194 (1969).
- [8] G. Parisi, *Statistical Field Theory*, Addison-Wesley, 1988.
- [9] F. Zernike, *Physica 1* 565 (1940).
- [10] T. Idogaki, N. Uryu, *Physica A* **181**, 173 (1992).
- [11] T. Idogaki, Y. Miyoshi, Tucker, *J. W., J. Mag. Mag. Mat.* **154**, 221 (1996).
- [12] F. Lacerda, J. Ricardo de Sousa, I. P. Fittipaldi, *J. Appl. Phys.* **75**, 5829 (1994).
- [13] I. G. Araújo, J. Cabral Neto, J. Ricardo de Sousa, *Physica A* **260**, 150 (1998).
- [14] J. Cabral Neto, J. Ricardo de Sousa, *Phys. Stat. Sol. B* **212**, 343 (1999).

- [15] J. Cabral Neto, J. Ricardo de Sousa, *Phys. Stat. Sol. B* **225**, 223 (2001).
- [16] J. Cabral Neto, J. Ricardo de Sousa, *Physica A* **319**, 319 (2003).
- [17] N. D. Mermin, H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 1133 (1966).
- [18] J. R. L. de Almeida, I. P. Fittipaldi, F. C. Sá Barreto, *J. Phys. C* **14**, 103 (1981);
T. Kaneyoshi, *Phys. Rev. B* **24**, 2693 (1981).
- [19] E. F. Sarmiento, C. Tsallis, *Phys. Rev. B* **27**, 5784 (1983); T. Kaneyoshi, I. Tamura,
R. Honmura, *Phys. Rev. B* **29**, 2769 (1984).
- [20] I. Tamura, E. F. Sarmiento, I. P. Fittipaldi, T. Kaneyoshi, *Phys. Stat. Solidi B* **118**,
409 (1983).
- [21] T. Kaneyoshi, I. P. Fittipaldi, *Phys. Stat. Solidi B* **105**, 629 (1981).
- [22] A. F. Siqueira, I. P. Fittipaldi, *Phys. Rev. B* **31**, 6092 (1985); *Phys. Stat. Sol. B* **119**,
K31 (1983).
- [23] R. Honmura, E. F. Sarmiento, C. Tsallis, I. P. Fittipaldi, *Phys. Rev. B* **29**, 2761
(1984).
- [24] M. A. Neto, J. Ricardo de Sousa, *Phys. Lett. A* **330**, 322 (2004). Ver também
dissertação de mestrado de Minos Neto, *Modelo de Ising Antiferromagnético com
Campo Transverso: Criticalidade e Termodinâmica*, UFAM (2004).
- [25] E. Bublitz, J. Ricardo de Sousa, *Phys. Lett. A* **323**, 9 (2004). Ver também dissertação
de mestrado do Edgar Bublitz, *Transição de Fase Quântica Induzida por Campo
Externo*, UFAM (2003).
- [26] J. Ricardo de Sousa, Araújo, I. G., *J. Mag. Mag.* **202**, 231 (1999).
- [27] J. Cabral Neto, J. Ricardo de Sousa, J. A. Plascak *Phys. Rev. B* **66**, 064417 (2002).

- [28] D. P. Landau, K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, 2000.
- [29] Ver tese de doutorado de Ijanílio Araújo, *Estudo Sistemático da Fase Antiferromagnética do Modelo de Heisenberg Anisotrópico*, UFSCar (2004).
- [30] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, 1982.
- [31] T. Kaneyoshi, I. P. Fittipaldi, R. Honmura, T. Manabe, *Phys. Rev. B* **24**, 481 (1981).
- [32] L. Onsager, *J. Am. Chem. Soc.* **58**, 1486 (1936).
- [33] G. B. Taggart e I. P. Fittipaldi, *Phys. Rev. B* **25**, 7026 (1982).
- [34] G. B. Taggart, *Phys. A* **113**, 535 (1982).
- [35] Ver tese de doutorado de J. R. Viana, *Transição de Fase Quântica e Modelos de Spins Frustrados*, UFSCar (2007).

Capítulo 3

Modelos Magnéticos com Interações Competitivas: Teoria de Campo Efetivo

3.1 Introdução

Neste capítulo desenvolvemos a Teoria de Campo Efetivo (EFT) em aglomerado finito para analisar os estados antiferromagnético (AF), colinear antiferromagnético (CAF), colinear ferromagnético (CF), ferromagnético (F) no modelo de Heisenberg anisotrópico com interações competitivas (modelo $J_1 - J_2$) numa rede cúbica simples.

O modelo $J_1 - J_2$ em duas e três dimensões tem sido estudado há mais de vinte anos, onde em $T = 0$ é previsto um estado desordenado (líquido de spin -LS) na rede quadrada entre os estados AF e CAF que é dependente do parâmetro de frustração $\alpha = J_2/J_1$. Por outro lado, para o caso de redes $3d$ (cúbica simples-sc e cúbica de corpo centrado-bcc) temos uma transição quântica de primeira ordem direta entre os estados AF e CAF. Portanto, o efeito da dimensionalidade é um fator crucial para a existência do estado LS. Além disso, à medida que o valor do spin S aumenta temos uma diminuição gradual das flutuações quânticas de tal maneira que no limite $S \rightarrow \infty$ (clássico) o estado LS

é completamente destruído. Outra maneira de analisar o desaparecimento do estado LS por presença de aspectos clássicos no sistema pode ser simulada através da substituição das variáveis de Heisenberg por variáveis de Ising. Desta maneira, no modelo $J_1 - J_2$ Ising numa rede quadrada temos uma transição direta e de primeira ordem em $\alpha_c = \frac{1}{2}$ entre as fases AF e CAF. Afim de simular estes dois aspectos de dimensionalidade (d) e simetria do Hamiltoniano (n), vamos introduzir os parâmetros λ e Δ , de anisotropia espacial e de troca, respectivamente. O parâmetro λ corresponde a interação entre planos de uma rede cúbica simples anisotrópica onde $\lambda = 0$ e $\lambda = 1$ correspondem aos limites das redes quadrada e sc, respectivamente, enquanto, o parâmetro Δ mede a anisotropia de troca presente no Hamiltoniano de tal modo que $\Delta = 0$ e $\Delta = 1$ correspondem aos limites Heisenberg isotrópico e Ising, respectivamente. Algumas questões (teóricas) relevantes serão investigadas a seguir: i) se existe um valor crítico $\Delta = \Delta_c$ no qual para $\Delta > \Delta_c$ temos uma transição de fase direta AF \rightleftharpoons CAF para o caso da rede quadrada ($\lambda = 0$); ii) se existe um valor crítico $\lambda = \lambda_c$ no qual para $\lambda > \lambda_c$ temos uma transição de fase direta AF \rightleftharpoons CAF para o caso isotrópico ($\Delta = 0$); iii) quais as ordens das transições de fases AF \rightleftharpoons LS e CAF \rightleftharpoons LS ?; iv) como se caracteriza o estado LS ? Todas essas questões serão objetivos desse capítulo.

Do ponto de vista experimental, o modelo $J_1 - J_2$ antiferromagnético tem sido usado para simular as propriedades magnéticas dos compostos formados de planos de óxido de vanádio como, por exemplo, o composto $Li_2VO Si O_4$. Certamente, estes compostos frustrados apresentam valores fixos para as interações J_1 e J_2 (consequentemente $\alpha = J_2/J_1$ é fixo), e portanto, os diagramas de fases construídos variando o parâmetro de frustração α é ainda uma idealização teórica. No caso do composto $Pb_2VO(PO_4)_2$ foi observada a presença de uma interação J_1 ferromagnética e este caso não tem sido explorado na literatura, e esta razão representa uma outra motivação neste trabalho que será investigada a seguir usando a EFT.

3.2 Compostos de Vanádio e o Modelo de Heisenberg Frustrado

Os compostos de vanádio desempenham um papel de grande importância no estudo de sistemas eletrônicos altamente correlacionados. A característica singular em alguns óxidos de vanádio é a transição de fases semicondutor-metal com o aumento da temperatura. Pelo menos oito óxidos de vanádio apresentam esse tipo de transição, com temperaturas variando de -147 a $68^{\circ}C$, que modifica drasticamente as propriedades elétricas, estruturais e ópticas desses óxidos. O possível mecanismo associado a essa transição está associado as propriedades do “gap” de energia que estabelece o caráter isolante em $T = 0 K$. Esse “gap” pode ser estabelecido pela mudança de ordem estrutural, criando um isolante de Peierls ou tem origem nas correlações elétron-elétron, criando um isolante de Mott-Hubbard.

Os óxidos de vanádio exibem uma grande variedade de propriedades estruturais e magnéticas excêntricas, sendo bastante promissor a sua aplicabilidade tecnológica. Isto decorre da grande variedade de formas de ligação que esse composto pode existir: tetraédricas, octaédricas, bipirâmides pentagonais, trigonal piramidal, etc... Por exemplo, ao ligar-se com o oxigênio o vanádio pode gerar óxidos em até 13 famílias estequiométricas diferentes, com energias de formação comparáveis.

Quanto ao estudo da supercondutividade, os óxidos de V^{4+} são eletrônicos em oposição aos compostos de Cu^{2+} (que possuem um buraco $3d$) e apresentam estruturas e propriedades semelhantes às dos supercondutores de altas temperaturas.

Outras propriedades importantes desses compostos são, por exemplo, a transição metal isolante observada na maioria dos óxidos binários de vanádio. Propriedades químicas, elétricas, magnéticas, catalíticas [1] e uso em construção de baterias de alta qualidade com inserção do lítio nos óxidos de vanádio ricos em oxigênio. São utilizados na construção de instrumentos baseados nas variações das propriedades óticas e elétricas, como, por exemplo, espelhos com índice de refração variável, memórias ópticas [2,3], sensores

térmicos e chaves elétricas termicamente ativadas em dispositivos que permitem passagem de luz e que bloqueiam a passagem do calor (películas de VO_2), etc...

Também em biologia [4], o vanádio é extremamente importante e essencial em organismos vivos. Devido a reatividade que traz a algumas proteínas sua ação é relacionada com o crescimento e desenvolvimento desses organismos. Seus efeitos no organismo humano [5,6] são, por exemplo, de normalizar a concentração de glicose sanguínea, restaurar a função cardíaca e aumentar a lipogênese. Aumentam o transporte e a oxidação de glicose, estimulam a síntese de glicogênio em fígado, sendo mesmo antes da descoberta da insulina, indicado clinicamente na melhora do diabetes.

Alguns exemplos de compostos de vanádio são: $Pb_2VO(PO_4)_2$, $BaZnVO(PO_4)_2$, $SrZnVO(PO_4)_2$ [7]. O estudo das propriedades magnéticas por meio do calor específico e da susceptibilidade tem indicado que o composto $Pb_2VO(PO_4)_2$ é formado por uma rede quadrada com interações de primeiros vizinhos ferromagnéticas e interação de segundos vizinhos, ao longo das diagonais, antiferromagnética. Esse composto é estruturalmente muito parecido com o composto $Li_2VO(Si, Ge)O_4$ [8-10]. Cenário fisicamente idêntico é encontrado nos compostos $BaZnVO(PO_4)_2$, onde as interações de troca têm magnitudes um pouco diferentes e são antiferromagnéticas.

Os compostos óxidos de vanádio $Li_2VO(Si, Ge)O_4$ (ver figura 3.1), foram estudados inicialmente por Melzi e colaboradores [9], onde usaram medidas experimentais de ressonância magnética nuclear (RMN) e determinaram o estado ordenado dos spins. A partir da análise do comportamento da susceptibilidade $\chi(T)$, estimou-se a temperatura crítica de Curie-Weiss dada por $T_c = J_1 + J_2$, cujo valor encontrado foi $T_c \simeq (8.2 \pm 1)K$ [10]. Com isto, e da observação da posição do ponto máximo do calor específico, estimou-se também o parâmetro de frustração, encontrando o seguinte resultado, $\alpha \simeq 1.1$. Este resultado indica que o estado fundamental do $Li_2VO(Si, Ge)O_4$ é a ordem colinear. Diferentemente, cálculos de estrutura de banda [11] tem estimado para o composto Li_2VOSiO_4 os seguintes valores $J_1 + J_2 \simeq 9.5 \pm 1.5$ e $\alpha = J_2/J_1 \simeq 12$. Esses resultados também estão fortemente em contradição aos resultados previstos por expansão

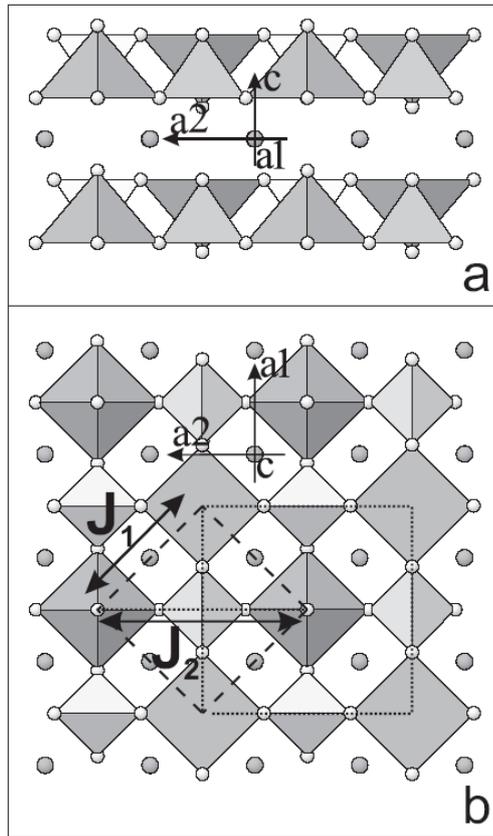


Figura 3.1: Estrutura do composto Li_2VOPO_4 . Os ions de Li são mostradas como esferas cinzas. O quadrado tracejado indica a rede com interações $J_1 - J_2$. Em (a) temos a visão paralela aos planos de $VOPO_4$ e em (b) paralela ao eixo c .

em série em altas temperaturas [12], que faz as seguintes estimativas $J_1 = (1.25 \pm 0.5)K$, $J_2 = (5.95 \pm 0.2)K$ e $\alpha \simeq 5$.

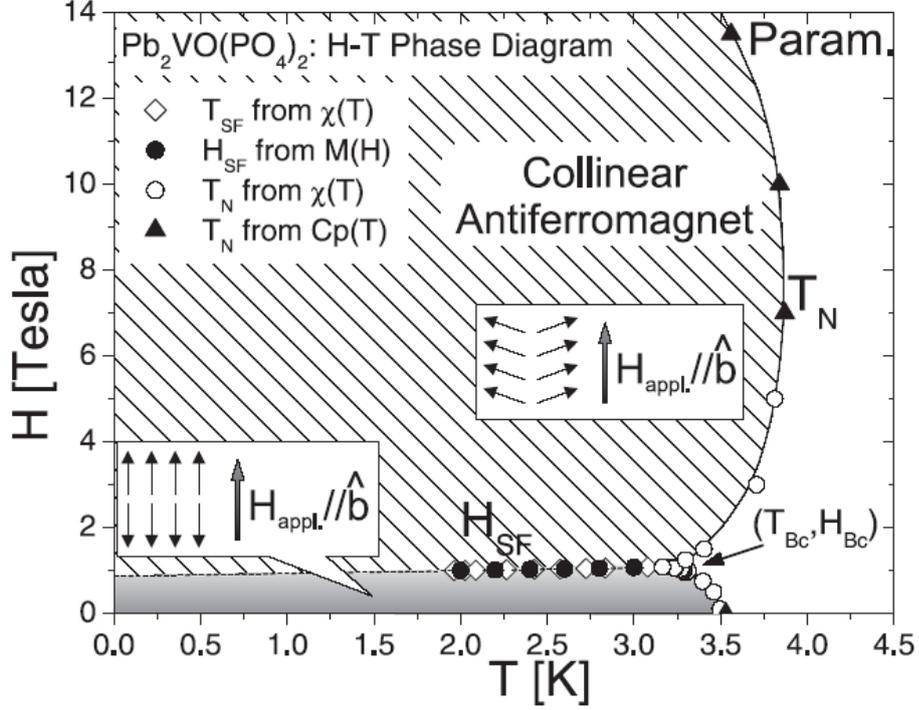


Figura 3.2: Diagrama de fases no plano $H - T$ para o composto $Pb_2VO(PO_4)_2$.

Na figura 3.2 apresentamos o diagrama de fases do composto $Pb_2VO(PO_4)_2$ em função do campo externo H aplicado à amostra e da temperatura T . A temperatura crítica T_N (transição de segunda ordem) foi estimada da medida da susceptibilidade $\chi(T)$ (círculos brancos) e do calor específico à pressão constante $C_p(T)$ (triângulos escuros). O diagrama mostra a destruição da fase colinear com aplicação do campo externo. As fases presentes no diagrama são antiferromagnética (AF), colinear antiferromagnética (CAF) e paramagnética induzida pelo campo (P). Para $H \simeq 1 T$, a transição de fases $CAF \rightleftharpoons P$ ocorre em $T_C \simeq 3,3K$.

Podemos observar, também, o comportamento da magnetização nos regimes de baixas e altas temperaturas para os compostos Li_2VOGeO_4 , $Li_2VO Si O_4$ e $VOMoO_4$. Em

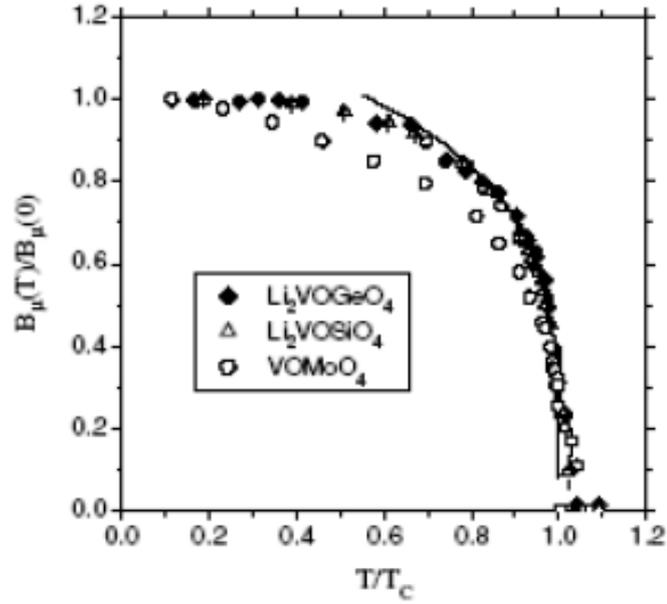


Figura 3.3: Comportamento da magnetização em função da temperatura reduzida T/T_c para os compostos de vanádio Li_2VOGeO_4 , $Li_2VO Si O_4$ e $VOMoO_4$.

baixas temperaturas a magnetização é comparada com os resultados oferecidos pelo modelo $J_1 - J_2$ na rede quadrada com uma pequena interação λ entre planos. De acordo com os dados experimentais de $m(T)$, faz-se a seguinte estimativa $10^{-4} \leq J_1/J_1 + J_2 \leq 10^{-2}$. Em altas temperaturas e a campo nulo o expoente crítico associado à magnetização é $\beta = 0.236$, valor comparável ao resultado obtido por Bramwell e Hodsworth [13] para o modelo XY quase- $2d$.

Medidas do calor específico à pressão constante em função da temperatura realizadas por E.E. Kaul e colaboradores [19] em monocristais do composto $Pb_2VO(PO_4)$ a campo nulo, mostram que $C_P(T)$ possui duas contribuições: o calor específico da rede (fônons) e o calor específico magnético (do sistema de spins). Na região destacada da figura 3.4 estão as estimativas para essas duas contribuições, com a linha cheia indicando a contribuição magnética que é dominante em baixas temperaturas e a pontilhada correspondente à contribuição dos fônons, que predomina na região de altas temperaturas e os

círculos indicam a contribuição total. A contribuição magnética para o $C_p(T)$ em baixas temperaturas é altamente importante para avaliar a relação J_2/J_1 , pois valores reduzidos desta contribuição levam a uma superestimativa na frustração quando se compara com previsões teóricas.

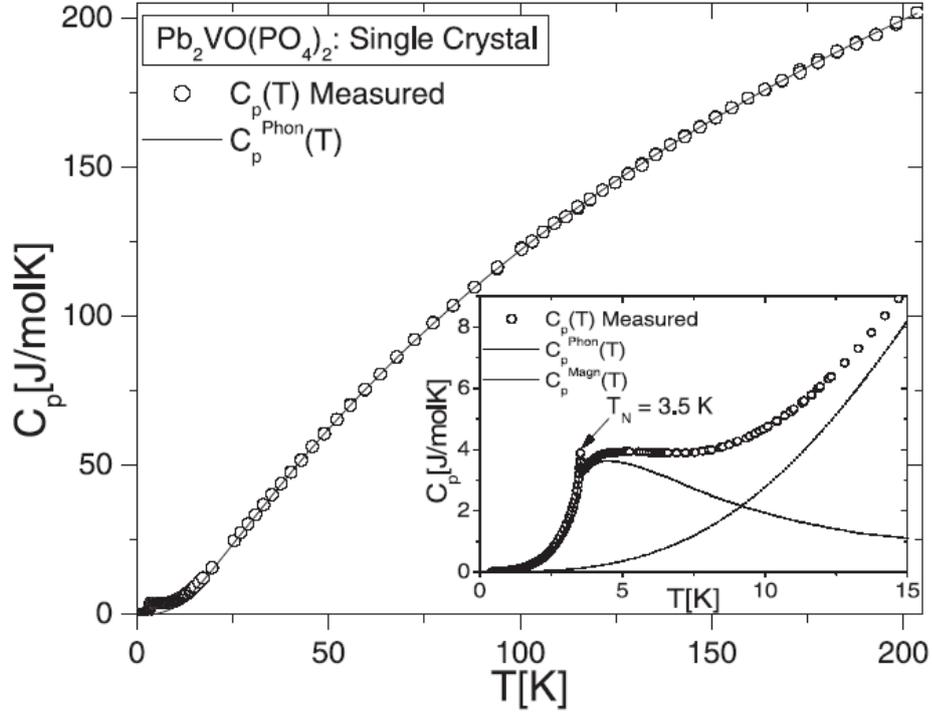


Figura 3.4: Calor específico a pressão constante em monocristais de $Pb_2VO(PO_4)_2$ em função da temperatura. Detalhe: contribuição total para o calor específico em baixas temperaturas.

Teoricamente é ponto bem estabelecido que, dependendo do valor do parâmetro α de frustração e da magnitude do spin (inteiro ou semi-inteiro), o Hamiltoniano de Heisenberg Frustrado apresenta comportamento bastante diferente. Estes comportamentos são decorrentes da conjectura de Haldane. De acordo com Haldane, sistemas com spins inteiros apresentam gap nas propriedades termodinâmicas, enquanto que, para spins semi-inteiros este gap não é presente. Mais explicitamente falando, para $S = 1/2$, na ausência de frustração ($\alpha = 0$), o estado fundamental é caracterizado por um espectro de excitação

sem gap e comportamento tipo lei de potência na função de correlação spin-spin. Com $\alpha \neq 0$, o comportamento é o mesmo para $\alpha < \alpha_c$ (onde α_c é um valor crítico) e apresenta gap com queda exponencial na função de correlação para $\alpha > \alpha_c$.

Para spin $S = 1$, temos o gap de Haldane no sistema sem frustração. Para $\alpha < 0.40$, obteve-se que a energia do estado fundamental e o gap aumentam com o valor de α . Pati e colaboradores [14] e Kolezhuk e colaboradores [15] encontraram que, enquanto $\alpha < 0.40$ o gap aumenta com o valor de α , diminuindo em seguida até $\alpha = 0.73$ e voltando a aumentar acima deste valor.

De acordo com os resultados encontrados por Read e Sachdev [16] no modelo de Heisenberg AF em $2d$, um estado desordenado é previsto para esse modelo dependendo do valor do spin. Para $S = 1$, Moukourni [17] fez a previsão do estado com gap RVB e no limite clássico ($S \rightarrow \infty$) esse estado é destruído [18] devido a ausência de flutuações quânticas.

O modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin 1/2 tem sido nos últimos anos cada vez mais estudado pelas mais diferentes técnicas. Uma importante justificativa pela intensa aplicação desse modelo recae, provavelmente, com sua conexão com a supercondutividade. Compostos supercondutores de altas temperaturas formadas por planos de CuO_2 [20,21], como, por exemplo, os compostos $YBa_3Cu_3O_{7-x}$ e $La_{2-x}Ba_xCuO_4$, são descritos adequadamente em sua fase isolante por esse modelo. Esses compostos são fortemente anisotrópicos, havendo um forte acoplamento entre os íons de cobre pertencentes ao plano de CuO_2 e um fraco acoplamento entre os planos. Partindo-se do composto isolante antiferromagnético La_2CuO_4 , a dopagem com os elementos Ba ou Sr numa certa proporção x , formando o composto $La_{2-x}(Sr, Ba)_xCuO_4$, produz um estado supercondutor¹. Essa dopagem tem como resultado efetivo a introdução de interações competitivas nos planos formados por CuO_2 devido ao desbalanceamento de cargas. Criam-se buracos (carga +e) com uma fração de x íons de oxigênio que estão

¹Por exemplo, para $x_c = 2.5\%$ no composto $La_{2-x}Ba_xCuO_4$, o fenômeno da supercondutividade começa a se manifestar.

situados entre átomos de cobre (Cu) dos planos de CuO_2 , onde acontecem as correlações magnéticas. Essas são as correlações responsáveis pela fase supercondutora. Diversas propriedades termodinâmicas desse sistema são descritas adequadamente pelo modelo de Heisenberg quase $2d$.

Para pequenos valores do spin e relacionado à presença de flutuações quânticas, Anderson [52] propôs a existência de uma nova fase no estado fundamental, no modelo de Heisenberg $2d$ (rede triangular), sem ordem de longo-alcance denominado *Resonating Valence Bond* (RVB). O estado RVB é caracterizado pela presença de gap de energia e é responsável pelo transporte de carga nos planos de CuO_2 no composto supercondutor $La_{2-x}Sr_xCuO_4$. A presença de dopagem no composto é associada ao ponto crítico quântico da transição entre a fase isolante AF e o estado RVB (líquido de spins).

3.3 Modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg com Interação entre Planos

O Hamiltoniano que descreve o modelo $J_1 - J_2$ antiferromagnético ou ferromagnético é dado por

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^{(1)} [(1 - \Delta)(\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + \sigma_i^z \sigma_j^z] + \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^{(2)} [(1 - \Delta)(\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + \sigma_i^z \sigma_j^z] \quad (3.1)$$

onde o primeiro (segundo) somatório é feito sobre os primeiros (segundos) vizinhos numa rede cúbica anisotrópica, σ_i^μ ($\mu = x, y, z$) é a componente μ do operador de spin de Pauli no sítio i , Δ é o parâmetro de anisotropia na constante de troca de tal modo que $\Delta = 0$ e $\Delta = 1$ correspondem aos casos Heisenberg isotrópico e Ising, respectivamente. No caso antiferromagnético temos $J_{ij}^{(1)} > 0$ e no caso ferromagnético $J_{ij}^{(1)} < 0$. Para o modelo com interação entre planos $J_{ij}^{(1)}(J_{ij}^{(2)})$ é a interação de troca entre primeiros (segundos)

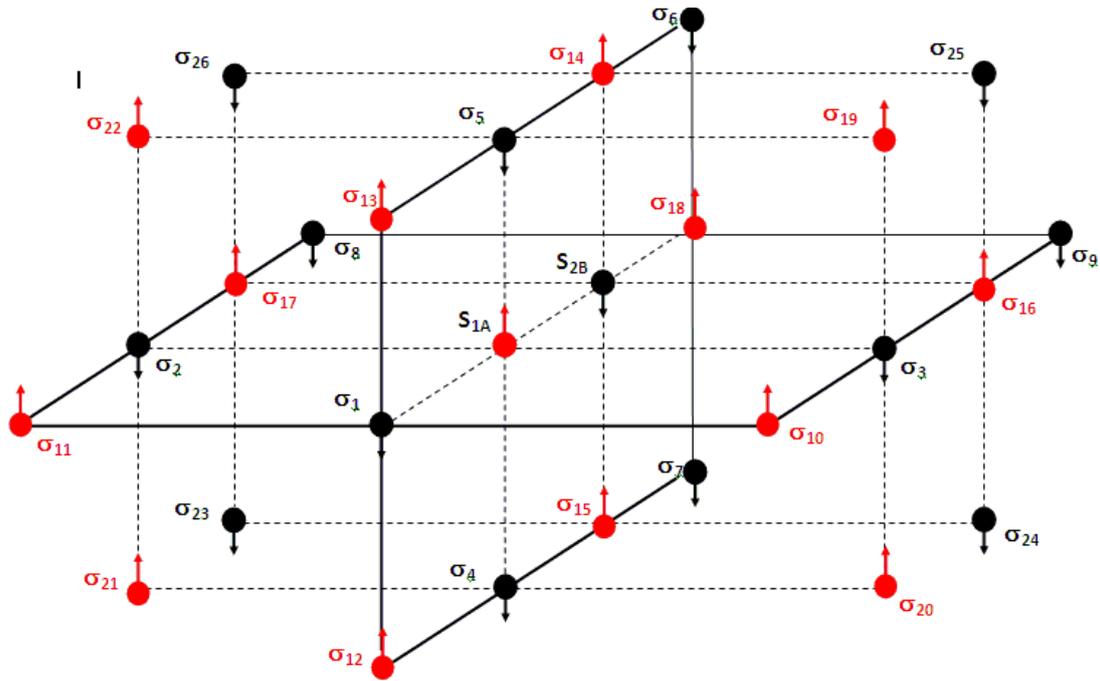


Figura 3.5: Estado fundamental antiferromagnético numa rede cúbica simples no aglomerado com $N=2$ spins. Os dois spins do aglomerado ($i = 1, 2$) são denotados por $\vec{S}_{iA,B}$ e os seus vizinhos por σ_i (variável de Ising). Os círculos pretos e vermelhos indicam as orientações opostas dos spins adjacentes em todas as direções.

vizinhos definida por

$$J_{ij}^{(1)} = \begin{cases} \pm J_1, & \text{no plano} \\ \pm \lambda J_1, & \text{entre planos} \end{cases},$$

$$J_{ij}^{(2)} = \begin{cases} J_2, & \text{no plano} \\ 0, & \text{entre planos} \end{cases},$$

Sendo λ o parâmetro de acoplamento que regula a dimensionalidade do sistema, isto é, para $\lambda = 0(1)$ temos o limite da rede quadrada $-2d$ (cúbica simples- $3d$).

Notemos que neste modelo a interação de segundos vizinhos J_2 está presente apenas no plano formado por uma rede quadrada, de modo que devido à competição entre a interação de primeiros vizinhos no plano J_1 (ferromagnética ou antiferromagnética) e de segundos vizinhos J_2 antiferromagnética ($J_2 > 0$) induz-se o fenômeno da frustração magnética no sistema causando a destruição do estado fundamental original (F ou AF no modelo não frustrado) em temperatura finita com o aumento do parâmetro $\alpha = J_2/|J_1|$ e dando origem a novos estados ordenados ou desordenados.

3.3.1 Teoria de Campo Efetivo em Aglomerado com dois Spins (EFT-2)

Em princípio vamos considerar um aglomerado com $N=2$ spins centrais denotados por \vec{S}_1 e \vec{S}_2 (situados em subredes diferentes) e os spins circundantes na aproximação axial $\vec{S}_i = \sigma_i \hat{z}$ (variável de Ising) de tal modo a considerar a condição de contorno para cada estado ordenado. Vejamos a seguir:

a) ESTADO ANTIFERROMAGNÉTICO (AF)

Conforme esquematizado o estado AF para este aglomerado finito na figura 3.5, o Hamiltoniano é dado por

$$-\beta \mathcal{H}_2^{AF} = -K [(1 - \Delta) (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + \sum_{i=1}^2 C_i^{AF} S_i^z \quad (3.2)$$

onde

$$\begin{aligned}
C_n^{AF} &= -C_{nx}^{AF} - C_{ny}^{AF}, \quad n = 1, 2 \\
C_{1x}^{AF} &= K \sum_{i=1}^3 \sigma_i^B + \lambda K \sum_{i=4}^5 \sigma_i^B \quad \text{e} \quad C_{1y}^{AF} = \alpha K \sum_{i=10,11,16,17} \sigma_i^A \\
C_{2x}^{AF} &= K \sum_{i=16}^{18} \sigma_i^A + \lambda K \sum_{i=14}^{15} \sigma_i^A \quad \text{e} \quad C_{2y}^{AF} = \alpha K \sum_{i=2,3,8,9} \sigma_i^B,
\end{aligned} \tag{3.3}$$

$K = \beta J_1$, $\alpha = J_2/J_1$, $\lambda = J_\perp/J_1$ e os índices subscritos nos operadores C^{AF} , $1x$ ($2x$) e $1y$ ($2y$) referem-se aos primeiros e segundos vizinhos, respectivamente, dos sítios 1 e 2 do aglomerado.

Escrevendo o Hamiltoniano (3.2) na base dos autovetores $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-\rangle, |--\rangle\}$ dos operadores S_i^z e $\sigma_i^{A,B}$, encontramos a seguinte representação matricial do operador

$$-\beta \mathcal{H}_{12}^{AF} = \begin{bmatrix} -K + C_+^{AF} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & K + C_-^{AF} & -2(1 - \Delta) & 0 \\ 0 & -2(1 - \Delta) & K - C_-^{AF} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -K - C_+^{AF} \end{bmatrix}$$

onde

$$C_\pm^{AF} = C_1^{AF} \pm C_2^{AF}.$$

Diagonalizando a matriz do Hamiltoniano reduzido $-\beta \mathcal{H}_2^{AF}$ e calculando os autovalores $\{\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4\}$ encontramos a função de partição $Z_2^{AF} = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_2^{AF}} = \sum_{r=1}^4 e^{\varepsilon_r}$ dada por

$$Z_2^{AF} = 2[\exp(-K) \cosh(C_1^{AF} + C_2^{AF}) + \exp(K) \cosh(\Gamma)]. \tag{3.4}$$

onde

$$\Gamma = \sqrt{(C_1^{AF} - C_2^{AF})^2 + 4K^2(1 - \Delta)^2}. \tag{3.5}$$

A magnetização de subrede é dada pela média do operador S_1^z , isto é

$$m_A = \langle S_1^z \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr} S_1^z \exp(-\beta \mathcal{H}_2^{AF})}{\text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}_2^{AF})} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial C_1^{AF}} \ln Z_2^{AF} \right\rangle. \tag{3.6}$$

Substituindo a função de partição (3.4) ficaremos com

$$m_A = \left\langle \frac{\sinh(C_1^{AF} + C_2^{AF}) + \exp(2K) \sinh[\Gamma \frac{C_1^{AF} - C_2^{AF}}{\Gamma}]}{\cosh(C_1^{AF} + C_2^{AF}) + \exp(2K) \cosh \Gamma} \right\rangle. \quad (3.7)$$

Aplicando a técnica do operador diferencial podemos reescrever a Eq.(3.7) na forma

$$m_A = \left\langle e^{\sum_{i=1}^2 (C_{ix} D_{ix} + C_{iy} D_{iy})} f_{AF}(\vec{x}, \vec{y}) \Big|_{\vec{x}, \vec{y}=0} \right\rangle, \quad (3.8)$$

sendo

$$f_{AF}(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{-\sinh(x_1 + y_1 + x_2 + y_2) + \exp(2K) \sinh \Gamma \frac{[(x_1 + y_1) - (x_2 + y_2)]}{\Gamma}}{\cosh(x_1 + y_1 + x_2 + y_2) + \exp(2K) \cosh \Gamma},$$

e

$$\Gamma = \sqrt{[(x_1 + y_1) - (x_2 + y_2)]^2 + 4K^2(1 - \Delta)^2}, \quad (3.9)$$

ou, equivalentemente com o uso de produtórios, na forma

$$m_A = \left\langle \prod_{i=1,2} e^{(C_{ix} D_{ix} + C_{iy} D_{iy})} \right\rangle f_{AF}(\vec{x}, \vec{y}) \Big|_{\vec{x}, \vec{y}=0}. \quad (3.10)$$

Como este procedimento se repetirá várias vezes para os diferentes estados, faremos explicitamente o cálculo para o estado AF. Substituindo os operadores C_{ix} e C_{iy} ($i = 1, 2$) o produtório assume a seguinte forma

$$m_A = \left\langle e^{KD_{1x}\sigma_1^B} \prod_{i=2}^3 e^{K(D_{1x} + \alpha D_{2y})\sigma_i^B} \prod_{i=4}^5 e^{\lambda K D_{1x} \sigma_i^B} \prod_{i=8}^9 e^{\alpha K D_{2x} \sigma_i^B} \right. \\ \left. e^{KD_{2x}\sigma_{18}^A} \prod_{i=16}^{17} e^{K(D_{2x} + \alpha D_{1y})\sigma_i^A} \prod_{i=14}^{15} e^{\lambda K D_{2x} \sigma_i^A} \prod_{i=10}^{11} e^{\alpha K D_{1y} \sigma_i^A} \right\rangle f_{AF}(\vec{x}, \vec{y}) \Big|_{\vec{x}, \vec{y}=0}. \quad (3.11)$$

Para spin $S = 1/2$ cada exponencial dentro da média é substituída por relações do tipo $e^{(KD)\sigma} = \cosh(KD) + \sigma \sinh(KD)$. Desta maneira a Eq.(3.12) ficará reescrita da seguinte

maneira

$$\begin{aligned}
m_A = & \left\langle (\cosh(KD_{1x}) + \sigma_1^B \sin h(KD_{1x})) \right. \\
& \prod_{i=2}^3 (\cosh(K(D_{1x} + \alpha D_{2y})) + \sigma_i^B \sin h(K(D_{1x} + \alpha D_{2y}))) \\
& \prod_{i=4}^5 (\cosh(\lambda K D_{1x}) + \sigma_i^B \sin h(\lambda K D_{1x})) \prod_{i=8}^9 (\cosh(\alpha K D_{2x}) + \sigma_i^B \sin h(\alpha K D_{2x})) \\
& (\cosh(KD_{2x}) + \sigma_{18}^A \sin h(KD_{2x})) \\
& \prod_{i=16}^{17} (\cosh(K(D_{2x} + \alpha D_{1y})) + \sigma_i^A \sin h(K(D_{2x} + \alpha D_{1y}))) \\
& \prod_{i=14}^{15} (\cosh(\lambda K D_{2x}) + \sigma_i^A \sin h(\lambda K D_{2x})) \\
& \left. \prod_{i=10}^{11} (\cosh(\alpha K D_{1y}) + \sigma_i^A \sin h(\alpha K D_{1y})) \right\rangle f_{AF}(\vec{x}, \vec{y})|_{\vec{x}, \vec{y}=0}.
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Agora a seguinte aproximação (do tipo RPA - *Random Phase Aproximation*) é realizada

$$\langle ABC...Z \rangle \simeq \langle A \rangle \langle B \rangle \langle C \rangle \dots \langle Z \rangle \tag{3.13}$$

e cada termo é agrupado em exponenciais positivas e negativas para facilitar o procedimento numérico. Por exemplo, o primeiro termo da expressão anterior ficará na forma

$$\begin{aligned}
\langle \cosh(KD_{1x}) + \sigma_1^B \sin h(KD_{1x}) \rangle &= e^{KD_{1x}} \left\langle \left(\frac{1 + \sigma_1^B}{2} \right) \right\rangle + e^{-KD_{1x}} \left\langle \left(\frac{1 - \sigma_1^B}{2} \right) \right\rangle, \\
&= e^{KD_{1x}} \left(\frac{1 - m}{2} \right) + e^{-KD_{1x}} \left(\frac{1 + m}{2} \right), \\
&= e^{KD_{1x}} b + e^{-KD_{1x}} a,
\end{aligned} \tag{3.14}$$

onde assumimos que a e b são dados por

$$\begin{aligned} a &= \left(\frac{1+m}{2} \right), \\ b &= \left(\frac{1-m}{2} \right), \end{aligned} \quad (3.15)$$

e

$$\langle \sigma_i^B \rangle = -\langle \sigma_i^A \rangle = -m. \quad (3.16)$$

Procedendo desta maneira em todos os termos, encontramos finalmente a forma da magnetização da subrede, isto é

$$\begin{aligned} m_A &= [(ae^{\lambda KD_{2x}} + be^{-\lambda KD_{2x}})^2 (ae^{\alpha KD_{1y}} + be^{-\alpha KD_{1y}})^2 (ae^{KD_{2x}} + be^{-KD_{2x}}) \\ &\quad (ae^{\alpha KD_{1y} + KD_{2x}} + be^{-\alpha KD_{1y} - KD_{2x}})^2 (be^{KD_{1x}} + ae^{-KD_{1x}}) \\ &\quad (be^{\alpha KD_{2y} + KD_{1x}} + be^{-\alpha KD_{2y} - KD_{1x}})^2 (be^{\lambda KD_{1x}} + ae^{-\lambda KD_{1x}})^2 \\ &\quad (be^{\alpha KD_{2y}} + ae^{-\alpha KD_{2y}})^2] f_{AF}(\vec{x}, \vec{y})_{\vec{x}, \vec{y}=0}. \end{aligned}$$

Na implementação numérica (ver apêndice) colecionamos os expoentes de cada termo binomial: $n_1 = 2$, $n_2 = 2$, $n_3 = 1$, $n_4 = 2$, $n_5 = 1$, $n_6 = 2$, $n_7 = 2$, $n_8 = 2$. Esses termos são selecionados e a expansão é feita computacionalmente para a determinação da equação de estado m_F .

b) ESTADO COLINEAR ANTIFERROMAGNÉTICO (CAF)

O estado colinear antiferromagnético (CAF) é caracterizado em duas dimensões ($d = 2$) na rede quadrada com uma configuração de spins alinhados paralelamente ao longo de uma mesma linha e alternados em linhas paralelas adjacentes. Em três dimensões ($d = 3$) (figura 3.6) os spins são alternados em linhas adjacentes nas direções horizontal e vertical (círculos vermelhos e pretos na figura). No caso do estado clássico AF temos spins em toda a rede orientados em direções opostas (ver figura 3.5). Vale salientar que tanto o estado AF como o CAF são autoestados do sistema clássico, mas no caso quântico não sabemos o verdadeiro estado fundamental, e por falta de informação precisa

usaremos como ponto de partida para as condições de contorno estes estados clássicos, onde os efeitos quânticos serão naturalmente manifestados durante o tratamento teórico.

O procedimento usado para calcular a magnetização da subrede A (parâmetro de ordem) é análogo ao realizado para o caso do estado AF, sendo que agora usamos as condições de contorno do estado CAF ($J_1 > 0$) representado esquematicamente na figura 3.6, onde os coeficientes C_n^{CAF} são definidos por

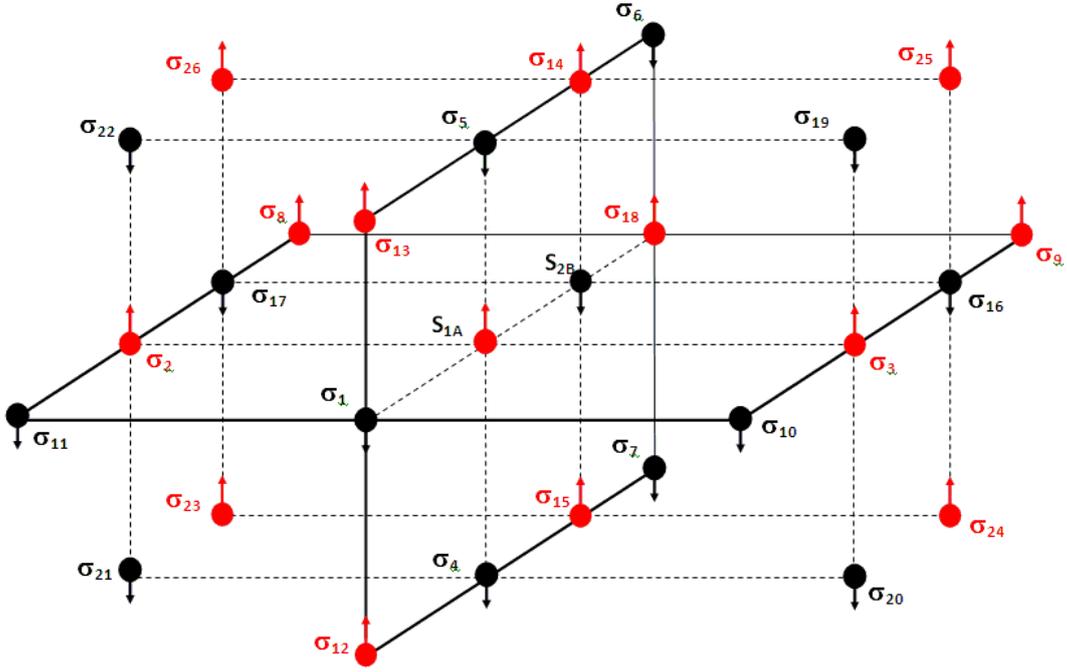


Figura 3.6: Estado fundamental colinear antiferromagnético numa rede cúbica simples no aglomerado com $N=2$ spins. Os dois spins do aglomerado ($i = 1, 2$) são denotados por $\vec{S}_{iA,B}$ e os seus vizinhos por σ_i (variável de Ising). Os círculos pretos e vermelhos indicam as orientações opostas dos spins em linhas paralelas adjacentes e de mesma orientação sobre uma mesma linha (paralela a folha por construção).

$$C_n^{CAF} = -C_{nx}^{CAF} - C_{ny}^{CAF}, \quad n = 1, 2 \quad (3.17)$$

$$C_{1x}^{CAF} = K \left(\sum_{i=1}^2 \sigma_i^A + \sigma_3^B \right) + \lambda K \sum_{i=4}^5 \sigma_i^B \quad (3.18)$$

$$C_{1y}^{CAF} = \alpha K \sum_{i=10,11,17,18} \sigma_i^B \quad (3.19)$$

$$C_{2x}^{CAF} = K \left(\sum_{i=17}^{18} \sigma_i^B + \sigma_{16}^A \right) + \lambda K \sum_{i=14}^{15} \sigma_i^A \quad (3.20)$$

$$C_{2y}^{CAF} = \alpha K \sum_{i=1,2,8,9} \sigma_i^A \quad (3.21)$$

Resultando na expressão do parâmetro de ordem

$$\begin{aligned} m_A = & (ae^{KD_{1x} + \alpha KD_{2y}} + be^{-KD_{1x} - \alpha KD_{2y}})^2 (ae^{K\lambda D_{2x}} + be^{-K\lambda D_{2x}})^2 \\ & (ae^{KD_{2x}} + be^{-KD_{2x}}) (ae^{\alpha KD_{2y}} + be^{-\alpha KD_{2y}})^2 \\ & (be^{KD_{1x}} + ae^{-KD_{1x}}) (be^{\lambda KD_{1x}} + ae^{-\lambda KD_{1x}})^2 \\ & (be^{\alpha KD_{1y}} + ae^{-\alpha KD_{1y}})^2 (be^{KD_{2x} + \alpha KD_{1y}} + ae^{-KD_{2x} - \alpha KD_{1y}})^2 \\ & f_{CAF}(\vec{x}, \vec{y})_{\vec{x}, \vec{y}=0}, \end{aligned} \quad (3.22)$$

onde

$$f_{CAF}(\vec{x}, \vec{y}) = f_{AF}(\vec{x}, \vec{y}), \quad (3.23)$$

e os expoentes de cada termo binomial correspondem a: $n_1 = 2$, $n_2 = 2$, $n_3 = 1$, $n_4 = 2$, $n_5 = 1$, $n_6 = 2$, $n_7 = 2$, $n_8 = 2$. Esses termos são selecionados e a expansão é feita computacionalmente para a determinação da equação de estado m_{CAF} .

c) ESTADO FERROMAGNÉTICO

O estado F é caracterizado por todos os spins orientados paralelamente e substituindo J_1 por $-J_1$ no Hamiltoniano do modelo $J_1 - J_2$ obtemos

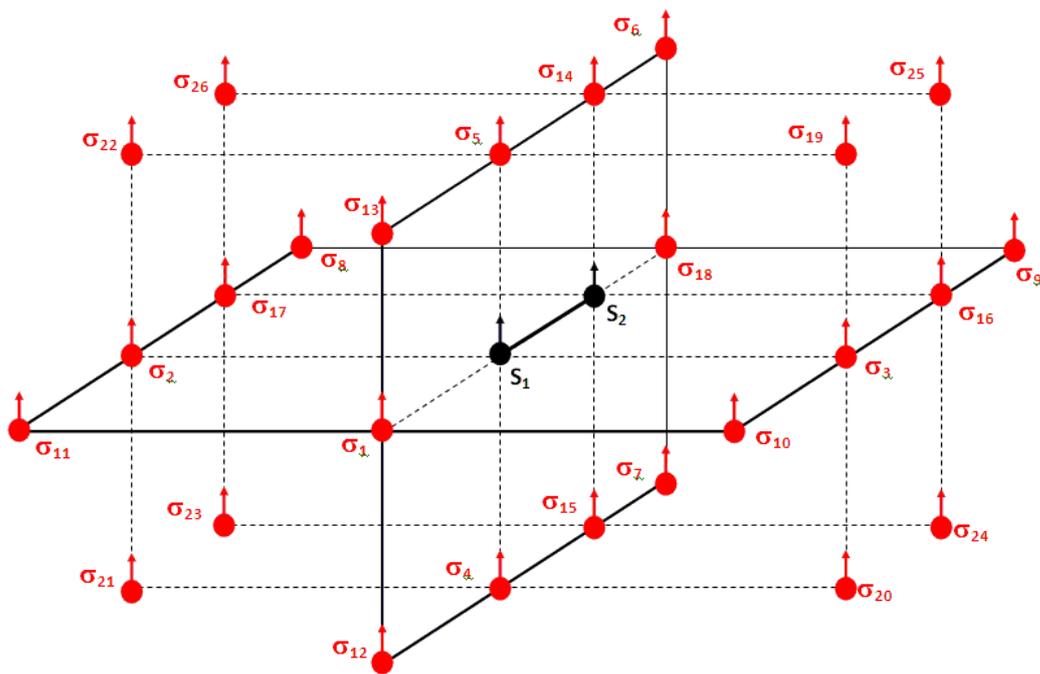


Figura 3.7: Estado fundamental ferromagnético numa rede cúbica simples no aglomerado com $N=2$ spins. Os dois spins do aglomerado ($i = 1, 2$) são denotados por $\vec{S}_{iA,B}$ e os seus vizinhos por σ_i (variável de Ising). Em destaque, círculos pretos, estão os spins do aglomerado.

$$-\beta\mathcal{H}_2^F = K[(1-\Delta)(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + \sum_{i=1}^2 C_i^F S_i^z, \quad (3.24)$$

sendo

$$C_n^F = C_{nx}^F - C_{ny}^F, \quad n = 1, 2 \quad (3.25)$$

$$C_{1x}^F = K \sum_{i=1}^3 \sigma_i^A + \lambda K \sum_{i=4}^5 \sigma_i^A \quad (3.26)$$

$$C_{1y}^F = \alpha K \sum_{i=10,11,16,17} \sigma_i^A \quad (3.27)$$

$$C_{2x}^F = K \sum_{i=16}^{18} \sigma_i^A + \lambda K \sum_{i=14}^{15} \sigma_i^A \quad (3.28)$$

$$C_{2y}^F = \alpha K \sum_{i=2,3,8,9} \sigma_i^A. \quad (3.29)$$

Seguindo o mesmo procedimento anterior usando EFT-2 com as adequadas condições de contorno na fase F, obtemos a magnetização dada por

$$\begin{aligned} m = & (ae^{\lambda KD_{2x}} + be^{-\lambda KD_{2x}})^2 (ae^{\alpha KD_{1y}} + be^{-\alpha KD_{1y}})^2 \\ & (ae^{\alpha KD_{1y} + KD_{2x}} + be^{-\alpha KD_{1y} - KD_{2x}})^2 (ae^{KD_{2x}} + be^{-KD_{2x}}) \\ & (ae^{KD_{1x}} + be^{-KD_{1x}}) (ae^{KD_{1x} + \alpha KD_{2y}} + be^{-KD_{1x} - \alpha KD_{2y}})^2 \\ & (ae^{\alpha KD_{2y}} + be^{-\alpha KD_{2y}})^2 (ae^{\alpha KD_{1x}} + be^{-\alpha KD_{1x}})^2 f_F(\vec{x}, \vec{y})_{\vec{x}, \vec{y}=0} \end{aligned} \quad (3.30)$$

onde neste caso

$$a = b = (1 + m) / 2 \quad (3.31)$$

e

$$f_F(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{-\sinh(x_1 + y_1 + x_2 + y_2) + \exp(-2K) \sinh \Gamma \frac{[(x_1 + y_1) - (x_2 + y_2)]}{\Gamma}}{\cosh(x_1 + y_1 + x_2 + y_2) + \exp(-2K) \cosh \Gamma} \quad (3.32)$$

d) ESTADO COLINEAR FERROMAGNÉTICO (CF)

Denominamos de estado colinear ferromagnético ao ordenamento de spins paralelos num mesmo plano e de orientação oposta em planos paralelos adjacentes, como esque-

maticamente representado na figura 3.8. Para o estado CF escrevemos o Hamiltoniano e os operadores de spins relativos à vizinhança respectivamente, da seguinte forma:

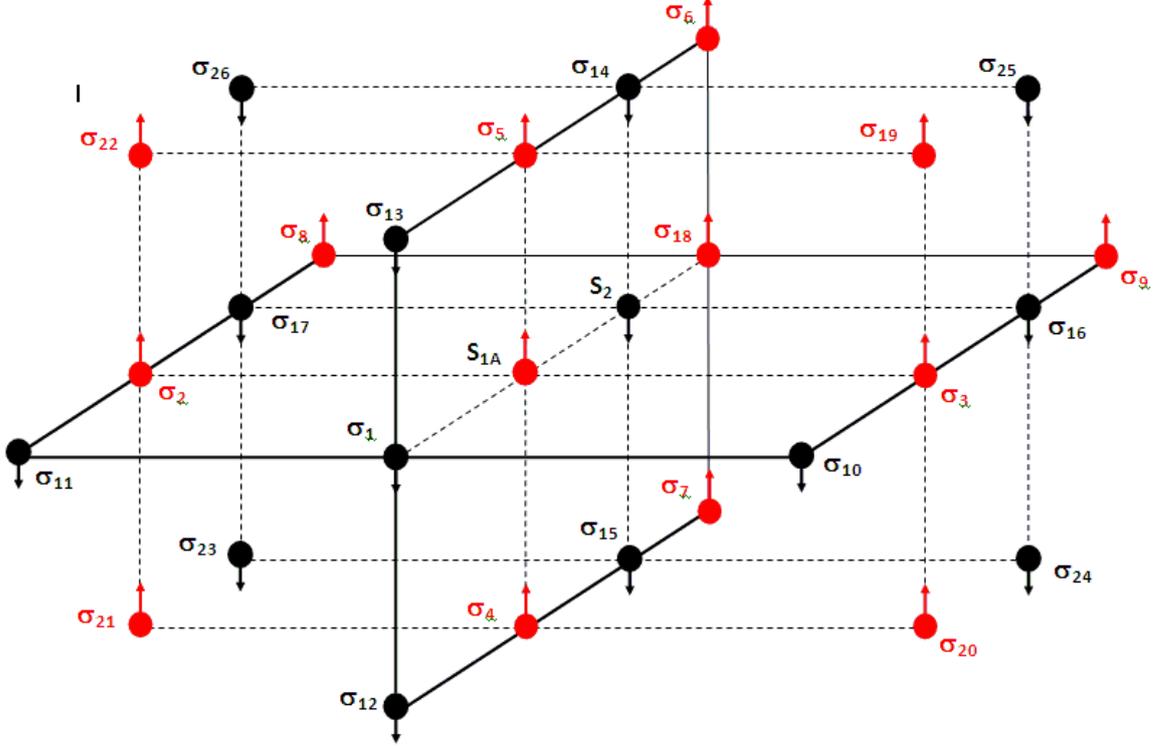


Figura 3.8: Estado fundamental colinear ferromagnético numa rede cúbica simples no aglomerado com $N=2$ spins. Os dois spins do aglomerado ($i = 1, 2$) são denotados por $\vec{S}_{iA,B}$ e os seus vizinhos por σ_i (variável de Ising). Os círculos pretos e vermelhos indicam as orientações opostas dos spins em planos paralelos adjacentes e de mesma orientação sobre um mesmo plano (paralelo à folha por construção).

$$-\beta\mathcal{H}_2^{CF} = K [(1 - \Delta) (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + \sum_{i=1}^2 C_i^{CF} S_i^z \quad (3.33)$$

$$C_n^{CF} = C_{nx}^{CF} - C_{ny}^{CF}, \quad n = 1, 2 \quad (3.34)$$

$$C_{1x}^{CF} = K (\sigma_1^B + \sum_{i=2}^3 \sigma_i^A + \lambda \sum_{i=4}^5 \sigma_i^A) \quad (3.35)$$

$$C_{1y}^{CF} = \alpha K \sum_{i=10,11,16,17} \sigma_i^B \quad (3.36)$$

$$C_{2x}^{CF} = K(\sigma_{18}^A + \sum_{i=16}^{17} \sigma_i^B + \lambda \sum_{i=14}^{15} \sigma_i^B) \quad (3.37)$$

$$C_{2y}^{CF} = \alpha K \sum_{i=2,3,8,9} \sigma_i^A. \quad (3.38)$$

E a expansão da magnetização de subrede da fase planar ferromagnética dada por:

$$\begin{aligned} m_A &= (ae^{KD_{1x}+\alpha KD_{2y}} + be^{-(KD_{1x}+\alpha KD_{2y})})^2 (ae^{KD_{2x}} + be^{-KD_{2x}}) \\ &\quad (ae^{\lambda KD_{1x}} + be^{-\lambda KD_{1x}})^2 (ae^{\alpha KD_{2y}} + be^{-\alpha KD_{2y}})^2 \\ &\quad (be^{KD_{1x}} + be^{-KD_{1x}})(be^{\alpha KD_{1y}} + ae^{-\alpha KD_{1y}})^2 \\ &\quad (be^{\lambda KD_{2x}} + ae^{-\lambda KD_{2x}})^2 (ae^{KD_{2x}+\alpha KD_{1y}} + be^{-(KD_{2x}+\alpha KD_{1y})})^2 \\ &\quad f_{CF}(\vec{x}, \vec{y})_{\vec{x}, \vec{y}=0}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

com

$$f_{CF}(\vec{x}, \vec{y}) = f_F(\vec{x}, \vec{y}) \quad (3.40)$$

e os expoentes de cada termo binomial correspondem a: $n_1 = 2$, $n_2 = 1$, $n_3 = 2$, $n_4 = 2$, $n_5 = 1$, $n_6 = 2$, $n_7 = 2$, $n_8 = 2$. Esses termos são selecionados e a expansão é feita computacionalmente para a determinação da equação de estado m_{CF} .

3.3.2 Teoria de Campo Efetivo em Aglomerado com quatro Spins (EFT-4)

Com o objetivo de verificarmos a influência do tamanho do aglomerado nos diagramas de fases, consideremos agora um aglomerado com $N=4$ sítios de uma rede cúbica simples, todos situados no mesmo plano e em subredes diferentes dois a dois, como mostra a figura 3.9. Os spins centrais do aglomerado serão denotados por $\{\vec{S}_1, \vec{S}_2, \vec{S}_3, \vec{S}_4\}$ e os seus correspondentes vizinhos não pertencentes ao aglomerado por variáveis de Ising

$\vec{S}_i = \sigma_i \hat{z}$ de tal modo a considerar a condição de contorno para cada estado ordenado que estudaremos a seguir.

a) ESTADO ANTIFERROMAGNÉTICO (AF)

A figura 3.9 representa esquematicamente o estado AF, numa rede cúbica simples em aglomerado com quatro spins $\vec{S}_{1A}, \vec{S}_{2B}, \vec{S}_{3A}$ e \vec{S}_{4B} . O Hamiltoniano reduzido para este aglomerado, levando em consideração as condições de contorno das subredes, é dado por:

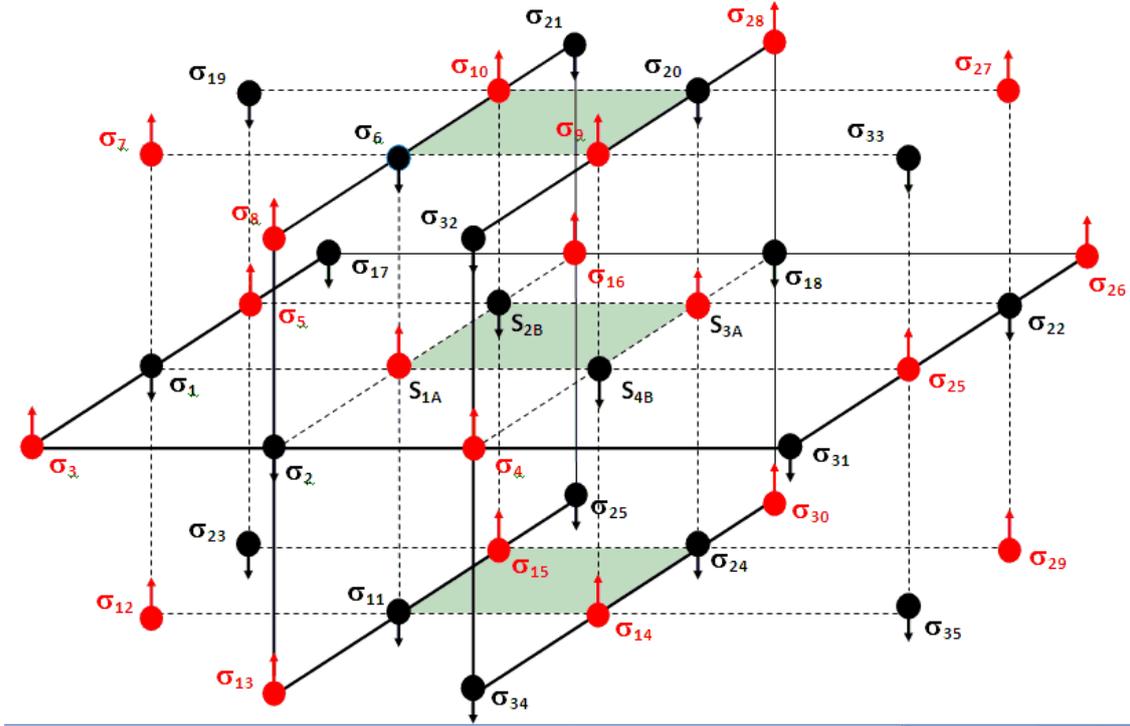


Figura 3.9: Estado fundamental antiferromagnético numa rede cúbica simples no aglomerado com $N=4$ spins. Os sítios do aglomerado são denotados por $\{\vec{S}_1, \vec{S}_2, \vec{S}_3, \vec{S}_4\}$ e os seus vizinhos por variáveis Ising $\vec{S}_i = \sigma_i \hat{z}$. As regiões destacadas na figura foram construídas para melhor visualização.

$$-\beta\mathcal{H}_4^{AF} = H_{12}^{(1)} + H_{23}^{(1)} + H_{34}^{(1)} + H_{41}^{(1)} + H_{13}^{(2)} + H_{24}^{(2)} + \sum_{i=1}^4 C_i S_i^z \quad (3.41)$$

onde

$$H_{ij}^{(1)} = -K [(1 - \Delta) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z], \quad (3.42)$$

$$H_{ij}^{(2)} = -\alpha K [(1 - \Delta) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z] \quad (3.43)$$

são os Hamiltonianos das interações entres os sítios do glomerado em seu primeiros ($H_{ij}^{(1)}$) e segundos ($H_{ij}^{(2)}$) vizinhos, e os coeficientes do último termo são

$$C_n^{AF} = -C_{nx}^{AF} - C_{ny}^{AF}, \quad n = 1, 2, 3, 4 \quad (3.44)$$

$$C_{1x}^{AF} = K (\sigma_1^B + \sigma_2^B) + \lambda K \sum_{i=6,11} \sigma_i^B \quad (3.45)$$

$$C_{1y}^{AF} = \alpha K \sum_{i=3,4,5} \sigma_i^A. \quad (3.46)$$

$$C_{2x}^{AF} = K (\sigma_5^A + \sigma_{16}^A) + \lambda K \sum_{i=10,15} \sigma_i^A \quad (3.47)$$

$$C_{2y}^{AF} = \alpha K \sum_{i=1,17,18} \sigma_i^B. \quad (3.48)$$

$$C_{3x}^{AF} = K (\sigma_{18}^B + \sigma_{22}^B) + \lambda K \sum_{i=20,24} \sigma_i^B \quad (3.49)$$

$$C_{3y}^{AF} = \alpha K \sum_{i=16,25,26} \sigma_i^A. \quad (3.50)$$

$$C_{4x}^{AF} = K (\sigma_4^A + \sigma_{25}^A) + \lambda K \sum_{i=9,14} \sigma_i^A \quad (3.51)$$

$$C_{4y}^{AF} = \alpha K \sum_{i=2,22,31} \sigma_i^B. \quad (3.52)$$

Com o uso da definição (Eq. 3.7) a magnetização da subrede A será dada por

$$m_A = \left\langle \prod_{i=1,4} e^{(C_{ix} D_{ix} + C_{iy} D_{iy})} \right\rangle f_{AF}(\vec{x}, \vec{y})|_{\vec{x}, \vec{y}=0}.$$

Expandindo os produtórios, aplicando a cinemática dos spins ($S = 1/2$) para os sítios

($i = 1, 2, 4, 5, 16, 18, 22, 25$) e agrupando os termos das sub-redes A e B da mesma forma que realizada em aglomerado com dois spins encontramos

$$\begin{aligned}
m_A = & \left\langle \left(e^{\alpha KD_{2x} + \alpha KD_{1y}} \hat{a} + e^{-\alpha KD_{2x} - \alpha KD_{1y}} \hat{b} \right) \left(e^{\alpha KD_{1y} + KD_{4x}} \hat{a} + e^{-\alpha KD_{1y} - KD_{4x}} \hat{b} \right) \right. \\
& \left(e^{\alpha KD_{1y}} \hat{a} + e^{-\alpha KD_{1y}} \hat{b} \right) \left(e^{KD_{2x} + \alpha KD_{3y}} \hat{a} + e^{-(KD_{2x} + \alpha KD_{3y})} \hat{b} \right) \\
& \left(e^{\lambda KD_{2x}} \hat{a} + e^{-\lambda KD_{2x}} \hat{b} \right)^2 \left(e^{\alpha KD_{3y}} \hat{a} + e^{-\alpha KD_{3y}} \hat{b} \right) \\
& \left(e^{\alpha KD_{3y} + KD_{4x}} \hat{a} + e^{-\alpha KD_{1y} - KD_{4x}} \hat{b} \right) \left(e^{\lambda KD_{4x}} \hat{a} + e^{-\lambda KD_{4x}} \hat{b} \right)^2 \\
& \left(e^{KD_{1x} + \alpha KD_{4y}} \hat{b} + e^{-(KD_{1x} + \alpha KD_{4y})} \hat{a} \right) \left(e^{KD_{1x} + \alpha KD_{2y}} \hat{b} + e^{-KD_{1x} - \alpha KD_{2y}} \hat{a} \right) \\
& \left(e^{\lambda KD_{1x}} \hat{b} + e^{-(\lambda KD_{1x})} \hat{a} \right)^2 \left(e^{KD_{3x} + \alpha KD_{2y}} \hat{b} + e^{-(KD_{3x} + \alpha KD_{2y})} \hat{a} \right) \\
& \left(e^{\alpha KD_{2y}} \hat{b} + e^{-\alpha KD_{2y}} \hat{a} \right) \left(e^{KD_{3x} + \alpha KD_{4y}} \hat{b} + e^{-(KD_{3x} + \alpha KD_{4y})} \hat{a} \right) \\
& \left. \left(e^{\lambda KD_{3x}} \hat{b} + e^{-\lambda KD_{3x}} \hat{a} \right)^2 \left(e^{\alpha KD_{4y}} \hat{b} + e^{-\alpha KD_{4y}} \hat{a} \right) \right\rangle f_{AF}(\vec{x}, \vec{y})_{\vec{x}, \vec{y}=0} \quad (3.53)
\end{aligned}$$

onde

$$\hat{a} = (1 + \hat{\sigma}) / 2 \quad (3.54)$$

$$\hat{b} = (1 - \hat{\sigma}) / 2, \quad (3.55)$$

é o operador de spins relativo a cada subrede e \vec{x}, \vec{y} são dados por $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4)$ e $\vec{y} = (y_1, y_2, y_3, y_4)$.

Aplicando a aproximação linear e usando a condição de contorno $m_A = -m_B = m$, obtemos:

$$\begin{aligned}
m = & \left[\left(e^{\alpha K D_{2x} + \alpha K D_{1y}} a + e^{-\alpha K D_{2x} - \alpha K D_{1y}} b \right) \left(e^{\alpha K D_{1y} + K D_{4x}} a + e^{-\alpha K D_{1y} - K D_{4x}} b \right) \right. \\
& \left(e^{\alpha K D_{1y}} a + e^{-\alpha K D_{1y}} b \right) \left(e^{K D_{2x} + \alpha K D_{3y}} a + e^{-K D_{2x} - \alpha K D_{3y}} b \right) \\
& \left(e^{\lambda K D_{2x}} a + e^{-\lambda K D_{2x}} b \right)^2 \left(e^{\alpha K D_{3y}} a + e^{-\alpha K D_{3y}} b \right) \\
& \left. \left(e^{\alpha K D_{3y} + K D_{4x}} a + e^{-\alpha K D_{1y} - K D_{4x}} b \right) \left(e^{\lambda K D_{4x}} a + e^{-\lambda K D_{4x}} b \right)^2 \right] \\
& \left[\left(e^{K D_{1x} + \alpha K D_{4y}} b + e^{-(K D_{1x} + \alpha K D_{4y})} a \right) \left(e^{K D_{1x} + \alpha K D_{2y}} b + e^{-(K D_{1x} + \alpha K D_{2y})} a \right) \right. \\
& \left(e^{\lambda K D_{1x}} b + e^{-\lambda K D_{1x}} a \right)^2 \left(e^{K D_{3x} + \alpha K D_{2y}} b + e^{-(K D_{3x} + \alpha K D_{2y})} a \right) \\
& \left(e^{\alpha K D_{2y}} b + e^{-\alpha K D_{2y}} a \right) \left(e^{K D_{3x} + \alpha K D_{4y}} b + e^{-(K D_{3x} + \alpha K D_{4y})} a \right) \\
& \left. \left(e^{\lambda K D_{3x}} b + e^{-\lambda K D_{3x}} a \right)^2 \left(e^{\alpha K D_{4y}} b + e^{-\alpha K D_{4y}} a \right) \right] f_{AF}(\vec{x}, \vec{y})_{\vec{x}, \vec{y}=0}. \tag{3.56}
\end{aligned}$$

No aglomerado com $N = 4$ spins não temos uma expressão fechada para a função de partição e para a função f_{AF} , decorrente da diagonalização da matriz (de ordem 16) relativa ao Hamiltoniano do sistema como encontrada no caso EFT-2. Encaminhamos o leitor ao apêndice onde fazemos a diagonalização da matriz numericamente e determinamos o parâmetro de ordem.

b) ESTADO COLINEAR ANTIFERROMAGNÉTICO (CAF)

Na figura 3.10 temos o esquema para o estado fundamental CAF numa rede cúbica simples. O Hamiltoniano reduzido é dado por

$$-\beta \mathcal{H}_4^{CAF} = H_{12}^{(1)} + H_{23}^{(1)} + H_{34}^{(1)} + H_{41}^{(1)} + H_{13}^{(2)} + H_{24}^{(2)} + \sum_{i=1}^4 C_i S_i^z \tag{3.57}$$

sendo

$$\begin{aligned}
H_{ij}^{(1)} &= -K \left[(1 - \Delta) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z \right], \\
H_{ij}^{(2)} &= -\alpha K \left[(1 - \Delta) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z \right]
\end{aligned}$$

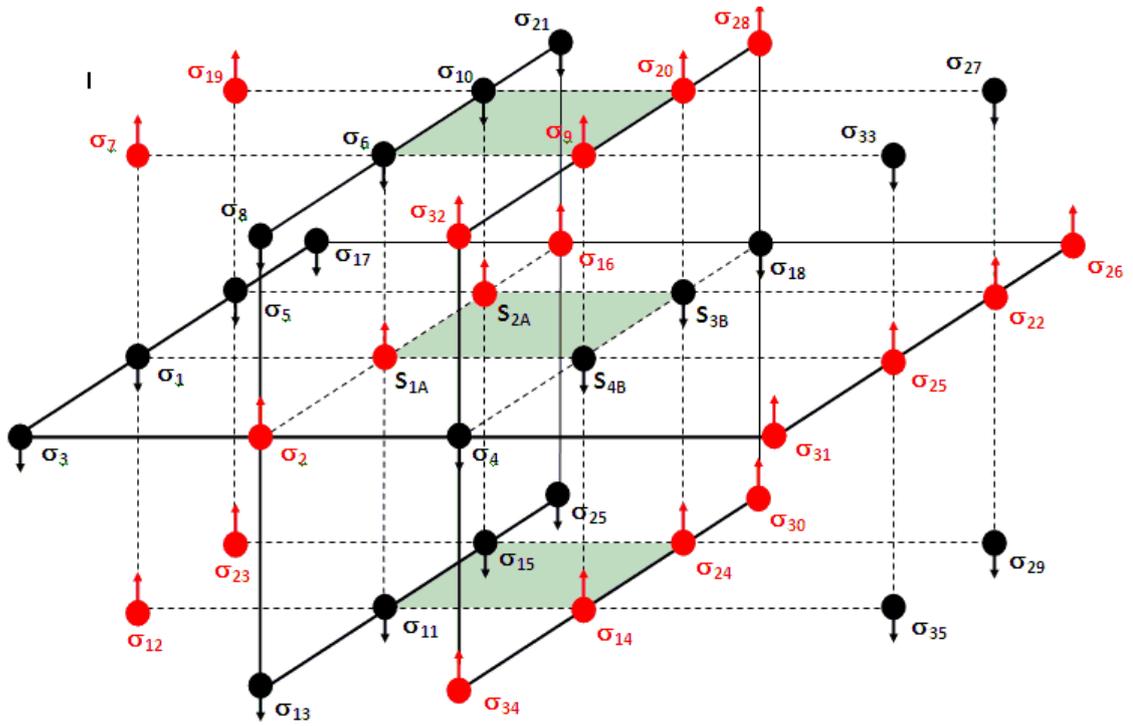


Figura 3.10: Estado fundamental colinear antiferromagnético numa rede cúbica simples no aglomerado com $N=4$ spins. Os sítios do aglomerado são denotados por $\{\vec{S}_1, \vec{S}_2, \vec{S}_3, \vec{S}_4\}$ e os seus vizinhos por variáveis Ising $\vec{S}_i = \sigma_i \hat{z}$. As regiões destacadas na figura foram construídas para melhor visualização.

e os coeficientes

$$C_n^{CAF} = -C_{nx}^{CAF} - C_{ny}^{CAF}, \quad n = 1, 2, 3, 4 \quad , \quad (3.58)$$

$$C_{1x}^{CAF} = K(\sigma_1^B + \sigma_2^A + \lambda \sum_{i=6,11} \sigma_i^B) \quad (3.59)$$

$$C_{1y}^{CAF} = \alpha K \sum_{i=3}^5 \sigma_i^B. \quad (3.60)$$

$$C_{2x}^{CAF} = K(\sigma_5^B + \sigma_{10}^A + \lambda \sum_{i=10,15} \sigma_i^B) \quad (3.61)$$

$$C_{2y}^{CAF} = \alpha K \sum_{i=1,17,18} \sigma_i^B. \quad (3.62)$$

$$C_{3x}^{CAF} = K(\sigma_{18}^B + \sigma_{22}^A + \lambda \sum_{i=20,24} \sigma_i^A) \quad (3.63)$$

$$C_{3y}^{CAF} = \alpha K \sum_{i=16,25,26} \sigma_i^A. \quad (3.64)$$

$$C_{4x}^{CAF} = K(\sigma_4^B + \sigma_{25}^A + \lambda K \sum_{i=9,14} \sigma_i^A) \quad (3.65)$$

$$C_{4y}^{CAF} = \alpha K \sum_{i=2,22,31} \sigma_i^A. \quad (3.66)$$

Seguindo o mesmo procedimento para o cálculo do parâmetro de ordem do estado AF, usando agora as condições de contorno do estado CAF esquematizado na figura 3.10, obtemos em EFT-4 a magnetização de subrede por

$$\begin{aligned}
m_A = & \langle \left(e^{KD_{1x} + \alpha KD_{4y}} \widehat{a} + e^{-(KD_{1x} + \alpha KD_{4y})} \widehat{b} \right) \left(e^{\lambda KD_{3x}} \widehat{a} + e^{-\lambda KD_{3x}} \widehat{b} \right)^2 \\
& \left(e^{\lambda KD_{4x}} \widehat{a} + e^{-\lambda KD_{4x}} \widehat{b} \right)^2 \left(e^{KD_{2x} + \alpha KD_{3y}} \widehat{a} + e^{-(KD_{2x} + \alpha KD_{3y})} \widehat{b} \right) \\
& \left(e^{KD_{3x} + \alpha KD_{4y}} \widehat{a} + e^{-(KD_{3x} + \alpha KD_{4y})} \widehat{b} \right) \left(e^{\alpha KD_{3y}} \widehat{a} + e^{-\alpha KD_{3y}} \widehat{b} \right) \\
& \left(e^{\alpha KD_{3y} + KD_{4x}} \widehat{a} + e^{-(\alpha KD_{3y} + KD_{4x})} \widehat{b} \right) \left(e^{\alpha KD_{4y}} \widehat{a} + e^{-\alpha KD_{4y}} \widehat{b} \right) \\
& \left(e^{KD_{1x} + \alpha KD_{2y}} \widehat{b} + e^{-(KD_{1x} + \alpha KD_{2y})} \widehat{a} \right) \left(e^{\lambda KD_{1x}} \widehat{b} + e^{-\lambda KD_{1x}} \widehat{a} \right)^2 \\
& \left(e^{\lambda KD_{2x}} \widehat{b} + e^{-\lambda KD_{2x}} \widehat{a} \right)^2 \left(e^{KD_{2x} + \alpha KD_{1y}} \widehat{b} + e^{-(KD_{2x} + \alpha KD_{1y})} \widehat{a} \right) \\
& \left(e^{\alpha KD_{1y}} \widehat{b} + e^{-\alpha KD_{1y}} \widehat{a} \right) \left(e^{\alpha KD_{1y} + KD_{4x}} \widehat{b} + e^{-(\alpha KD_{1y} + KD_{4x})} \widehat{a} \right) \\
& \left(e^{\alpha KD_{2y}} \widehat{b} + e^{-\alpha KD_{2y}} \widehat{a} \right) \left(e^{\alpha KD_{2y} + KD_{3x}} \widehat{b} + e^{-(\alpha KD_{2y} + KD_{3x})} \widehat{a} \right) \\
& f_{CAF}(\vec{x}, \vec{y})_{\vec{x}, \vec{y}=0} \rangle
\end{aligned} \tag{3.67}$$

Aplicando a aproximação linear e usando a condição de contorno $m_A = -m_B = m$, é obtido que

$$\begin{aligned}
m = & [\left(e^{KD_{1x} + \alpha KD_{4y}} a + e^{-(KD_{1x} + \alpha KD_{4y})} b \right) \left(e^{\lambda KD_{3x}} a + e^{-\lambda KD_{3x}} b \right)^2 \\
& \left(e^{\lambda KD_{4x}} a + e^{-\lambda KD_{4x}} b \right)^2 \left(e^{KD_{2x} + \alpha KD_{3y}} a + e^{-(KD_{2x} + \alpha KD_{3y})} b \right) \\
& \left(e^{KD_{3x} + \alpha KD_{4y}} a + e^{-(KD_{3x} + \alpha KD_{4y})} b \right) \left(e^{\alpha KD_{3y}} a + e^{-\alpha KD_{3y}} b \right) \\
& \left(e^{\alpha KD_{3y} + KD_{4x}} a + e^{-(\alpha KD_{3y} + KD_{4x})} b \right) \left(e^{\alpha KD_{4y}} a + e^{-\alpha KD_{4y}} b \right)] \\
& [\left(e^{KD_{1x} + \alpha KD_{2y}} b + e^{-(KD_{1x} + \alpha KD_{2y})} a \right) \left(e^{\lambda KD_{1x}} b + e^{-\lambda KD_{1x}} a \right)^2 \\
& \left(e^{\lambda KD_{2x}} b + e^{-\lambda KD_{2x}} a \right)^2 \left(e^{KD_{2x} + \alpha KD_{1y}} b + e^{-(KD_{2x} + \alpha KD_{1y})} a \right) \\
& \left(e^{\alpha KD_{1y}} b + e^{-\alpha KD_{1y}} a \right) \left(e^{\alpha KD_{1y} + KD_{4x}} b + e^{-(\alpha KD_{1y} + KD_{4x})} a \right) \\
& \left(e^{\alpha KD_{2y}} b + e^{-\alpha KD_{2y}} a \right) \left(e^{\alpha KD_{2y} + KD_{3x}} b + e^{-(\alpha KD_{2y} + KD_{3x})} a \right)] \\
& f_{CAF}(\vec{x}, \vec{y})_{\vec{x}, \vec{y}=0} \rangle
\end{aligned} \tag{3.68}$$

A partir deste momento procedemos como no caso AF.

c) ESTADO COLINEAR FERROMAGNÉTICO (CF)

Na figura 3.11 temos o esquema para a fase colinear ferromagnética (CF) numa rede cúbica simples com interação de primeiros vizinhos ferromagnética. Este estado é originado a partir de um sistema com ordem ferromagnética e inversão dos spins em planos alternados. O Hamiltoniano do sistema é dado por:

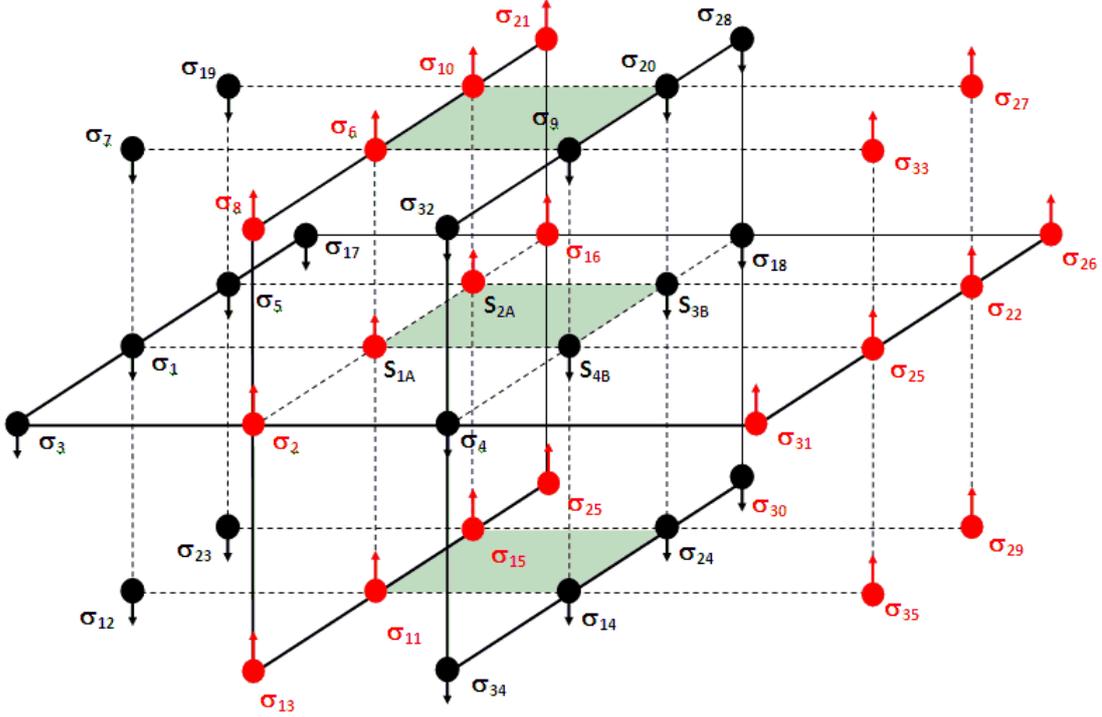


Figura 3.11: Estado fundamental colinear ferromagnético numa rede cúbica simples no aglomerado com $N=4$ spins. Os spins do aglomerado são denotados por $\{\vec{S}_1, \vec{S}_2, \vec{S}_3, \vec{S}_4\}$ e os seus vizinhos por variáveis de Ising $\vec{S}_i = \sigma_i \hat{z}$. As regiões destacadas na figura foram construídas para melhor visualização.

$$-\beta\mathcal{H}_4^{CF} = H_{12}^{(1)} + H_{23}^{(1)} + H_{34}^{(1)} + H_{41}^{(1)} + H_{13}^{(2)} + H_{24}^{(2)} + \sum_{i=1}^4 C_i S_i^z \quad (3.69)$$

sendo

$$\begin{aligned} H_{ij}^{(1)} &= K [(1 - \Delta) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z], \\ H_{ij}^{(2)} &= -\alpha K [(1 - \Delta) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z] \end{aligned}$$

e os coeficientes

$$C_n^{CF} = -C_{nx}^{CF} - C_{ny}^{CF}, \quad n = 1, 2, 3, 4 \quad ,. \quad (3.70)$$

$$C_{1x}^{CF} = K (\sigma_1^B + \sigma_2^A) + \lambda K \sum_{i=6,11} \sigma_i^A \quad (3.71)$$

$$C_{1y}^{CF} = \alpha K \sum_{i=3}^5 \sigma_i^B. \quad (3.72)$$

$$C_{2x}^{CF} = K (\sigma_5^B + \sigma_{16}^A) + \lambda K \sum_{i=10,15} \sigma_i^A \quad (3.73)$$

$$C_{2y}^{CF} = \alpha K \sum_{i=4,17,18} \sigma_i^B. \quad (3.74)$$

$$C_{3x}^{CF} = K (\sigma_{18}^B + \sigma_{22}^A) + \lambda K \sum_{i=20,24} \sigma_i^B \quad (3.75)$$

$$C_{3y}^{CF} = \alpha K \sum_{i=16,25,26} \sigma_i^A. \quad (3.76)$$

$$C_{4x}^{CF} = K (\sigma_4^B + \sigma_{25}^A) + \lambda K \sum_{i=9,14} \sigma_i^B \quad (3.77)$$

$$C_{4y}^{CF} = \alpha K \sum_{i=2,22,31} \sigma_i^A \quad (3.78)$$

A partir da definição da magnetização da subrede A , ou seja, $m_A = \langle S_1^z \rangle$ e efetuando o seguintes processos: aplicando a cinemática dos spins para os sítios ($i = 1, 2, 4, 5, 16, 18, 22, 25$) e agrupando em sub-redes A e B , obtemos o seguinte resultado:

$$\begin{aligned}
m_A = & \left(e^{\lambda KD_{1x}} \widehat{a} + e^{-\lambda KD_{1x}} \widehat{b} \right)^2 \left(e^{KD_{3x} + \alpha KD_{4y}} \widehat{a} + e^{-(KD_{3x} + \alpha KD_{4y})} \widehat{b} \right) \\
& \left(e^{KD_{1x} + \alpha KD_{4y}} \widehat{a}_i^A + e^{(KD_{1x} + \alpha KD_{4y})} \widehat{b} \right) \left(e^{\alpha KD_{3y}} \widehat{a}_i^A + e^{-\alpha KD_{3y}} \widehat{b} \right) \\
& \left(e^{KD_{2x} + \alpha KD_{3y}} \widehat{a}_i^A + e^{-(KD_{2x} + \alpha KD_{3y})} \widehat{b} \right) \left(e^{\alpha KD_{4y}} \widehat{a} + e^{-\alpha KD_{4y}} \widehat{b} \right) \\
& \left(e^{KD_{4x} + \alpha KD_{3y}} \widehat{a}_3^A + e^{-(KD_{4x} + \alpha KD_{3y})} \widehat{b} \right) \left(e^{\lambda KD_{2x}} \widehat{a} + e^{-\lambda KD_{2x}} \widehat{b} \right)^2 \\
& \left(e^{\lambda KD_{3x}} \widehat{b} + e^{-\lambda KD_{3x}} \widehat{a} \right)^2 \left(e^{KD_{3x} + \alpha KD_{2y}} \widehat{b} + e^{-(KD_{3x} + \alpha KD_{2y})} \widehat{a} \right) \\
& \left(e^{KD_{1x} + \alpha KD_{2y}} \widehat{b} + e^{-(KD_{1x} + \alpha KD_{2y})} \widehat{a} \right) \left(e^{\alpha KD_{1y}} \widehat{b} + e^{-\alpha KD_{1y}} \widehat{a} \right) \\
& \left(e^{KD_{2x} + \alpha KD_{1y}} \widehat{b} + e^{-(KD_{2x} + \alpha KD_{1y})} \widehat{a} \right) \left(e^{\alpha KD_{2y}} \widehat{b} + e^{-\alpha KD_{2y}} \widehat{a} \right) \\
& \left(e^{KD_{4x} + \alpha KD_{1y}} \widehat{b} + e^{-(KD_{4x} + \alpha KD_{1y})} \widehat{a} \right) \left(e^{\lambda KD_{4x}} \widehat{b} + e^{-\lambda KD_{4x}} \widehat{a} \right)^2 \\
& f_{CF} (\vec{x}, \vec{y})_{\vec{x}, \vec{y}=0}
\end{aligned} \tag{3.79}$$

Aplicando a aproximação linear e usando a condição de contorno $m_A = -m_B = m$, é obtido que

$$\begin{aligned}
m = & \left[\left(e^{\lambda KD_{1x}} a + e^{-\lambda KD_{1x}} b \right)^2 \left(e^{KD_{3x} + \alpha KD_{4y}} a + e^{-(KD_{3x} + \alpha KD_{4y})} b \right) \right. \\
& \left(e^{KD_{1x} + \alpha KD_{4y}} a + e^{(KD_{1x} + \alpha KD_{4y})} b \right) \left(e^{\alpha KD_{3y}} a + e^{-\alpha KD_{3y}} b \right) \\
& \left(e^{KD_{2x} + \alpha KD_{3y}} a + e^{-(KD_{2x} + \alpha KD_{3y})} b \right) \left(e^{\alpha KD_{4y}} a + e^{-\alpha KD_{4y}} b \right) \\
& \left. \left(e^{KD_{4x} + \alpha KD_{3y}} a + e^{-(KD_{4x} + \alpha KD_{3y})} b \right) \left(e^{\lambda KD_{2x}} a + e^{-\lambda KD_{2x}} b \right)^2 \right] \\
& \left[\left(e^{\lambda KD_{3x}} b + e^{-\lambda KD_{3x}} a \right)^2 \left(e^{KD_{3x} + \alpha KD_{2y}} b + e^{-(KD_{3x} + \alpha KD_{2y})} a \right) \right. \\
& \left(e^{KD_{1x} + \alpha KD_{2y}} b + e^{-(KD_{1x} + \alpha KD_{2y})} a \right) \left(e^{\alpha KD_{1y}} b + e^{-\alpha KD_{1y}} a \right) \\
& \left(e^{KD_{2x} + \alpha KD_{1y}} b + e^{-(KD_{2x} + \alpha KD_{1y})} a \right) \left(e^{\alpha KD_{2y}} b + e^{-\alpha KD_{2y}} a \right) \\
& \left. \left(e^{KD_{4x} + \alpha KD_{1y}} b + e^{-(KD_{4x} + \alpha KD_{1y})} a \right) \left(e^{\lambda KD_{4x}} b + e^{-\lambda KD_{4x}} a \right)^2 \right] \\
& f_{AF} (\vec{x}, \vec{y})_{\vec{x}, \vec{y}=0}.
\end{aligned} \tag{3.80}$$

A partir deste momento procedemos como no caso AF.

d) ESTADO FERROMAGNÉTICO (F)

O estado F é caracterizado por subredes idênticas conforme esquematizado na figura 3.12, substituindo J_1 por $-J_1$ o Hamiltoniano do modelo $J_1 - J_2$ é dado por

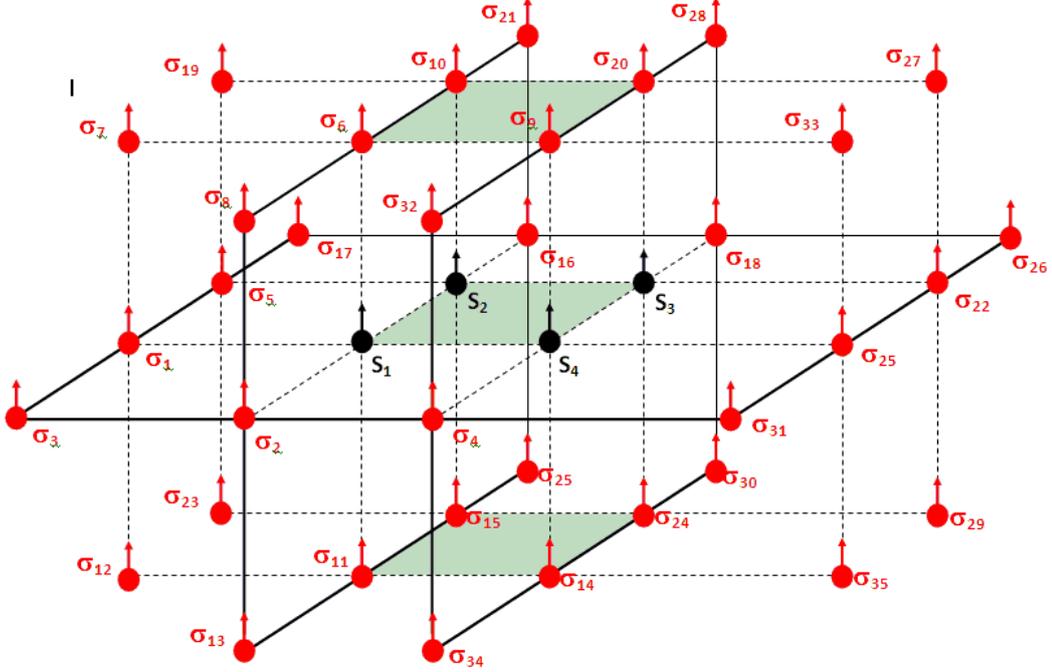


Figura 3.12: Estado fundamental ferromagnético numa rede cúbica simples no aglomerado com $N=4$ spins. Os spins do aglomerado são denotados por $\{\vec{S}_1, \vec{S}_2, \vec{S}_3, \vec{S}_4\}$ e os seus vizinhos por variáveis de Ising $\vec{S}_i = \sigma_i \hat{z}$. As regiões destacadas na figura foram construídas para melhor visualização.

$$-\beta \mathcal{H}_4^F = H_{12}^{(1)} + H_{23}^{(1)} + H_{34}^{(1)} + H_{41}^{(1)} + H_{13}^{(2)} + H_{24}^{(2)} + \sum_{i=1}^4 C_i S_i^z \quad (3.81)$$

onde

$$\begin{aligned} H_{ij}^{(1)} &= -K [(1 - \Delta) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z], \\ H_{ij}^{(2)} &= -\alpha K [(1 - \Delta) (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z] \end{aligned}$$

e ainda

$$C_n^F = C_{nx}^F - C_{ny}^F, \quad n = 1, 2, 3, 4 \quad , , , \quad (3.82)$$

$$C_{1x}^F = K (\sigma_1^A + \sigma_2^A) + \lambda K \sum_{i=6,11} \sigma_i^A \quad (3.83)$$

$$C_{1y}^F = \alpha K \sum_{i=3,4,5} \sigma_i^A. \quad (3.84)$$

$$C_{2x}^F = K (\sigma_5^A + \sigma_{16}^A) + \lambda K \sum_{i=10,15} \sigma_i^A \quad (3.85)$$

$$C_{2y}^F = \alpha K \sum_{i=1,17,18} \sigma_i^A \quad (3.86)$$

$$C_{3x}^F = K (\sigma_{18}^A + \sigma_{22}^A) + \lambda K \sum_{i=20,24} \sigma_i^A \quad (3.87)$$

$$C_{3y}^F = \alpha K \sum_{i=16,25,26} \sigma_i^A. \quad (3.88)$$

$$C_{4x}^F = K (\sigma_4^A + \sigma_{25}^A) + \lambda K \sum_{i=9,14} \sigma_i^A \quad (3.89)$$

$$C_{4y}^F = \alpha K \sum_{i=2,22,31} \sigma_i^A. \quad (3.90)$$

A partir da definição da magnetização da subrede A , ou seja, $m_A = \langle S_1^z \rangle$ e efetuando o seguintes processos: aplicando a cinemática dos spins para os sítios ($i = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8$)

e arrumando em sub-redes A e B , encontramos

$$\begin{aligned}
m_A = & \langle (e^{\alpha KD_{2x} + \alpha KD_{1y}} \hat{a} + e^{-\alpha KD_{2x} - \alpha KD_{1y}} \hat{b}) (e^{\alpha KD_{1y} + KD_{4x}} \hat{a} + e^{-\alpha KD_{1y} - KD_{4x}} \hat{b}) \\
& (e^{\alpha KD_{1y}} \hat{a} + e^{-\alpha KD_{1y}} \hat{b}) (e^{KD_{2x} + \alpha KD_{3y}} \hat{a} + e^{-(KD_{2x} + \alpha KD_{3y})} \hat{b}) \\
& (e^{\lambda KD_{2x}} \hat{a} + e^{-\lambda KD_{2x}} \hat{b})^2 (e^{\alpha KD_{3y}} \hat{a} + e^{-\alpha KD_{3y}} \hat{b}) \\
& (e^{\alpha KD_{3y} + KD_{4x}} \hat{a} + e^{-\alpha KD_{1y} - KD_{4x}} \hat{b}) (e^{\lambda KD_{4x}} \hat{a} + e^{-\lambda KD_{4x}} \hat{b})^2 \\
& (e^{KD_{1x} + \alpha KD_{4y}} \hat{a} + e^{-(KD_{1x} + \alpha KD_{4y})} \hat{b}) (e^{KD_{1x} + \alpha KD_{2y}} \hat{a} + e^{-(KD_{1x} + \alpha KD_{2y})} \hat{b}) \\
& (e^{\lambda KD_{1x}} \hat{a} + e^{-(\lambda KD_{1x})} \hat{b})^2 (e^{KD_{3x} + \alpha KD_{2y}} \hat{a} + e^{-(KD_{3x} + \alpha KD_{2y})} \hat{b}) \\
& (e^{\alpha KD_{2y}} \hat{a} + e^{-\alpha KD_{2y}} \hat{b}) (e^{KD_{3x} + \alpha KD_{4y}} \hat{a} + e^{-(KD_{3x} + \alpha KD_{4y})} \hat{b}) \\
& (e^{\lambda KD_{3x}} \hat{a} + e^{-\lambda KD_{3x}} \hat{b})^2 (e^{\alpha KD_{4y}} \hat{a} + e^{-\alpha KD_{4y}} \hat{b}) \rangle f(x_i, y_i) |_{x_i, y_i = 0}
\end{aligned} \tag{3.91}$$

Aplicando EFT-4 e a condição de contorno $m_A = -m_B = m$, obtemos

$$\begin{aligned}
m = & (e^{\alpha KD_{2x} + \alpha KD_{1y}} a + e^{-\alpha KD_{2x} - \alpha KD_{1y}} b) (e^{\alpha KD_{1y} + KD_{4x}} a + e^{-\alpha KD_{1y} - KD_{4x}} b) \\
& (e^{\alpha KD_{1y}} a + e^{-\alpha KD_{1y}} b) (e^{KD_{2x} + \alpha KD_{3y}} a + e^{-(KD_{2x} + \alpha KD_{3y})} b) \\
& (e^{\lambda KD_{2x}} a + e^{-\lambda KD_{2x}} b)^2 (e^{\alpha KD_{3y}} a + e^{-\alpha KD_{3y}} b) \\
& (e^{\alpha KD_{3y} + KD_{4x}} a + e^{-\alpha KD_{1y} - KD_{4x}} b) (e^{\lambda KD_{4x}} a + e^{-\lambda KD_{4x}} b)^2 \\
& (e^{KD_{1x} + \alpha KD_{4y}} a + e^{-KD_{1x} - \alpha KD_{4y}} b) (e^{KD_{1x} + \alpha KD_{2y}} a + e^{-KD_{1x} - \alpha KD_{2y}} a) \\
& (e^{\lambda KD_{1x}} a + e^{-\lambda KD_{1x}} b)^2 (e^{KD_{3x} + \alpha KD_{2y}} a + e^{-KD_{3x} - \alpha KD_{2y}} b) \\
& (e^{\alpha KD_{2y}} a + e^{-\alpha KD_{2y}} b) (e^{KD_{3x} + \alpha KD_{4y}} a + e^{-KD_{3x} - \alpha KD_{4y}} b) \\
& (e^{\lambda KD_{3x}} a + e^{-\lambda KD_{3x}} b)^2 (e^{\alpha KD_{4y}} a + e^{-\alpha KD_{4y}} b) \rangle f_F(\vec{x}, \vec{y})_{\vec{x}, \vec{y} = 0}.
\end{aligned} \tag{3.92}$$

A partir deste momento procedemos como no caso AF.

3.4 Resultados

Apresentamos nesta seção os resultados dos diagramas de fases obtidos via Teoria de Campo Efetivo em aglomerados com $N=2$ (EFT-2) e $N=4$ (EFT-4) spins para o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg anisotrópico com interação entre planos numa rede cúbica simples. Este modelo frustrado isotrópico ($\Delta = 0$) numa rede quadrada ($\lambda = 0$) tem sido estudado por diversas técnicas [22-34], onde o diagrama de fases em $T = 0 K$ está bem estabelecido. Existem dois estados ordenados dependentes do valor do parâmetro $\alpha = J_2/J_1$. No caso de interação de primeiros vizinhos AF ($J_1 > 0$) existem os estados AF para $\alpha < \alpha_{1c} \simeq 0.40$ e CAF para $\alpha > \alpha_{2c} \simeq 0.60$, com a presença de um estado desordenado intermediário na região $\alpha_{1c} < \alpha < \alpha_{2c}$, que é caracterizado por apresentar gap nas suas propriedades termodinâmicas (estado singlete). Por outro lado, o caso F ($J_1 < 0$) tem sido muito pouco discutido e alguns autores concluíram que o estado paramagnético quântico (PQ) não está presente [34], observando-se apenas uma transição de fase direta entre os estados F e CF. Usando EFT-2, Viana na sua tese de doutorado [19] observou o estado intermediário desordenado (PQ) entre as fases F e CF, e, ainda, este formalismo foi capaz de identificar a ordem da transição de fase em $\alpha = \alpha_{1c}$ (segunda ordem) e $\alpha = \alpha_{2c}$ (primeira ordem) aspecto este importante não possível através de outros métodos.

No estado fundamental ($T = 0 K$), o ponto crítico quântico (transição de 2ª ordem) é obtido analisando o comportamento do parâmetro de ordem ($m_F, m_{AF}, m_{CAF}, m_{CF}$) como uma função dos parâmetros λ , α e Δ do modelo. Porém, a caracterização de uma transição descontínua (1ª ordem) não é possível apenas analisando os parâmetros de ordem uma vez que devido a existência de instabilidades (soluções não físicas) não conseguimos identificar o ponto de descontinuidade, e então será necessário a obtenção de um funcional para a energia livre, de tal modo que minimizando-o encontremos a equação de estado associada ao parâmetro de ordem m_μ . Afim de apresentar um formalismo geral, considere duas fases μ_1 e μ_2 representadas pelas equações de estado $m_{\mu_1} = \Lambda_1(m_{\mu_1})$ e $m_{\mu_2} = \Lambda_2(m_{\mu_2})$, respectivamente. Estas equações de estado são obtidas da minimização

da energia livre que suponhamos sejam dadas por $\Psi_{\mu_1}(m_{\mu_1})$ e $\Psi_{\mu_2}(m_{\mu_2})$, nas referidas fases. Assim sendo, integrando estas equações, por exemplo da fase μ_i , encontramos,

$$\Psi_{\mu_i}(m_{\mu_i}) = \Omega_1 + \Omega_2 \left[\frac{1}{2} m_{\mu_i}^2 - \int_0^{m_{\mu_i}} \Lambda_i(x) dx \right], \quad (3.93)$$

onde Ω_1 e Ω_2 são funções que consideraremos, por hipótese, serem independentes do estado (ordenado ou desordenado) as quais pertençam. Observe que da minimização deste funcional $\delta\Psi_{\mu_i}(m_{\mu_i}) = 0$ obtém-se a respectiva equação de estado $m_{\mu_i} = \Lambda_i(m_{\mu_i})$. Certamente, o funcional acima terá validade apenas para analisar o diagrama de fases uma vez que as funções Ω_1 e Ω_2 não são conhecidas e desta maneira não podemos obter propriedades termodinâmicas.

Para encontrarmos a linha de transição entre duas fases μ_1 e μ_2 fazemos uso da construção de Maxwell, que corresponde a igualdade entre as energias livres, ou seja,

$$\Psi_{\mu_1}(m_{\mu_1}) = \Psi_{\mu_2}(m_{\mu_2}). \quad (3.94)$$

Usando a proposta do funcional dado pela Eq.(3.93) obtemos

$$\frac{m_{\mu_1}^2}{2} - \int_0^{m_{\mu_1}} \Lambda_1(x) dx = \frac{m_{\mu_2}^2}{2} - \int_0^{m_{\mu_2}} \Lambda_2(x) dx. \quad (3.95)$$

Resolvendo numericamente esta equação em conjunto com as equações de estado

$$\begin{cases} m_{\mu_1} = \Lambda_1(m_{\mu_1}) \\ m_{\mu_2} = \Lambda_2(m_{\mu_2}), \end{cases} \quad (3.96)$$

determinamos, por exemplo, para um dado par de valores (λ, Δ) fixos, o parâmetro de frustração α_c , que para o caso de transição de fase de segunda ordem $m_{\mu_1} = m_{\mu_2}$ e de primeira ordem $m_{\mu_1} \neq m_{\mu_2}$, onde no último caso temos uma descontinuidade no parâmetro de ordem $|m_{\mu_1} - m_{\mu_2}| \equiv \Delta m$. Esta metodologia tem sido usada com sucesso

para estudar transição de fases de primeira ordem em diversos modelos de spins [35-41].

Quando o sistema sofre transição de primeira ordem, o comportamento do parâmetro de ordem $m_{\mu_i}(\alpha)$, para λ e Δ fixos, apresenta soluções instáveis que são eliminadas através da construção de Maxwell, Eqs.(3.94) e (3.95), obtendo assim, o ponto de transição α_c onde temos uma descontinuidade. No caso especial do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg quântico de spin $\frac{1}{2}$ na presença da anisotropia de troca (Δ) e de rede (λ) temos observado uma transição de 2ª ordem entre as fase AF e paramagnética quântica (PQ), enquanto que entre as fases CAF(CF/F) e PQ, temos uma transição de 1ª ordem. Da análise formal anterior temos que entre a fase ordenada CAF(CF) e a desordenada PQ ($m = 0$), da Eq.(3.95) teremos

$$m_{CAF(CF)}^2 = 2 \int_0^{m_{CAF(CF)}} \Lambda_1^{CAF(CF)}(x) dx, \quad (3.97)$$

onde a função $\Lambda_1^{CAF(CF)}$ é obtida da expansão da equação da Eq.(3.97) de forma numérica, no qual temos $m_{CAF(CF)} = \Lambda_1^{CAF(CF)}(m_{CAF(CF)})$. Estas duas equações podem ser resolvidas numericamente para (Δ, λ) fixos obtendo α_c e a descontinuidade $m_{CAF(CF)}$. No caso da transição de 2ª ordem, que ocorre entre as fases AF e PQ obtemos resolvendo o sistema de equações

$$\begin{cases} m_{AF}^2 = 2 \int_0^{m_{CAF(F)}} \Lambda_1^{AF}(x) dx, \\ m_{AF} = \Lambda_1^{AF}(m_{AF}) \end{cases} \quad (3.98)$$

um valor nulo para o parâmetro de ordem $m_{AF} = 0$, correspondendo a uma transição de fase contínua no ponto crítico $\alpha = \alpha_c$.

Portanto, usando esta metodologia podemos encontrar diagramas de fase do estado fundamental nos planos $\alpha - \lambda$ e $\alpha - \Delta$ fixando valores para Δ e λ , respectivamente.

3.5 Método EFT-2

3.5.1 Caso Antiferromagnético

Transição de Fases Quântica

Na figura 3.13 apresentamos o diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$, do Modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$). Observamos a presença de três fases distintas: antiferromagnética (AF), colinear antiferromagnética (CAF) e paramagnética quântica (PQ). A transição quântica entre as fases AF e PQ é de segunda ordem ($m = 0$ sobre a linha de transição), enquanto que, as transições entre as fases PQ e CAF, e entre CAF e AF são todas de primeira ordem ($m \neq 0$ sobre a linha de transição). A fase paramagnética quântica, sem ordem de longo alcance, apresenta-se como uma fase intermediária entre as fases AF e CAF estendendo-se, aproximadamente, até valores de $\lambda \simeq 0.55$. Para $\lambda < 0.55$ temos um comportamento tipo bidimensional caracterizado pela presença do estado intermediário PQ, enquanto que para $\lambda > 0.55$ temos um comportamento tipo tridimensional caracterizado pela ausência do estado PQ, observando-se apenas uma transição de 1ª ordem entre as fases CAF e AF. Observe que para $\lambda > 0.55$ temos o ponto de transição $\alpha_c = \frac{1}{2}$ independente do parâmetro λ , que corresponde ao mesmo valor do outro modelo clássico frustrado (Ising ou Heisenberg). As linhas de transição AF-PQ, CAF-PQ e AF-CAF se encontram no ponto multicrítico, que segundo a classificação no estudo de transição de fase é denotado de ponto crítico terminal quântico.

O estado de Néel corresponde ao estado fundamental do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg clássico, cuja energia para este limite é dada por $\varepsilon_0^{AF} \equiv \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{NS^2J_1} = -(4 + 2\lambda) + 4\alpha$. Este estado AF é caracterizado por uma configuração de spins orientados em direções opostas ao longo de toda rede cristalina. No caso do estado CAF temos uma configuração de spins orientados paralelamente ao longo de linhas na horizontal, alternadas em direções opostas com as suas linhas horizontais vizinhas. Assim sendo, a energia do estado fundamental será dada por $\varepsilon_0^{CAF} \equiv \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{NS^2J_1} = -2\lambda - 4\alpha$. O ponto de transição de primeira ordem entre as fases AF e CAF é obtido igualando as energias (i.e., $\varepsilon_0^{AF} = \varepsilon_0^{CAF}$), encontrando o valor

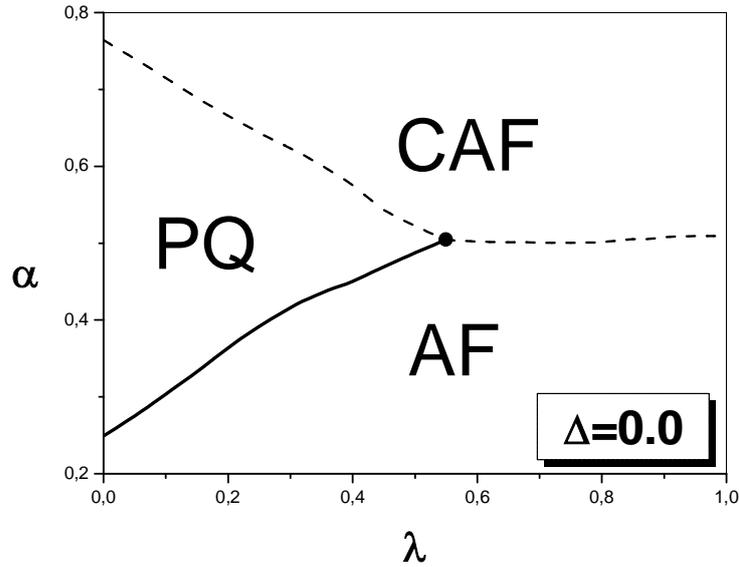


Figura 3.13: Diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg anti-ferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-2. A linha contínua corresponde à transição de segunda ordem, as linhas tracejadas correspondem as transições de primeira ordem e o ponto em negrito é o ponto crítico terminal quântico. Os símbolos AF, CAF e PQ denotam os estados fundamentais antiferromagnético, colinear antiferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente.

$\alpha_c = \frac{1}{2}$ independente do parâmetro λ .

O diagrama de fases do estado fundamental do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg quântico antiferromagnético de spin $\frac{1}{2}$ isotrópico ($\Delta = 0$) no plano $\alpha - \lambda$ foi discutido recentemente por Schumalfu β e colaboradores [47]. Por outro lado, os métodos utilizados por estes autores não foram capazes de identificar a transição de 1^a ordem entre as fases CAF e PQ. Os nossos resultados obtidos via EFT-2 estão qualitativamente corretos, com um ponto extremamente positivo que é a possibilidade de se obter adequadamente a transição de primeira ordem.

Afim de melhor ilustrar o diagrama de fases apresentado na figura 3.13, apresentamos na figura 3.14 os comportamentos dos parâmetros de ordem deste modelo nas fases AF e

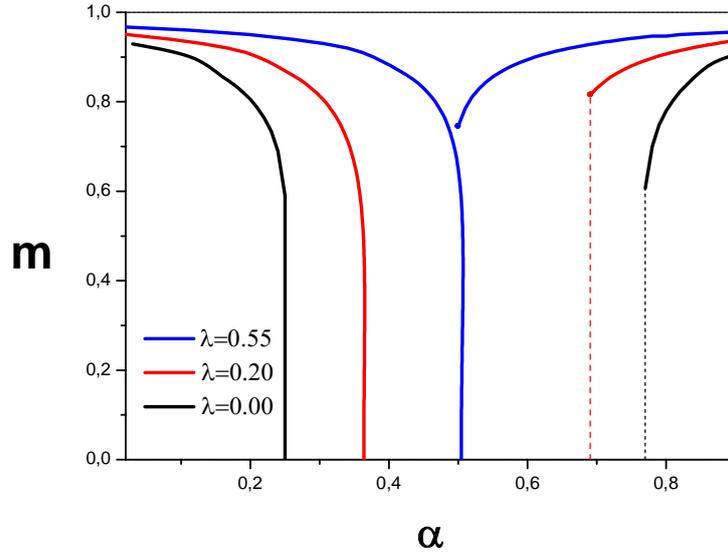


Figura 3.14: Comportamento da magnetização de subrede (parâmetro de ordem) em $T = 0$ K dos estados AF e CAF como função do parâmetro de frustração α do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg Antiferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-2 para valores de λ crescentes indicados na figura.

CAF como uma função do parâmetro de frustração α para alguns valores de λ (0,0, 0,2 e 0,55) no caso isotrópico ($\Delta = 0$). No limite da rede quadrada ($\lambda = 0$) temos que a magnetização da subrede A da fase AF, m_{AF} , decresce monotonicamente do valor $m_{AF}(\alpha = 0) = 0,93 < 1,0$ (valor clássico) se anulando no ponto crítico $\alpha = 0,25$. Na região entre $0,25 < \alpha < 0,76$ temos um estado desordenado, onde no ponto $\alpha_{2c} = 0,76$ ocorre uma descontinuidade do parâmetro de ordem da fase CAF, m_{CAF} , que cresce, para $\alpha > 0,76$, monotonicamente com o aumento do parâmetro de frustração. No limite $\alpha \gg 1$ temos um comportamento assintótico para m_{CAF} com um valor da rede quadrada AF, uma vez que a interação de primeiros vizinhos (J_1) é desprezível em relação ao valor da interação segundos vizinhos (J_2), sendo, assim, a interação predominante ao longo da diagonal, o que corresponde a uma “nova” rede quadrada rotacionada de $\pi/4$ e que terá $m_{CAF}(\alpha \gg 1) = m_{AF}(0) \simeq 0,93$. À medida que o parâmetro λ aumenta, a

região desordenada diminua gradualmente, tendo um comportamento qualitativo para $\lambda = 0.2$ dos respectivos parâmetros de ordem das fases AF e CAF semelhantes ao da rede quadrada. Por outro lado, para o caso de $\lambda > 0.55$ observamos uma transição de 1ª ordem direta entre as fases AF e CAF, que é caracterizada pela descontinuidade $\Delta m \equiv |m_{AF} - m_{CAF}| \neq 0$.

Vimos da análise do diagrama de fase da figura 3.13 que o efeito do parâmetro λ no modelo está relacionado ao “crossover” do comportamento $2d$ (presença do estado intermediário PQ) para $3d$ (ausência do estado PQ e uma transição direta de 1ª ordem em $\alpha = \frac{1}{2}$ independente de $\lambda > 0.55$). Podemos interpretar, que o aumento do parâmetro de dimensionalidade λ tem o efeito de diminuir as flutuações quânticas, predominantemente fortes no limite da rede quadrada ($\lambda = 0$), e que são destruídas para $\lambda > 0.55$. Um outro parâmetro relevante na destruição do estado intermediário PQ é a anisotropia Δ . No caso da figura 3.13 analisamos o limite isotrópico ($\Delta = 0$), onde foi obtido o ponto de “crossover” $\lambda = \lambda_1(\Delta = 0) \simeq 0.55$. Com o aumento do parâmetro Δ temos uma diminuição gradual das flutuações quânticas, uma vez que o termo energético da interação no Hamiltoniano associado as componentes XY do exchange também diminua e espera-se uma classe de universalidade Ising. Assim sendo, a medida que o parâmetro de anisotropia Δ cresce temos como consequência uma diminuição do valor $\lambda_1(\Delta)$, e a região desordenada (PQ) vai monotonicamente sendo diminuída, e extinta completamente no limite Ising ($\Delta = 1$). Afim de ilustração, na figura 3.15 apresentamos o diagrama de fases no estado fundamental no plano $\alpha - \lambda$ para $\Delta = 0.2$. Notemos que para $\lambda > \lambda_1(\Delta = 0.2) \simeq 0.42$ temos uma transição direta de primeira ordem entre as fases AF e CAF no ponto $\alpha = \frac{1}{2}$ independente de λ . O comportamento qualitativo dos parâmetros de ordem m_{AF} e m_{CAF} como uma função do parâmetro α para diversos valores de λ é equivalente ao ilustrado na figura 3.14 para o limite isotrópico $\Delta = 0$.

Na figura 3.16 apresentamos o diagrama de fases no plano $\Delta - \alpha$ e valores de $\lambda = 0.2$ e $\lambda = 0.4$ ($3d$). O limite $2d$ ($\lambda = 0$) foi anteriormente discutido (ver figura 3.17) por Viana e de Sousa [19], e neste trabalho generalizamos o modelo incluindo interação entre planos

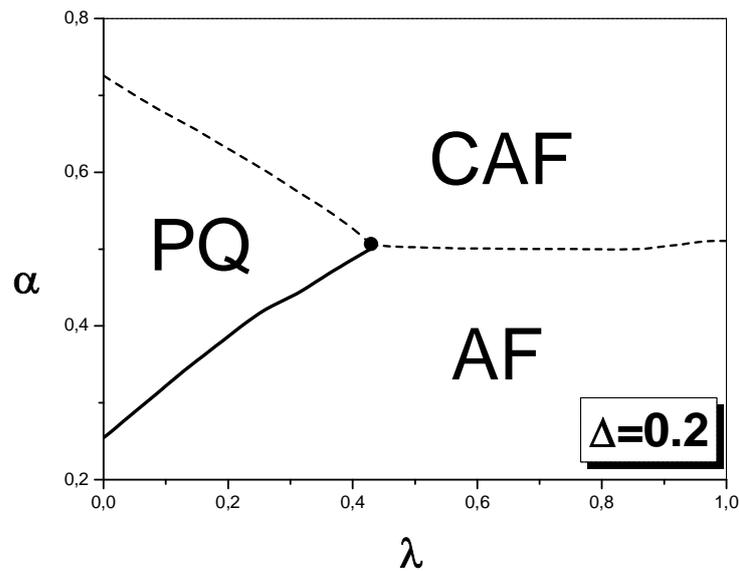


Figura 3.15: Diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg antiferromagnético anisotrópico ($\Delta = 0.2$) obtido via EFT-2. A linha contínua corresponde à transição de segunda ordem, as linhas tracejadas correspondem as transições de primeira ordem e o ponto em negrito é o ponto crítico terminal quântico. Os símbolos AF, CAF e PQ denotam os estados fundamentais antiferromagnético, colinear antiferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente.

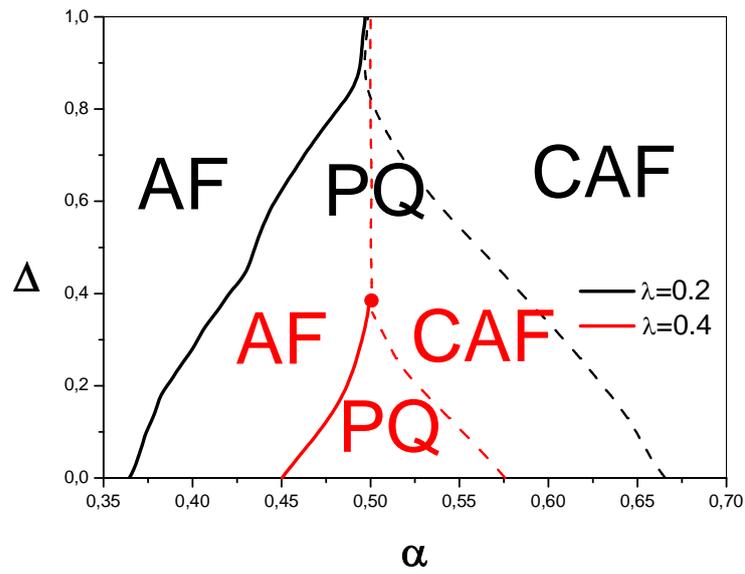


Figura 3.16: Diagrama de fases no estado fundamental no plano $\Delta - \alpha$ para o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnético anisotrópico numa rede $3d$ (cúbica simples) com diversos valores de $\lambda = 0.2, 0.4$ obtido via EFT-2. As linhas contínuas e tracejadas correspondem as transições de 2^a e 1^a ordem, respectivamente.

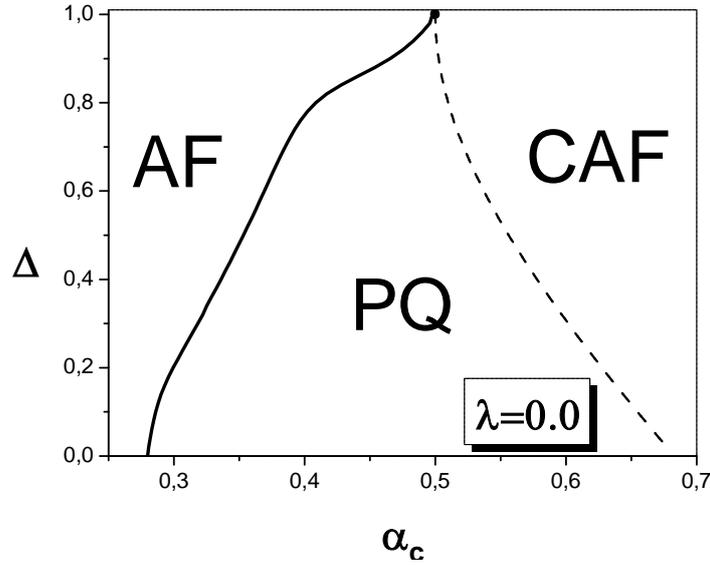


Figura 3.17: Diagrama de fases no estado fundamental no plano $\Delta - \alpha$ para o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnético anisotrópico numa rede $2d$ (quadrada), obtido por Viana e de Sousa. As linhas contínuas e tracejadas correspondem as transições de 2^a e 1^a ordem, respectivamente.

(simulada pelo parâmetro λ). No caso $2d$, o ponto crítico quântico $\alpha_1(\Delta)$, que separa as fases AF e PQ, cresce monotonicamente a medida que aumentamos a anisotropia (diminuimos as flutuações quânticas) Δ , do valor $\alpha_1(0) \simeq 0.25$ para o valor clássico $\alpha_1(1) = \frac{1}{2}$. Por outro lado, a linha de transição de primeira ordem $\alpha_2(\Delta)$ que separa as fases PQ e CAF cresce monotonicamente do valor $\alpha_2(\Delta = 1) = \frac{1}{2}$ a medida que o parâmetro de anisotropia diminui (aumenta as flutuações quânticas) atingindo o valor $\alpha_2 \simeq 0.76$ (ver figura 3.13) no limite isotrópico ($\Delta = 0$). O estado desordenado persiste para todo valor de anisotropia $\Delta \neq 1$ ($2d$). Introduzindo interação entre planos através do parâmetro λ , temos uma redução gradual das flutuações quânticas que é refletida na diminuição da região desordenada PQ. Da nossa análise obtida via EFT-2 verificamos este resultado qualitativo, com o aparecimento de um novo fenômeno, que é a existência de um valor característico $\Delta_c(\lambda)$ na qual acima deste valor temos uma transição direta

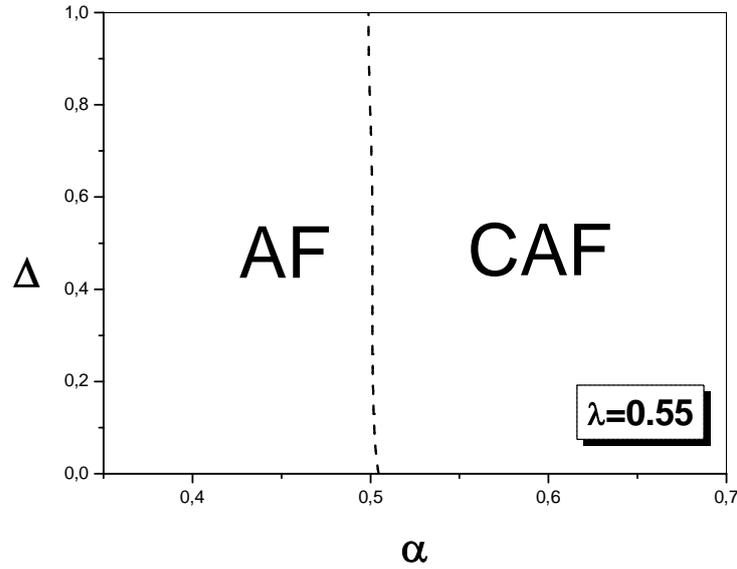


Figura 3.18: Diagrama de fases no estado fundamental no plano $\Delta - \alpha$ para o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg Antiferromagnético numa rede $3d$ (cúbica simples) anisotrópica com $\lambda = 0.55$ obtido via EFT-2. A linha tracejada corresponde a transição de 1ª ordem entre as fases AF e CAF.

de primeira ordem entre as fases AF e CAF no valor clássico $\alpha_c = \frac{1}{2}$ independente do valor de $\Delta > \Delta_c(\lambda)$. Para $\lambda \geq \lambda_1 \simeq 0.55$, a região desordenada PQ é completamente destruída (figura 3.18), observando apenas uma transição de 1ª ordem entre as fases AF e CAF próximo do ponto clássico $\alpha_c = \frac{1}{2}$.

Transições de Fases Clássicas

Temos estudado, em $T = 0$ K, diagramas de fases do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnético, onde as linhas de transição de fase (1ª e 2ª ordem) foram obtidas via EFT-2 com uma proposta de um funcional para cada estado ordenado (AF, CAF). Estas transições ocorrem devidas às flutuações quânticas descritas pelo princípio da incerteza. De acordo com alguns intervalos de valores dos parâmetros α e λ um estado desordenado (paramagnético quântico -PQ) ocorre, que no nosso formalismo este estado PQ é carac-

terizado por ausência de ordem de longo-alcance. Por outro lado, temos forte indício que o estado PQ neste modelo apresenta um comportamento distinto do estado paramagnético (P) em temperatura finita, em particular, temos presença de gap e, assim, denomina-se este estado desordenado de líquido de spin (LS). Especulamos que o estado LS persiste na região de baixas temperaturas, onde as flutuações quânticas são relevantes, e deve existir uma temperatura característica T_0 na qual $T < T_0$ e $T > T_0$ estamos nos regimes quânticos e clássicos, respectivamente, e $T = T_0$ é a temperatura de crossover. Em temperatura finita ($T > 0$) observamos diversas transições de fases (clássicas) que são governadas por flutuações térmicas, refletidas nas singularidades nas grandezas termodinâmicas, como, por exemplo, a susceptibilidade magnética $\chi_o \approx \langle (M - \langle M \rangle)^2 \rangle \approx |T - T_c|^{-\gamma}$ (flutuação da magnetização ou parâmetro de ordem). Devemos mencionar que o formalismo desenvolvido nesta tese não é capaz de identificar a temperatura de crossover T_0 , nem mesmo caracterizar o estado desordenado LS (presença de gap), uma vez que o estado desordenado, que persiste em temperatura finita, é caracterizado, unicamente por ausência de ordem de longo-alcance.

Em temperatura finita obtemos via EFT-2 diagramas de fase no plano $T - \alpha$ para diversos valores de Δ e λ . Na figura 3.19 temos o caso bidimensional ($\lambda = 0$). Para $\Delta = 1$ (Ising), a temperatura de transição T_N que delimita as fases AF e P é de segunda ordem, e decresce monotonicamente quando o parâmetro de frustração α cresce se anulando no ponto $\alpha_c = \frac{1}{2}$. Para $\alpha > \frac{1}{2}$ e baixa temperatura o estado ordenado é CAF, onde a temperatura de transição cresce monotonicamente com o aumento de α . Nesta região temos a presença de transição de 1ª ordem em baixa temperatura e de 2ª ordem em alta temperatura, onde existe um ponto (tricrítico) que separa duas linhas de transição. Este resultado foi obtido por Rosana [48] na sua dissertação de mestrado. Para $\Delta < 1$ temos presença de efeitos quânticos na região de baixas temperaturas, onde em $T = 0$ K observamos o estado PQ (ver figura 3.19). Escolhendo $\Delta = 0.5$ obtemos uma temperatura crítica $T_N(\alpha)$ que decresce com aumento do parâmetro α , onde no limite de baixas temperaturas temos a presença de um comportamento reentrante,

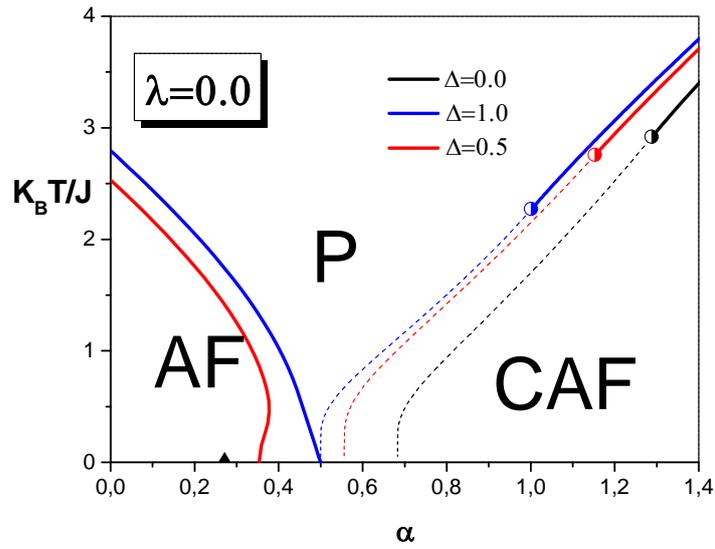


Figura 3.19: Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ para o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg Antiferromagnético anisotrópico numa rede quadrada ($\lambda = 0$) com diversos valores do parâmetro de anisotropia $\Delta = 0$ (isotrópico), 0.5 e 1.0 (Ising) obtido via EFT-2 por Viana e de Sousa. As linhas contínuas e tracejadas correspondem as transições de 2^a e 1^a ordem, respectivamente. Os pontos em meia lua correspondem aos pontos tricríticos.

caracterizado por duas temperaturas críticas na região $0.35 \lesssim \alpha < 0.39$. Este fenômeno de reentrância geralmente está associado a presença de competição no sistema, que aqui está representado através do parâmetro de frustração, mas este resultado pode ter sido manifestado por causa do tamanho finito do aglomerado usado ($N=2$), que a priori pode ser eliminado quando aglomerados maiores são utilizados. Em particular, mais adiante desenvolveremos o formalismo em aglomerado com $N=4$ spins (EFT-4) e investigaremos este fenômeno. A fase CAF, que se manifesta a partir de $\alpha > \alpha_{2c} \simeq 0.56$ tem um comportamento qualitativo semelhante ao caso do limite Ising ($\Delta = 1$) com $T_N(\Delta)$ decrescente a medida que flutuações quânticas são introduzidas com a diminuição do parâmetro Δ . Este diagrama de fase para diversos valores de anisotropia tem sido discutido preliminarmente por Viana e de Sousa [35]. Convém salientar neste momento sobre a maneira que construímos o aglomerado com $N=2$ spins e sua influência no diagramas de fase. Por exemplo, o diagrama da figura 3.19 obtido por Rosana [48] foi construído adotando-se o aglomerado com os dois spins na mesma subrede (AA ou BB). Desta maneira, para $\Delta = 0$ a linha de transição de 1ª ordem entre as fases P e CAF inicia em $\alpha = \alpha_{2c} \simeq 0.68$ ($T = 0$ K). Este resultado é numericamente diferente do nosso resultado (figura 3.20) em duas dimensões ($\lambda = 0$), onde em $T = 0$ K temos $\alpha = \alpha_{2c} \simeq 0.76$, com o aglomerado construído com spins em subredes diferentes (AB ou BA). Esta escolha por nós utilizada é baseada em argumentos de simetria, pois, desta maneira para cada spin do aglomerado, situados em subredes diferentes, teremos a mesma quantidade de primeiros vizinhos com orientações diferentes. Se a escolha é feita com dois spins na mesma subrede teremos quantidades diferentes de vizinhos com orientação oposta a cada spin do aglomerado.

No caso em que a dimensionalidade é mudada através do parâmetro λ temos dois tipos de diagramas de fases que caracterizam os regimes $2d$ e $3d$ do sistema. Para $0 \leq \lambda \lesssim 0.55$ e no limite isotrópico ($\Delta = 0$) temos na figura 3.20 diagramas de fases no plano $T - \alpha$ do tipo apresentado na figura 3.19 ($\lambda = 0$), com presença de um estado intermediário (LS) em $T = 0$ K. Por outro lado, com o aumento da dimensionalidade (λ) as flutuações quânticas vão sendo reduzidas gradativamente, como consequência, a região desordenada

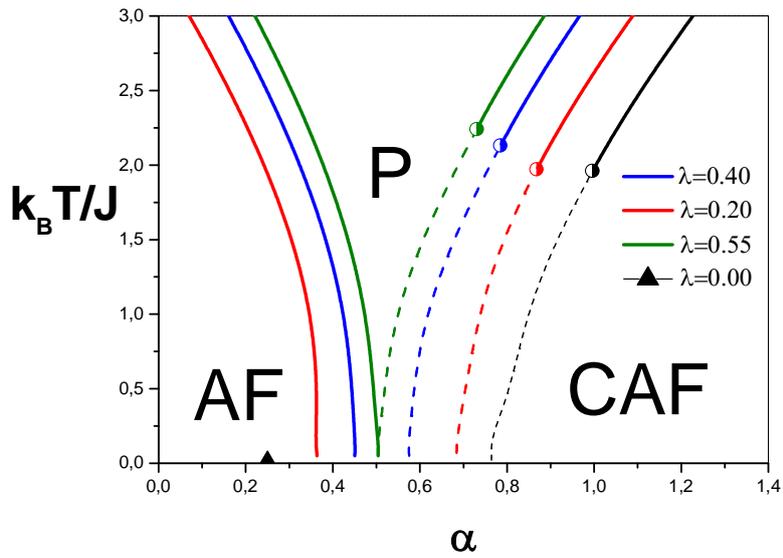


Figura 3.20: Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ para o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg Antiferromagnético Isotrópico ($\Delta = 0$) numa rede $3d$ (cúbica simples) anisotrópica com diversos valores de $\lambda = 0.2, 0.4, 0.55$ obtido via EFT-2. As linhas contínuas e tracejadas correspondem às transições de 2ª e 1ª ordem, respectivamente. Os pontos em meia lua correspondem aos pontos tricríticos.

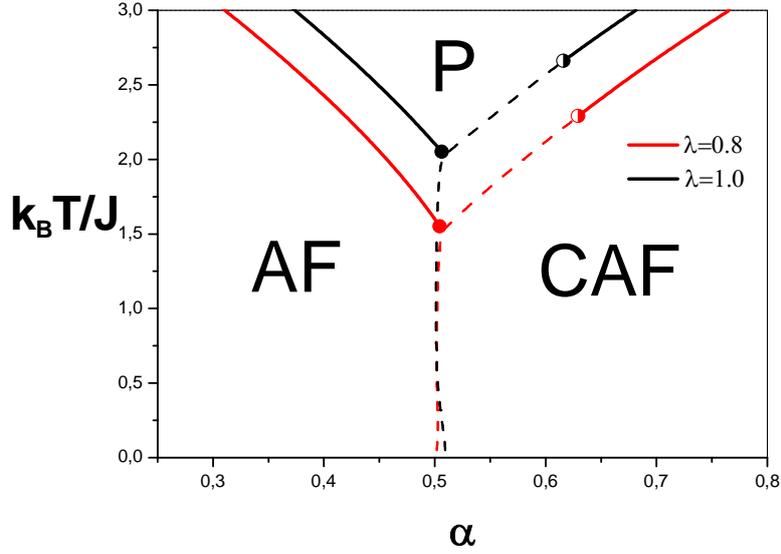


Figura 3.21: Diagrama de fases no plano $T-\alpha$ para o modelo J_1-J_2 Heisenberg isotrópico ($\Delta = 0$) numa rede $3d$ (cúbica simples) anisotrópica com valores de $\lambda(> \lambda_1 = 0.55) = 0.8, 1.0$ obtido via EFT-2. As linhas contínuas e tracejadas correspondem às transições de 2^a e 1^a ordem, respectivamente. Os pontos em meia lua correspondem aos pontos tricríticos e os em negrito aos pontos críticos terminais.

em $T = 0$ K também decresce desaparecendo para $\lambda > 0.55$. No caso do estado AF temos que a temperatura crítica $T_N(\alpha)$ entre as fases AF e P decresce monotonicamente à medida que aumentamos a frustração, que é simulada através do parâmetro α . Esta linha de segunda ordem persiste até um certo valor característico de $\alpha_c(\lambda)$, onde para $\alpha > \alpha_c(\lambda)$ temos em baixas temperaturas um ordenamento CAF. Observamos que a temperatura de transição entre as fases CAF e P tem um comportamento qualitativo semelhante aos casos com $\lambda < 0.55$ (comportamento $2d$), que é a presença de transições de 1^a e 2^a ordens com um ponto tricrítico separando estas duas linhas de transição (ver figura 3.21). Nossos resultados na fase CAF diferem dos obtidos por Viana, de Sousa e Continentino [38] que usaram também a EFT-2. No caso da Ref. 37, a interação de segundos vizinhos (J_2) no modelo inclui tanto no plano como entre planos, e no

nosso modelo apenas incluímos J_2 no plano. Desta maneira, Viana e colaboradores [38] observaram apenas transição de 1ª ordem para todo o valor de $\alpha > \alpha_c(\lambda = 1)$, não prevendo ponto tricrítico no diagrama de fase. O diagrama de fases obtido por Viana e colaboradores para o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnético na rede cúbica simples é qualitativamente semelhante aos limites dos modelos frustrados clássicos Ising e Heisenberg $3d$ obtidos por EFT-2 [36] e simulação de Monte Carlo [13], respectivamente, onde este último resultado é apresentado na figura 3.22.

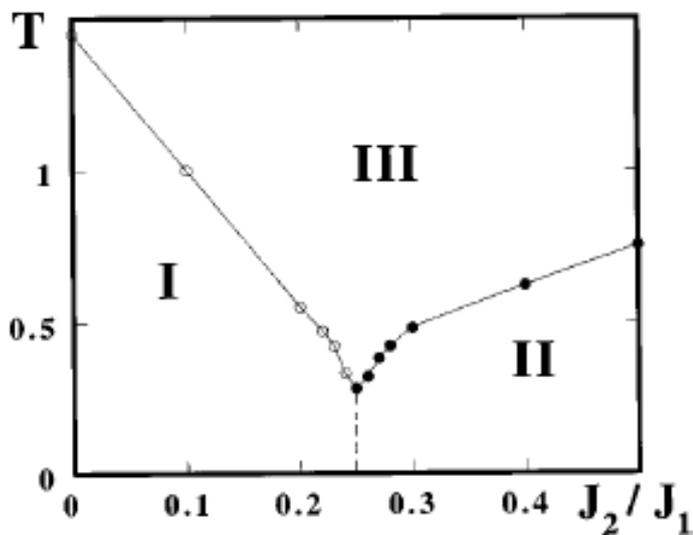


Figura 3.22: Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ para o modelo $J_1 - J_2$ modelo de Heisenberg numa rede cúbica simples obtido por simulação de Monte Carlo [13]. Os símbolos I, II e III representam os estados AF, CAF e P, respectivamente.

3.5.2 Caso Ferromagnético

Transições de Fases Quântica

A maioria dos trabalhos que discutem o diagrama de fases o modelo de Heisenberg quântico frustrado em duas ou três dimensões tratam de sistemas com ordenamento do tipo AF. Existem poucos resultados na literatura tratando o caso F. Re-

centemente, diversos materiais quase $2d$ descritos pelo modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg ferromagnético têm sido estudados experimentalmente, como, por exemplo, os compostos $Pb_2VO(PO_4)_2$, $CuClLaNb_2O_7$, $SrZnVO(PO_4)_2$ e $BaCdVO(PO_4)_2$. Devido ao alto valor de J_2 esses materiais apresentam ordenamento CF, esquematizado na figura 3.8. Do ponto de vista teórico, os estudos preliminares no modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg ferromagnético tem mostrado que o estado fundamental F é destruído em $\alpha_{1c} \simeq 0.40$ [42-46], enquanto que o correspondente modelo quântico frustrado ocorre em $\alpha_c = 1/2$. Para altos valores de $\alpha > \alpha_{2c}$ um ordenamento CF aparece, que de acordo com as referências [42-46] este segundo valor crítico ocorre em $\alpha_{2c} \simeq 0.60$, com estes estados ordenados F e CF separados por um estado desordenado (PQ). Note que o estado colinear, bem como os valores de α_{1c} e α_{2c} calculados por diversos métodos na literatura, são similares às observações para o correspondente modelo $J_1 - J_2$ AF. Por outro lado, Richter e colaboradores [34] usando os métodos do aglomerado acoplado em alta ordem e diagonalização exata mostraram que a fase intermediária entre os estados F e CF não existe, ou se existir deve ser numa pequena região em torno de $\alpha \simeq 0.40$. Ou seja, estes novos estudos indicam que temos uma direta transição entre as fases F e CF. Na figura 3.23 apresentamos o diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ no estado fundamental ($T = 0$ K) deste modelo no limite isotrópico ($\Delta = 0$). Estudamos a influência da dimensionalidade (através do parâmetro λ) e da anisotropia de troca Δ na existência da fase desordenada PQ. As fases presentes no diagrama são: ferromagnética (F), colinear ferromagnética (CF) e paramagnética quântica (PQ). As linhas de transição entre as fases $F \rightleftharpoons CF$, $CF \rightleftharpoons PQ$ e $F \rightleftharpoons PQ$ são todas de primeira ordem, diferenciando-se do caso AF (figura 3.13), onde a transição entre as fases $AF \rightleftharpoons PQ$ é de segunda ordem. A fase PQ, em duas dimensões ($\lambda = 0$), se estende no intervalo $0.418 < \alpha < 0.52$ e apresenta estreitamento desta região a medida que aumentamos o parâmetro de interação entre planos λ , desaparecendo completamente em $\lambda = 0.16$ e $\alpha = 0.46$. Para $\lambda > 0.16$ a transição é direta entre as fases F e CF. Assemelhando-se ao diagrama de fases da água, onde temos três linhas de coexistência (1ª ordem) interceptam-se no ponto triplo, no caso do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg

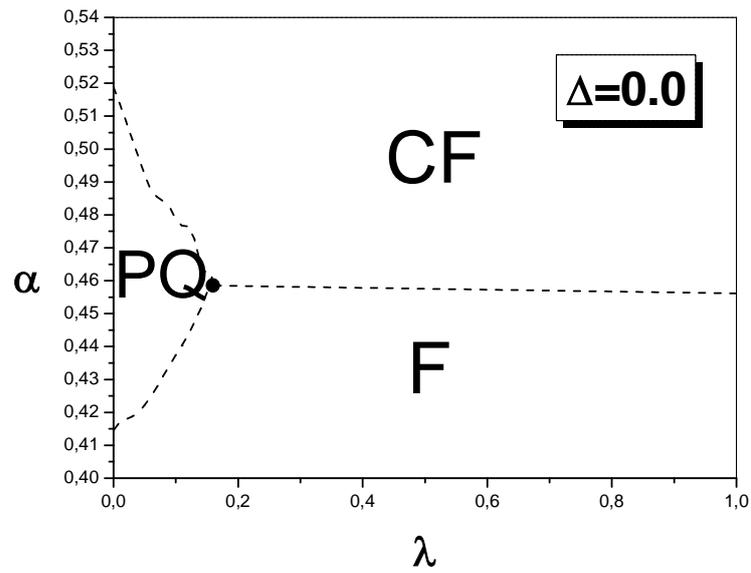


Figura 3.23: Diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-2. As linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e o ponto em negrito é o ponto triplo quântico. Os símbolos F, CF e PQ denotam os estados fundamentais ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente.

ferromagnético temos a presença do ponto triplo, indicado pelo ponto em negrito, porém não existe término da linha de coexistência entre as fases F e CF (ponto crítico) a qual se estende para todo valor de $\lambda > 0.16$. Uma argumentação para a possível transição de fases de 1^a ordem entre os estados F e PQ deve-se sobretudo: (i) ao estado F apresentar uma configuração dos spins todos ordenados paralelamente em uma determinada direção para $\alpha < \alpha_{1c}(\lambda)$ com $m_F(T = 0) = 1$ (ausência de flutuações quânticas) e que é o estado fundamental do modelo quântico na rede quadrada, e (ii) que no ponto $\alpha = \alpha_{1c}(\lambda)$, por exemplo, $\alpha_{1c}(\lambda = 0) = 0.415$ temos uma mudança drástica da magnetização com $m = 1$ do lado F e $m = 0$ do lado PQ (mudando descontinuamente). Por outro lado, no caso AF devido à presença de flutuações quânticas, o estado fundamental não apresenta uma configuração de spins na rede bem caracterizado, e à medida que o parâmetro de frustração α cresce temos um comportamento gradual decrescente do parâmetro de ordem, indo, neste caso a zero de forma contínua caracterizando assim uma transição de 2^a ordem.

Com o objetivo de investigar a influência quântica através do parâmetro de anisotropia de troca Δ , construímos o diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ para o caso particular de anisotropia $\Delta = 0.1$, que está apresentado na figura 3.24. O resultado é qualitativamente o mesmo ao apresentado na figura 3.23 para o caso isotrópico ($\Delta = 0$), com uma redução da região desordenada (PQ). Fisicamente entendemos a razão desta diminuição devido a diminuição das flutuações quânticas com o aumento da anisotropia, e que no limite clássico - Ising ($\Delta = 1$) esta fase intermediária é completamente destruída independentemente do fator de acoplamento entre planos λ . Notemos ainda que, diferentemente do caso AF em que para $\lambda = 1$ temos uma transição direta (1^a ordem) entre os estados AF e CAF no ponto $\alpha_c = 0.5$ independentemente do valor de Δ , no caso F o valor correspondente encontrado é $\alpha_c(\lambda = 1) < 0.5$ sendo uma função monotonicamente crescente com o aumento da anisotropia, tendo assíntota $\alpha_c(\lambda) = 0.5$ para $\Delta = 1$ (Ising). Este resultado para $\alpha_c(\lambda = 1) < 0.5$ quando $\Delta \neq 1$ pode ser um efeito de tamanho finito, refletido através do formalismo EFT-2, e uma análise do aumento do aglomerado será feita na próxima seção, através do formalismo EFT-4.

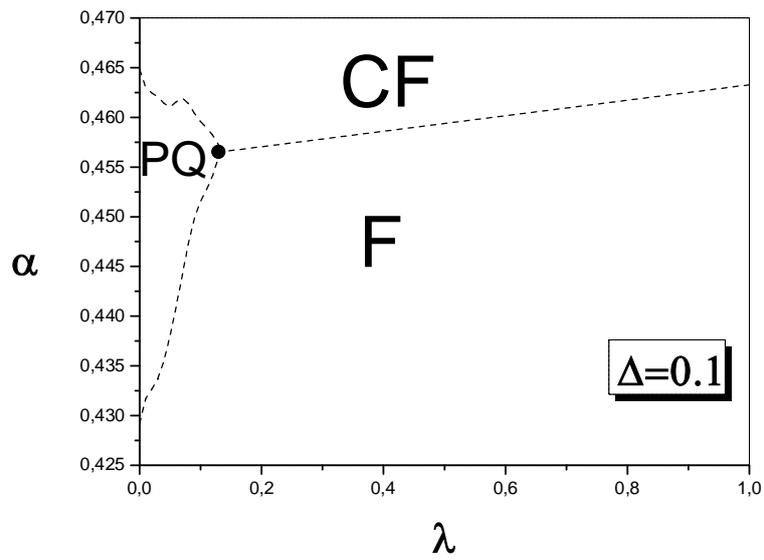


Figura 3.24: Diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético anisotrópico ($\Delta = 0.1$) obtido via EFT-2. As linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e o ponto em negrito é o ponto triplo quântico. Os símbolos F, CF e PQ denotam os estados fundamentais ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente.

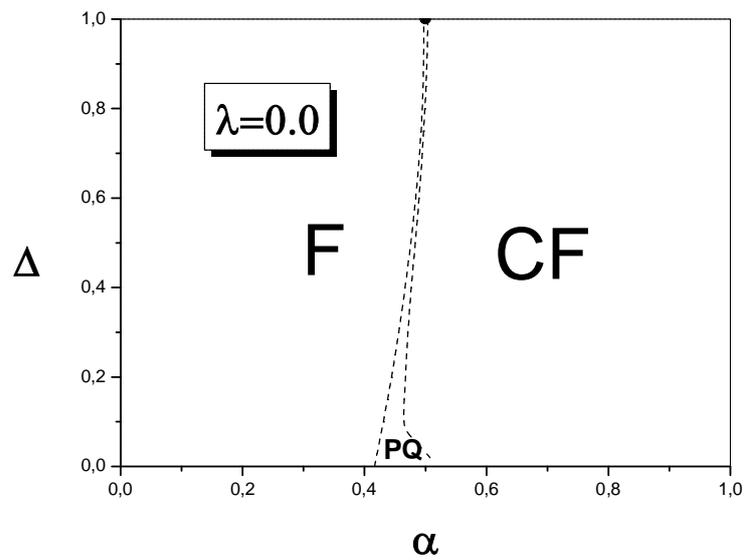


Figura 3.25: Diagrama de fases no estado fundamental no plano $\Delta - \alpha$ para o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg ferromagnético numa rede quadrada ($\lambda = 0$) anisotrópica obtido via EFT-2. As linhas tracejadas indicam as transições de 1^a ordem entre os estados F-PQ e PQ-CF.

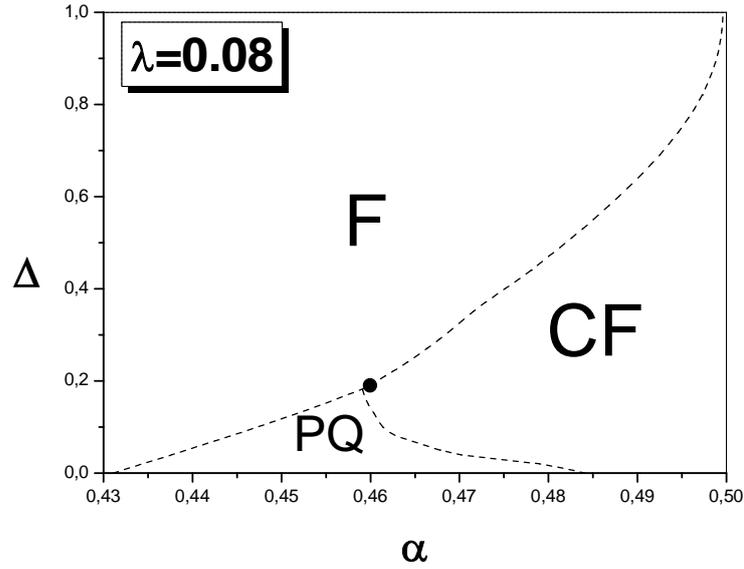


Figura 3.26: Diagrama de fases no estado fundamental no plano $\Delta - \alpha$ para o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg isotrópico ($\Delta = 0$) numa rede $3d$ (cúbica simples) anisotrópica com diversos valores de $\lambda = 0.08$ obtido via EFT-2. As linhas tracejadas correspondem às transições de 1^a ordem.

Na figura 3.25 apresentamos o diagrama de fases no estado fundamental no plano $\Delta - \alpha$ em duas dimensões ($\lambda = 0$). Temos que o ponto de transição (1^a ordem) $\alpha_{1c}(\Delta)$ que separa as fases F e PQ cresce monotonicamente à medida que aumentamos a anisotropia Δ , do valor $\alpha_{1c}(0) \simeq 0.418$ para o valor clássico $\alpha_{1c}(1) = 0.5$. Este resultado é qualitativamente semelhante ao caso da transição de fase AF-PQ (ver fig. 3.16), com uma mudança drástica no tipo de transição de fase. A linha de primeira ordem $\alpha_{2c}(\Delta)$ que separa as fases PQ e CF decresce do valor $\alpha_{2c}(\Delta = 1) = 0.5$ até atingir $\alpha_{2c}(\Delta) \simeq 0.52$ no limite isotrópico ($\Delta = 0$).

Por outro lado, na figura 3.26 apresentamos o diagrama de fases no plano $\Delta - \alpha$ com uma pequena interação entre planos $\lambda = 0.08$ a fim de analisar como se comporta este estado desordenado. Contrário ao caso AF, figura 3.16, temos a presença de um comportamento reentrante que é caracterizado por existir dois valores de anisotropia (Δ)

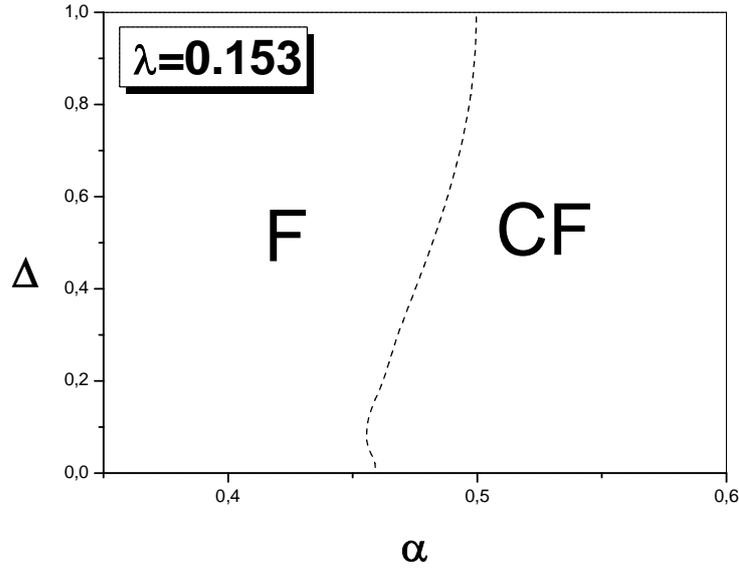


Figura 3.27: Diagrama de fases no estado fundamental no plano $\Delta - \alpha$ para o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg Ferromagnético numa rede $3d$ (cúbica simples) anisotrópica com acoplamento entre planos $\lambda = 0.153$ obtido via EFT-2. A linha tracejada corresponde a transição de 1^a ordem entre os estados F-CF.

com o mesmo valor de $\alpha_{2c}(\Delta)$. Certamente, esse comportamento reentrante pode ser uma consequência do efeito de tamanho finito na aproximação EFT-2, e que poderá ser eliminado com o uso de aglomerados maiores. Quando discutirmos os resultados EFT-4 esperamos ter um comportamento qualitativo do tipo analisado no caso AF na figura 3.16. Aumentando o valor da interação entre planos (λ) temos uma redução gradual das flutuações quânticas que é refletida na diminuição da região desordenada PQ. Para o caso especial de $\lambda = 0.08$, o estado PQ existe para $\Delta \leq 0.19$, enquanto que para $\Delta > 0.19$ temos uma transição direta (1^a ordem) entre os estados ordenados F e CF, com $\alpha_c(\Delta)$ crescendo monotonicamente a medida que Δ cresce, atingindo finalmente o valor clássico $\alpha_c(\Delta = 1) = 0.5$. Para $\lambda \geq \lambda_1 \simeq 0.153$, a região desordenada PQ é completamente destruída, observando-se apenas uma transição de 1^a ordem entre os estados F e CF com o ponto de transição $\alpha_c(\Delta)$ crescendo até atingir o valor clássico $\alpha_c(\Delta = 1) = 0.5$.

Observamos mais uma vez resultados diferentes do caso AF. Para $0 < \lambda < \lambda_1 (\simeq 0.55$ e 0.153 para os casos AF e F, respectivamente) temos a região intermediária desordenada (PQ) reduzida com $\alpha_c = 0.5$ para $\Delta > \Delta_c(\lambda)$ no caso AF, enquanto que no caso F temos um aumento gradual do valor $\alpha_c(\Delta)$ até atingir o limite clássico $\alpha_c(\Delta = 1) = 0.5$. No caso AF e $\lambda > \lambda_1$ temos observado na figura 3.16 um valor constante (clássico) $\alpha_c(\Delta = 1) = 0.5$. A priori, este comportamento do diagrama de fases no plano $\Delta - \alpha$ para vários valores de λ no caso F, diferindo dos resultados do caso AF, pode ser atribuído ao efeito de tamanho finito e isto será explorado na próxima seção quando analisarmos os resultados do formalismo EFT-4. Na figura 3.27 exemplificamos um diagrama de fases no plano $\Delta - \alpha$ para $\lambda > \lambda_1$, em particular escolhemos o valor $\lambda = 0.153$. O efeito do acoplamento entre planos no diagrama de fases $\Delta - \alpha$ é mostrado e apenas uma transição de 1ª ordem direta entre as fases F e CF é observada.

Transições de Fases Clássica

Temos discutido as transições de fases quânticas no modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg ferromagnético, onde os efeitos das anisotropias espacial λ e de troca Δ foram investigados influenciando a existência da fase desordenada PQ. Estas transições ocorrem devido às flutuações quânticas (princípio da incerteza). Todas as linhas de transição foram de primeira ordem e obtidas via EFT-2 com a proposta de um funcional de energia para cada estado ordenado (F,CF). Usando a construção de Maxwell (igualdade entre as energias livres) foi possível calcular os pontos de transição quântica, e mostrar que são de 1ª ordem, que são caracterizadas por descontinuidades dos parâmetros de ordem no ponto de transição. No caso AF, o estado desordenado PQ é caracterizado por formação de dímeros, em estado singlete, descorrelacionados entre si não apresentando assim ordem de longo alcance. Por outro lado, especulamos que o estado PQ para o caso F deve ser composto de dímeros no estado tripleto (spins paralelos), também descorrelacionados entre si. Neste trabalho não temos investigado o aspecto físico do estado PQ, apenas mencionamos que este não apresenta ordem de longo alcance.

Levando em consideração o aspecto térmico, especulamos que as características do estado PQ deve existir em baixas temperaturas ($T < T_o$) e que para $T > T_o$ as flutuações térmicas destroem este comportamento quântico, e o sistema apresentará um estado desordenado (paramagnético -P) canônico sem presença de gap. Em temperatura finita ($T > 0$ K) as transições de fases são governadas por flutuações térmicas, refletidas em singularidades nas grandezas termodinâmicas, como, por exemplo, o calor específico $c_o \simeq \langle (\mathcal{H} - \langle \mathcal{H} \rangle)^2 \rangle \approx |T - T_c|^{-\alpha}$ (flutuação da energia, α é o expoente crítico). Devemos mencionar mais uma vez que o formalismo desenvolvido neste capítulo não é capaz de identificar a temperatura de crossover T_o , nem mesmo caracterizar a forma do estado PQ (presença de gap), uma vez que o estado desordenado é caracterizado por apenas ausência de ordem de longo alcance.

Usando as equações de estado (m_μ - parâmetro de ordem) e funcionais da energia livre via formalismo EFT-2 obtemos os diagramas de fases no plano $T - \alpha$ para diversos valores das anisotropias Δ e λ . Na figura 3.28 temos o caso de uma rede $2d$ ($\lambda = 0$) e valores de $\Delta = 0.0, 0.5, 1.0$ (Ising). No limite clássico-Ising ($\Delta = 1$), a temperatura de transição T_N que delimita as fases F e P é de segunda ordem, e decresce monotonicamente com aumento de α , se anulando no ponto $\alpha_c = 0.5$. Para $\alpha > \alpha_c$ e baixa temperatura o estado ordenado é CF, onde a temperatura de transição de fases (CF-P) cresce monotonicamente com o aumento do parâmetro de frustração α . Nesta região temos presença de transição de 1ª ordem em baixas temperaturas e de 2ª ordem em altas temperaturas, onde existe um ponto tricrítico que separa essas duas linhas. Devido ao seu aspecto clássico do Hamiltoniano (Ising) podemos obter a função de partição do sistema F a partir da função de partição do caso AF com a inversão dos spins da subrede (A ou B), desta maneira é possível mostrar que $Z_{AF}(-J) = Z_F(J)$, mesmo com presença de frustração. Portanto, os resultados do diagrama de fase no plano $T - \alpha$ para $\Delta = 1$ (e também para qualquer valor de λ) do caso F são equivalentes ao caso de interação J_1 AF (ver figura 3.19). Na presença de efeitos quânticos ($\Delta \neq 1$) não existe uma matriz unitária em que conseguimos transformar o sistema F no caso AF (i.e., $Z_{AF}(-J) \neq Z_F(J)$), e, portanto, o diagrama de

fases têm comportamentos característicos distintos. Escolhendo $\Delta = 0.5$, na figura 3.28, temos que $T_N(\alpha)$ decresce com o aumento de α , onde no limite de baixas temperaturas não observamos um comportamento reentrante como previsto na figura 3.19 para o caso AF. A linha de transição entre as fases F e P é de segunda ordem na região $\alpha < \alpha_{1c}(\Delta = 0.5) \simeq 0.48$. Nesta região temos que à medida que aumentamos as flutuações quânticas (diminuição do valor de Δ), menos energia térmica será necessária para a destruição do ordenamento F, ou seja, $T_N(\Delta)$ decresce gradualmente com a diminuição do parâmetro Δ no limite isotrópico $\Delta = 0$, de acordo com o Teorema de Mermin e Wagner, em duas dimensões e temperatura finita não temos ordem de longo alcance (F ou AF) e apenas devemos experimentar uma transição quântica em $T = 0 K$ no ponto $\alpha_c(0) \simeq 0.42$. Como vimos anteriormente, em $T = 0 K$ temos uma região intermediária $0.42 \lesssim \alpha \lesssim 0.5$ (PQ) que separa os estados ordenados F e CF. No caso de $J_1 > 0$ (AF) este estado desordenado, que separa os estados AF e CAF, tem uma região ligeiramente superior $0.27 \lesssim \alpha \lesssim 0.67$ quando comparado ao caso F, que podemos atribuir ao aspecto das flutuações quânticas serem mais acentuadas no sistema AF e que é fundamental para existência do estado PQ. Para um dado valor de Δ fixo ($\lambda = 0, 2d$) temos, devido ao efeito de flutuações quânticas mais intensos no sistema AF, que $T_N < T_c$ (T_N e T_c são as temperaturas críticas AF-P e F-P, respectivamente).

Um aspecto interessante da nossa análise está relacionado com a ordem da transição de fases F-P em temperatura finita, que foi mostrado ser de segunda ordem em toda região $\alpha < \alpha_{1c}(\Delta)$, e em temperatura nula (transição de fases quântica) presenciamos uma transição de 1ª ordem. Devido à erros numéricos e divergências nas funções hiperbólicas na resolução de equações não lineares não conseguimos fazer uma análise detalhada no comportamento do tipo de transição na região de baixas temperaturas, ou seja, analisar a temperatura de “crossover” T_o . Suspeitamos que após uma análise mais aprimorada, envolvendo aglomerados maiores no formalismo EFT, devemos obter no caso F transição de primeira ordem para $T < T_o$ e segunda ordem para $T > T_o$, com presença de um ponto tricrítico separando as duas linhas.

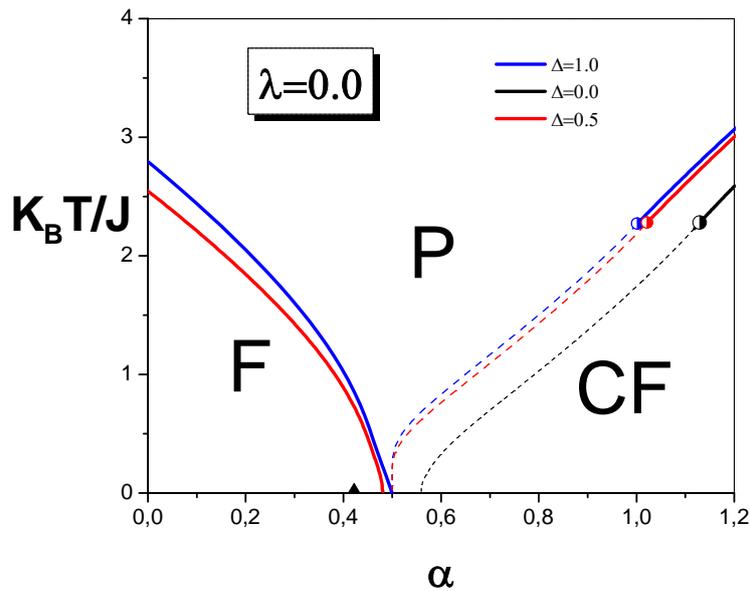


Figura 3.28: Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético anisotrópico na rede quadrada ($\lambda = 0.0$) obtido por Viana EFT-2 para $\Delta = 0.0, 0.5$ e 1.0 . As linhas contínuas correspondem às transições de segunda ordem e as linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e os pontos em meia lua correspondem aos pontos tricríticos. Os símbolos F, CF e P denotam os estados ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético, respectivamente.

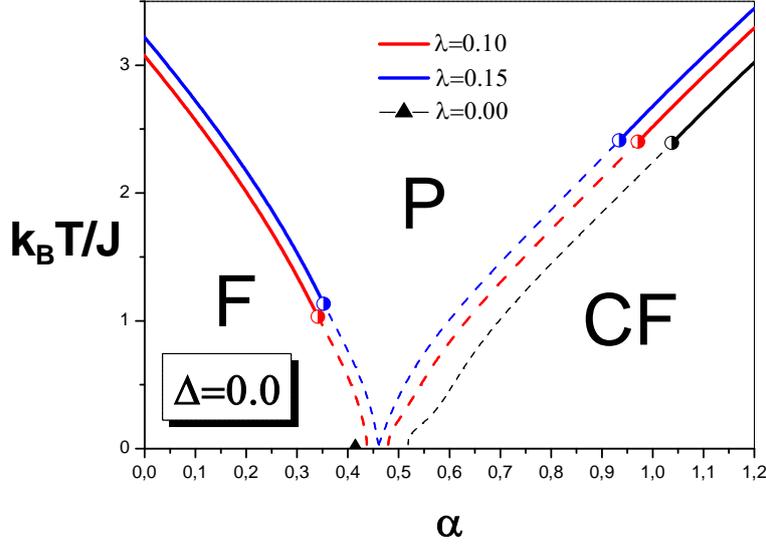


Figura 3.29: Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-2 ($J_1 < 0$) para $\lambda = 0.0, 0.1$ e 0.15 . As linhas contínuas correspondem às transições de segunda ordem e as linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e os pontos em meia lua correspondem aos pontos tricríticos. Os símbolos F, CF e P denotam os estados ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético, respectivamente.

Na região da fase ordenada CF ($\alpha < \alpha_{2c}(\Delta)$; $\alpha_{2c}(1) = 0.5$, $\alpha_{2c}(0.5) = 0.51$, $\alpha_{2c}(0) \simeq 0.52$) temos comportamentos qualitativos semelhantes com presença de transições de 1ª e 2ª ordens, e um ponto tricrítico. Fixando um dado valor de α temos que $T_N(\Delta)$ cresce monotonicamente com aumento da anisotropia Δ , assim como ocorreu na região F ($\alpha < \alpha_{1c}(\Delta)$).

Vamos na sequência analisar como o efeito da dimensionalidade (λ) influencia no diagrama de fases no plano $T - \alpha$ fixando o limite isotrópico ($\Delta = 0$). Temos observado dois tipos diferentes de estruturas de diagramas de fases, que caracterizam os regimes $2d$ e $3d$. Para pequenos valores de $\lambda \leq \lambda_c \simeq 0.16$ temos na figura 3.29 um diagrama de fases qualitativamente semelhante ao apresentado na figura 3.28 para $\lambda = 0$ e diversos valores de anisotropia Δ . Fixando um valor de α temos que $T_N(\lambda)$ cresce monotonicamente com

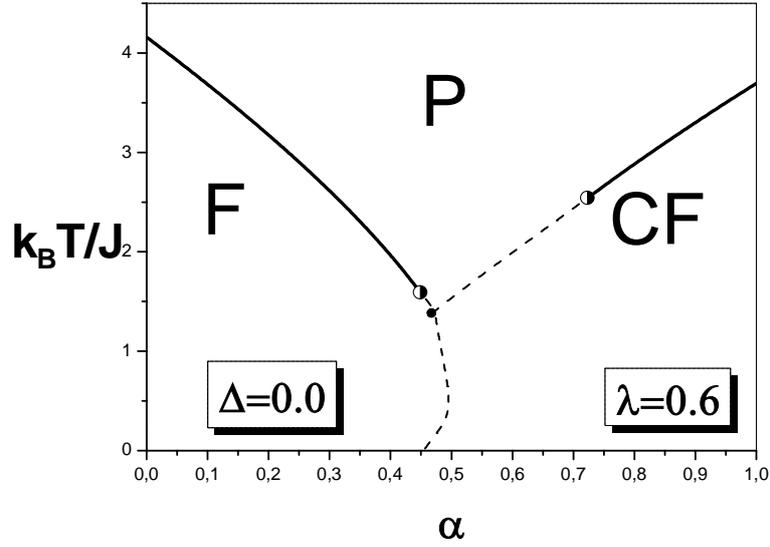


Figura 3.30: Diagrama de fases no plano $T-\alpha$ do modelo J_1-J_2 de Heisenberg ferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-2 ($J_1 < 0$) para $\lambda = 0.6$. As linhas contínuas correspondem às transições de segunda ordem e as linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e o ponto em meia lua corresponde ao ponto tricrítico. Os símbolos F, CF e P denotam os estados ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético, respectivamente. O ponto em negrito corresponde ao ponto triplo.

o aumento de λ , refletindo o aspecto do aumento da dimensionalidade, necessitando-se de mais energia térmica para destruir o ordenamento magnético (F, CF).

Para $\lambda > \lambda_c \simeq 0.16$, o estado intermediário PQ em $T = 0$ é destruído (ver figura 3.22) e teremos na figura 3.27 uma transição direta de primeira ordem entre as fases F e CF no ponto $\alpha \simeq 0.46$. Para $\alpha < \alpha_c$ temos uma transição contínua entre as fases F e P, com um comportamento decrescente de $T_N(\alpha)$ com o aumento do parâmetro de frustração α . Quando $\alpha > \alpha_c$, a transição entre as fases CF e P é de primeira ordem para pequenos valores de α , menores do que o valor no ponto tricrítico, e para altos valores de α temos uma transição de 1ª ordem. Os diagramas de fases no plano $T-\alpha$ obtido para o caso F (figuras 3.26 e 3.27) são qualitativamente semelhantes aos analisados nas figuras 3.20 e 3.21 quando $J_1 > 0$ (AF).

3.6 Método EFT-4

Vamos inicialmente analisar diagramas de fases em $T = 0$ nos planos $\Delta - \alpha$ e $\lambda - \alpha$ para diversos valores de λ e Δ , respectivamente. Nosso objetivo será investigar o efeito do tamanho finito do aglomerado no desenvolvimento do formalismo da teoria de campo efetivo (EFT). Na seção anterior discutimos os resultados via EFT-2 e a seguir analisaremos o caso EFT-4. Veremos, também, como o sinal da interação J_1 ($J_1 > 0$ caso AF, $J_1 < 0$ caso F) influencia os ordenamentos e tipos de transições de fases (1^a ou 2^a ordens).

3.6.1 Caso Antiferromagnético

Transições de Fases Quânticas

Na figura 3.31 temos o diagrama de fases, em $T = 0$, no plano $\alpha - \lambda$ do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg isotrópico ($\Delta = 0$), que podemos comparar com os resultados obtidos via EFT-2 e apresentado na figura 3.13 no limite $\lambda = 0$ ($2d$). A região da fase paramagnética quântica (PQ), que separa os estados ordenados AF e CAF, é ligeiramente maior do que a obtida via EFT-2. No presente cálculo, observamos este estado desordenado na região $0.234 < \alpha < 0.811$, enquanto que em EFT-2 observou-se $0.25 < \alpha < 0.76$. O valor do ponto crítico, onde o estado AF é destruída por frustração magnética, obtido por EFT-4 (EFT-2) foi $\alpha_{1c} = 0.234$ (0.25) que é subestimado em comparação com os resultados mais rigorosos $\alpha_{1c} \simeq 0.40$. Notamos que com o aumento do aglomerado este valor distancia-se ainda mais do ponto crítico quântico $\alpha_{1c} \simeq 0.40$. No caso do ponto α_{2c} , onde temos uma transição de primeira ordem entre as fases PQ e CAF, os nossos valores $\alpha_{2c} = 0.76$ (EFT-2), 0.811 (EFT-4) são superestimados em relação aos valores mais rigorosos $\alpha_{1c} \simeq 0.60$. Mais uma vez verificamos um distanciamento, em relação ao valor $\alpha_{2c} \simeq 0.60$, dos valores com o aumento do aglomerado. Apesar dos nossos resultados não convergirem para os valores considerados rigorosos, na região desordenada o ponto clássico $\alpha_c = 0.5$ está presente que é de vital importância na análise da possível existência

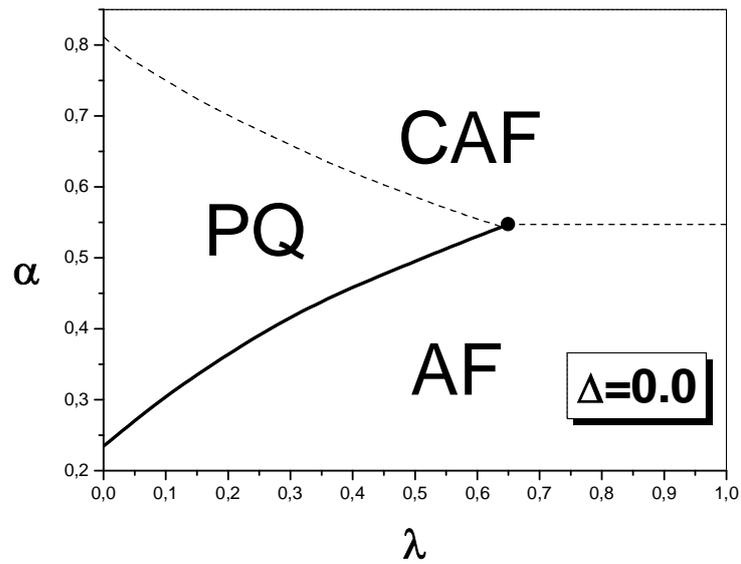


Figura 3.31: Diagrama de fases do estado fundamental no plano $\alpha - \lambda$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg antiferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-4. A linha contínua corresponde à transição de segunda ordem, as linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e o ponto em negrito é o ponto crítico terminal quântico. Os símbolos AF, CAF e PQ denotam os estados fundamentais antiferromagnético, colinear antiferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente.

do estado líquido de spin ao redor deste valor. Neste formalismo da teoria de campo efetivo entendemos a razão de não obtermos um resultado convergente para os pontos de transição α_{1c} e α_{2c} . Vejamos o caso do valor de α_{1c} , que para o aglomerado com $N=2$ spins encontramos um valor subestimado, que com o aumento do aglomerado, no caso para $N=4$, espera-se uma redução gradual da temperatura crítica $T_c(\alpha)$ por causa da inclusão de mais flutuações no sistema, portanto, o valor encontrado por EFT-4 para o ponto crítico quântico também ficará reduzido. Porém, se tivéssemos encontrado inicialmente um valor para α_{1c} superestimado usando EFT-2, certamente, um aumento do aglomerado encontraria uma convergência dos resultados. Devemos alertar que o uso de uma dada metodologia aproximada não garante a priori como os resultados se comportarão em relação aos valores considerados rigorosos (sub ou superestimando). O mesmo raciocínio pode ser utilizado para a interpretação da não convergência do valor α_{2c} . Por outro lado, mesmo os nossos resultados não serem quantitativamente bons em relação aos valores rigorosos, o presente formalismo resgata o comportamento qualitativo com mais precisão. Por exemplo, na sua quase totalidade (exceto apenas no método variacional) os métodos disponíveis na literatura têm indicado que no ponto α_{2c} temos uma transição contínua, enquanto que o nosso formalismo indica ser a transição de primeira ordem, e tem sido aceito por argumento termodinâmico que realmente a transição é descontínua, indicando a correção qualitativa de nossos resultados.

Aumentando o parâmetro λ , que simula a “dimensionalidade”, as flutuações quânticas são reduzidas e a região intermediária fica gradativamente diminuída, desaparecendo por completo para $\lambda \gtrsim \lambda_1 \simeq 0.65$ onde observamos uma transição de 1ª ordem direta entre os estados AF e CAF. Temos então que as duas linhas de 1ª ordem (transições CAF-PQ e CAF-AF) e uma de segunda ordem emergem para um ponto crítico terminal. Diversos métodos têm confirmado a estrutura do diagramas de fases apresentado na figura 3.31, como por exemplo, método do aglomerado acoplado (CCM) [47], função de Green (FG) [47], ondas de spin linear (SWL) [49], e mais recentemente por expansão em série (SE) [50]. Na tabela III.1 temos apresentado os valores estimados para o ponto crítico terminal

Métodos	λ_1	α_1
CCM[47]	0.19	0.50
FG[47]	0.31	0.50
SWL[42]	0.21	0.50
SE[50]	0.16	0.54
Presente trabalho (EFT-2)	0.55	0.50
Presente trabalho (EFT-4)	0.65	0.54

Tabela III.1: Valores estimados para o ponto crítico terminal quântico obtido pelos métodos CCM, FG, SWL, SE, EFT-2 e EFT-4.

quântico obtido por diversos métodos.

Os resultados de ondas de spins linear (SWL) [49] serão descritos em detalhes no próximo capítulo, mas cálculos recentes de ondas de spins não linear (SWNL) [51] têm mostrado que o ponto crítico terminal quântico não existe. Ou seja, SWNL obteve um diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ com presença da fase desordenada em toda região de $\lambda \in [0, 1]$. Certamente, este último resultado está fisicamente incorreto uma vez que o aumento do parâmetro λ diminuirá gradativamente as flutuações quânticas e com isto deve existir um valor característico λ_1 que acima do qual o estado desordenado desaparece. Os resultados obtidos através do método EFT-4 foram publicados recentemente [39] e o valor de λ_1 é superestimado em relação aos outros métodos (CCM, FG, SWL, SE), e aumenta quando comparamos com os resultados de EFT-2. No caso do valor de α_1 temos que os métodos CCM, FG, SWL e EFT-2 encontram o valor fixo $\alpha_1 = 0.5$ correspondente ao valor clássico, enquanto que EFT-4 e SE obtêm praticamente os mesmos valores $\alpha_1 = 0.54$ que é superior ao caso clássico. O valor de $\lambda = \lambda_1$ é considerado o parâmetro que descreve o crossover de dimensionalidade, uma vez que para $\lambda < \lambda_1$ temos a presença do estado PQ que é característico de um sistema $2d$, enquanto que para $\lambda > \lambda_1$ a fase PQ é destruída mostrando que é uma característica do sistema $3d$. O aumento de $\lambda > \lambda_1$ certamente reduz as flutuações quânticas, mas a priori não podemos afirmar que o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg $3d$ quântico de spin- $\frac{1}{2}$ tenha um comportamento em $T = 0$ tipo clássico ($S \rightarrow \infty$). Assim sendo, mesmo que os métodos CCM, FG, SWL e EFT-2 obtenham para $\lambda > \lambda_1$ o valor clássico, e outros métodos como SE e EFT-4 encontrem

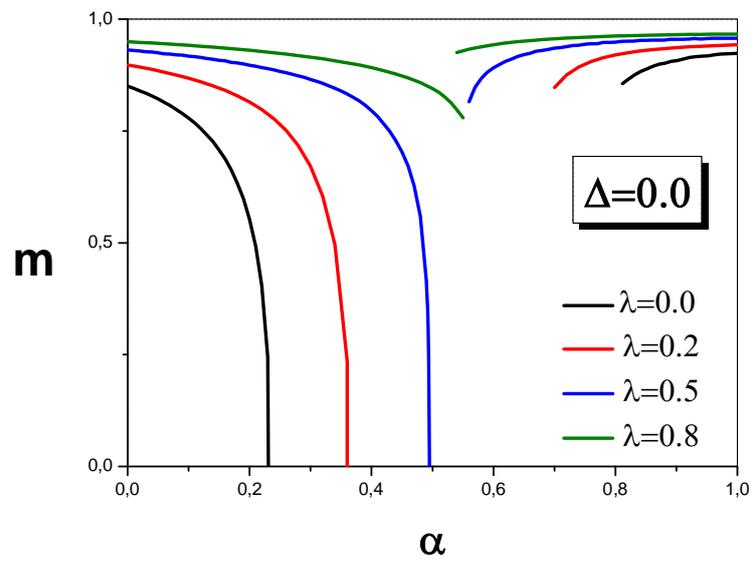


Figura 3.32: Comportamento da magnetização de subrede (parâmetro de ordem) em $T = 0$ dos estados AF e CAF como função do parâmetro de frustração α do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-4 para valores crescentes de λ indicados na figura.

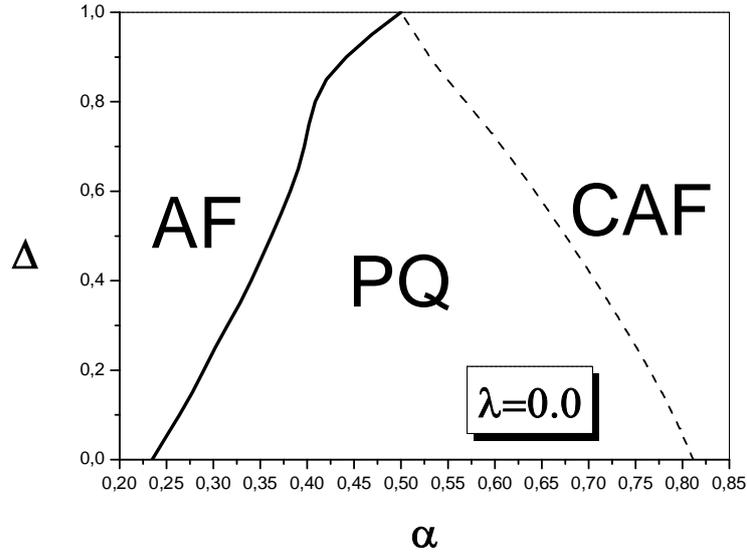


Figura 3.33: Diagrama de fases do estado fundamental no plano $\Delta - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg antiferromagnético anisotrópico obtido via EFT-4. As linhas cheia e tracejada correspondem às transições de segunda e de primeira ordens. Os símbolos AF, PQ e CAF indicam os estados fundamentais antiferromagnético, paramagnético quântico e colinear antiferromagnético, respectivamente.

um valor ligeiramente superior ($\alpha_c = 0.54$), não indica de alguma forma inconsistência física.

O comportamento qualitativo dos parâmetros de ordem das fases AF e CAF como função do parâmetro α é qualitativamente equivalente aos resultados obtidos por EFT-2 e apresentados na figura 3.14. Na figura 3.32 mostramos os resultados de $m_{AF}(\alpha)$ e $m_{CAF}(\alpha)$ como função do parâmetro de frustração α para diversos valores de λ representando as diversas transições de fases mostradas na figura 3.31.

O Diagrama de fases do estado fundamental no plano $\Delta - \alpha$ é mostrado na figura 3.33. O diagrama é completamente análogo ao caso do aglomerado com dois sítios, apenas com uma extensão maior no intervalo de valores de α em $\Delta = 0$ da fase PQ, comparativamente ao caso $N=2$. Apresentamos na figura 3.34 mesmo diagrama $\Delta - \alpha$ com $\lambda = 0.65$. Neste

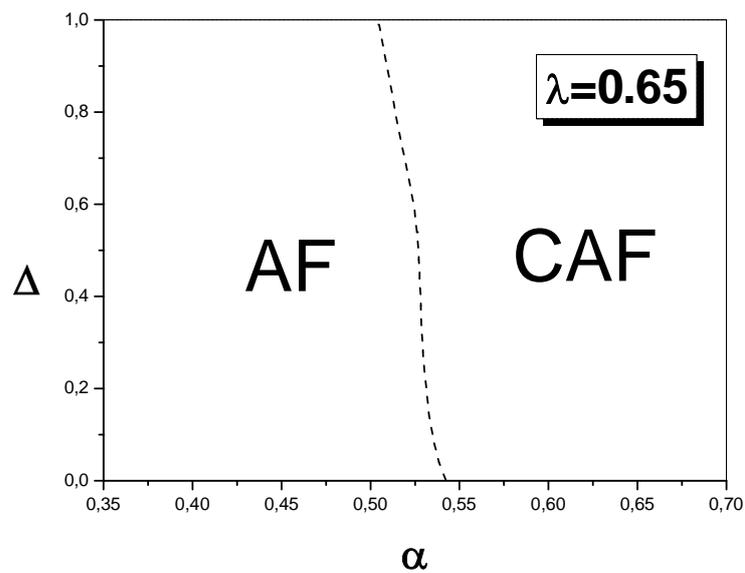


Figura 3.34: Diagrama de fases no plano $\Delta - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg antiferromagnético anisotrópico obtido via EFT-4 para $\lambda = 0.65$. A linha tracejada corresponde à transição de primeira ordem entre os estados fundamentais antiferromagnético (AF) e colinear antiferromagnético (CAF).

caso, apenas duas fases estão presentes, AF e CAF, com uma transição de fases de primeira ordem entre elas para todo intervalo do parâmetro de anisotropia ($0 \leq \Delta \leq 1$).

Transições de Fases Clássicas

Na figura 3.35, mostramos o diagrama de fases no plano $T - \alpha$ com $\lambda = 0.8$. As fases presentes no diagrama são AF, CAF e P, com transições de primeira ($CAF \rightleftharpoons P$ e $AF \rightleftharpoons CAF$) e segunda ordens ($AF \rightleftharpoons P$ e $CAF \rightleftharpoons P$), com um ponto tricrítico (0.76; 2.65) sobre a linha de transição $CAF \rightleftharpoons P$. Este é o correspondente diagrama da figura 3.21 no aglomerado com dois sítios, com um pequeno deslocamento da linha de transição de 1ª ordem $AF \rightleftharpoons CAF$, de $\alpha = 0.505$ (EFT-2) para $\alpha = 0.54$ (EFT-4).

Na figura 3.36, apresentamos o diagrama de fases no plano $T - \alpha$, para vários valores do parâmetro λ de acoplamento entre os planos (0.0, 0.1, 0.3 e 0.5). As fases presentes no diagrama são AF, CAF, P e as transições são de primeira e segunda ordens entre os estados $CAF \rightleftharpoons P$ (com presença de ponto tricrítico) e de segunda ordem $AF \rightleftharpoons P$. Em $T = 0$, e conforme o diagrama 3.31, a fase PQ está presente entre as fases AF e CAF, cuja região de valores de α diminui conforme aumento do parâmetro λ (diminuição das flutuações quânticas). Em $\lambda = 0.65$ (não mostrado no diagrama 3.36) e conforme a figura 3.34 esta fase desaparece.

3.6.2 Caso Ferromagnético

Transições de Fases Quânticas

Na figura 3.37 mostramos o diagrama $\alpha - \lambda$ equivalente ao caso da figura 3.23, em aglomerado com $N=2$ spins. O resultado encontrado em EFT-4 confirma qualitativamente o resultado em EFT-2 com as transições de fase $F \rightleftharpoons PQ$, $F \rightleftharpoons PF$ e $PQ \rightleftharpoons PF$ sendo todas de primeira ordem e um aumento na região de valores de α ($0.347 \leq \alpha \leq 0.568$) em $\lambda = 0$ da fase desordenada PQ. A influência da anisotropia espacial λ no diagrama de fases é verificada para o caso isotrópico ($\Delta = 0$). Para $0 \leq \lambda \lesssim 0.21$ temos a presença

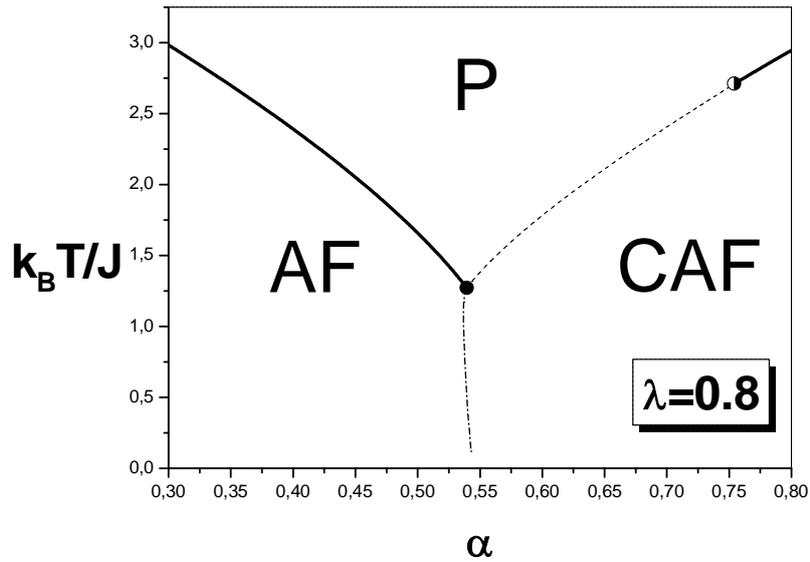


Figura 3.35: Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg anti-ferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-4 para $\lambda = 0.8$. As linhas contínuas correspondem às transições de segunda ordem e as linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem, os pontos em meia lua correspondem aos pontos tricríticos e o ponto em negrito indica o ponto crítico terminal. Os símbolos AF, CAF e P denotam os estados fundamentais antiferromagnético, colinear antiferromagnético e paramagnético, respectivamente. Mostra-se o desaparecimento da fases desordenada em $T = 0$ com transição direta entre as fases AF e CAF.

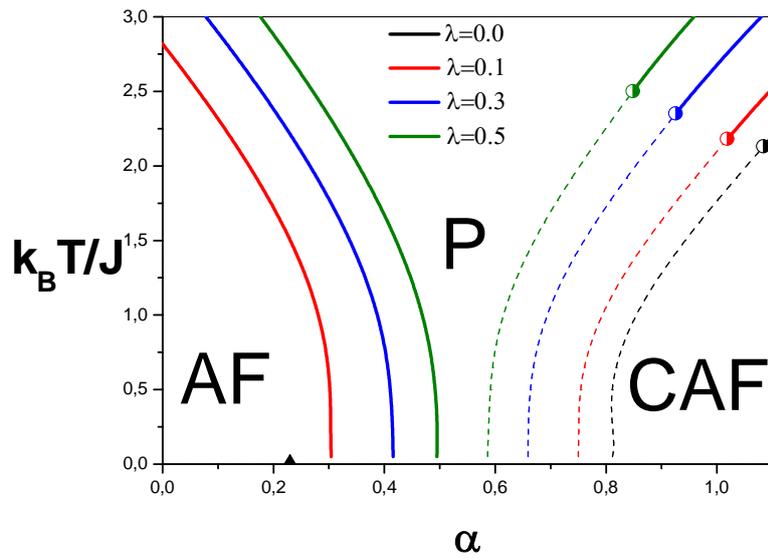


Figura 3.36: Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg antiferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-4 ($J_1 < 0$) para $\lambda = 0.0, 0.1, 0.3$ e 0.5 . As linhas contínuas correspondem às transições de segunda ordem e as linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e os pontos em meia lua correspondem aos pontos tricríticos. Os símbolos AF, CAF e P denotam os estados antiferromagnético, colinear antiferromagnético e paramagnético, respectivamente.

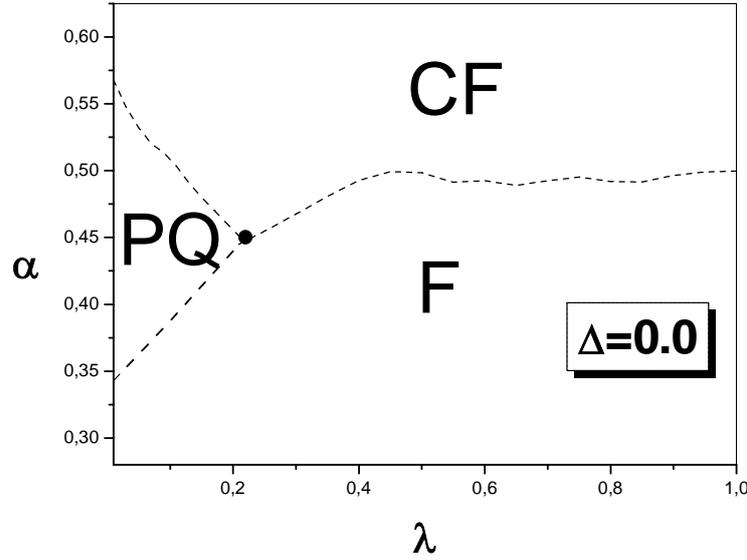


Figura 3.37: Diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-4 ($J_1 < 0$). As linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e o ponto em negrito é o ponto triplo quântico. Os símbolos F, CF e PQ denotam os estados fundamentais ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente.

da ordem PQ que desaparece em $\lambda = 0.21$ e $\alpha = 0.45$, aproximadamente, com transição direta entre as fases $F \rightleftharpoons PF$. A partir desse ponto α cresce monotonicamente com λ até o valor $\alpha = 1/2$ em $\lambda = 0.43$ se estabilizando neste valor até $\lambda = 1$. Em $\lambda = 1$ temos $\alpha_c(\lambda = 1) = 0.5$ quando $\Delta \neq 1$, diferentemente do resultado encontrado no formalismo EFT-2 devido ao tamanho do aglomerado.

As magnetizações das fases F e CF, em função do parâmetro α de frustração no estado fundamental são apresentadas no diagrama da figura 3.38, para $\lambda = 0.1$. Mostra-se as transições descontínuas entre as fases $F \rightleftharpoons PQ$ e $PQ \rightleftharpoons CF$, nesse regime de temperaturas e ausência de flutuações quânticas na ordem F com $m = 1$ em todos os valores de α que caracterizam esta fase. Verifica-se ainda que a presença de frustração no sistema é incapaz de desestabilizar a fase F, ao contrário do que acontece com o correspondente

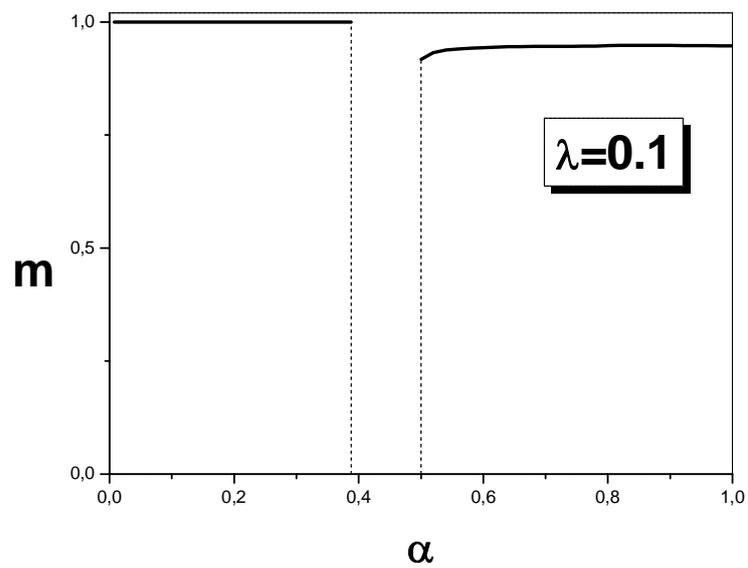


Figura 3.38: Magnetizações dos estados F e CF no estado fundamental ($T = 0$) e com parâmetro de interação entre planos $\lambda = 0.1$ no limite isotrópico ($\Delta = 0$) em aglomerado com $N = 4$ spins.

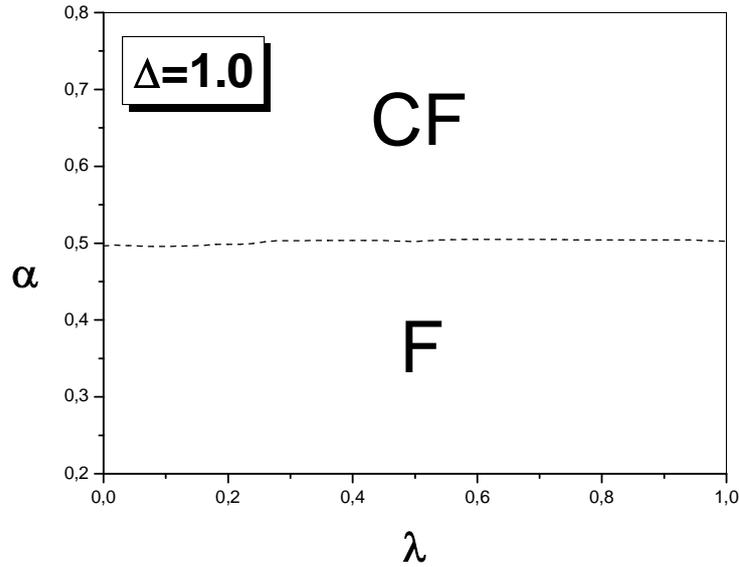


Figura 3.39: Diagrama de fases no plano $\alpha-\lambda$ do modelo J_1-J_2 Ising obtido via EFT-4. A linha tracejada corresponde à transição de primeira ordem. Os símbolos F e CF denotam os estados fundamentais ferromagnético e colinear ferromagnético, respectivamente.

caso AF (ver figura 3.32), na região $0 \leq \alpha \lesssim 0.38$ com uma transição descontínua $F \rightleftharpoons PQ$ em $\alpha \simeq 0.38$ ($\lambda = 0.1$).

Na figura 3.39 apresentamos o limite Ising ($\Delta = 1$) com transição direta e de primeira ordem entre as fases F e CF (ausência de flutuações quânticas) em todo intervalo de valores de λ . Para a rede quadrada ($\lambda = 0$) construímos o diagrama de fases $\Delta - \alpha$, que apresenta as fases F, PF e PQ, com as linhas de transição de primeira ordem entre elas (figura 3.40). A fase PQ existe em todo intervalo do parâmetro de anisotropia ($0 \leq \Delta \leq 1$). Verificamos a correção do diagrama equivalente em $N=2$ (figura 3.25), com a ausência da fase PQ no limite Ising do modelo ($\Delta = 1.0$). No limite isotrópico a fase PQ se estende no intervalo de valores, $0.345 < \alpha \lesssim 0.57$. Fazendo $\lambda = 0.1$, observa-se a transição direta entre as fases F e CF para $\Delta \geq 0.419$ ($\alpha = 0.466$) e a presença da fase PQ abaixo desse valor da anisotropia. Novamente como já comentado no caso EFT-2 (figura

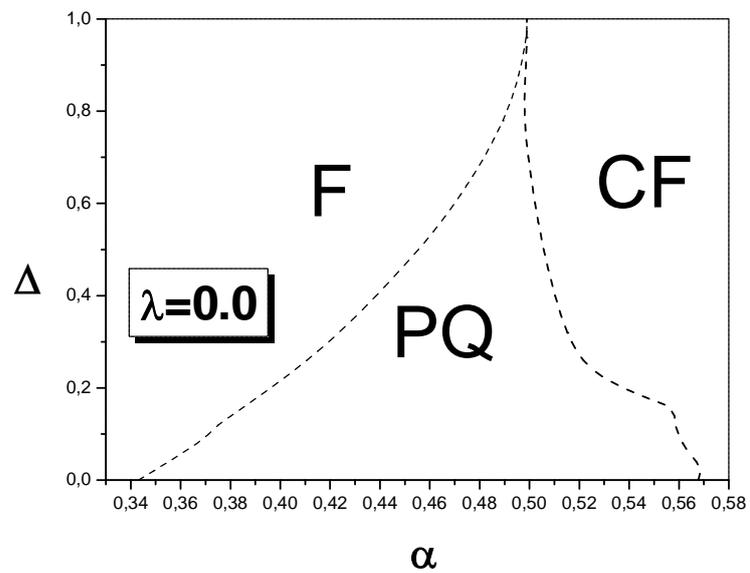


Figura 3.40: Diagrama de fases no plano $\Delta-\alpha$ do modelo J_1-J_2 de Heisenberg ferromagnético obtido via EFT-4 na rede quadrada ($\lambda = 0.0$). As linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem. Os símbolos F, CF e PQ, indicam os estados fundamentais ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente.

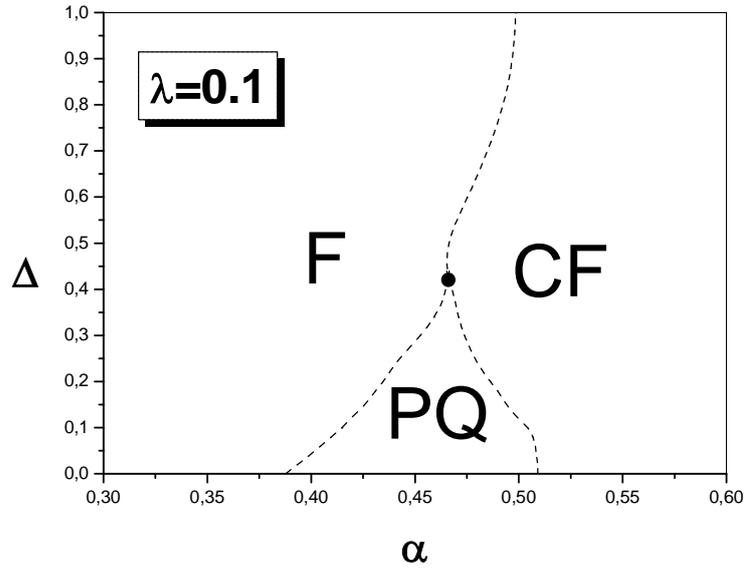


Figura 3.41: Diagrama de fases no plano $\Delta - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético anisotrópico obtido via EFT-4 ($J_1 > 0$) para $\lambda = 0.1$. As linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem. Os símbolos F, CF e PQ, indicam os estados fundamentais ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente. O ponto em negrito corresponde ao ponto triplo quântico.

3.26) e diferente do caso AF, temos um aumento gradual em $\alpha_c(\Delta)$ com o aumento de Δ até atingir o limite $\alpha = 1/2$ quando $\Delta = 1.0$ na linha de transição $F \rightleftharpoons CF$. Mostra-se ainda (figura 3.42) as duas únicas fases presentes no diagrama (F e CF) quando $\lambda = 0.21$, valor superior ao previsto no caso com $N=2$ (figura 3.27) onde $\lambda = 0.153$.

Transições de Fases Clássicas

Apresentamos na figura 3.43 o diagrama de fases $T - \alpha$, com as fases F, P e CF presentes e as transições $F \rightleftharpoons P$ e $P \rightleftharpoons CF$ de segunda e primeira ordem ($T \neq 0$ K), respectivamente, no limite isotrópico ($\Delta = 0$).

No estado fundamental ($T = 0$) as transições $F \rightleftharpoons PQ$ e $PQ \rightleftharpoons CF$ são de primeira ordem. Em $\lambda = 0$, a fase F só é ordenada em $T = 0$ de acordo com o Teorema de

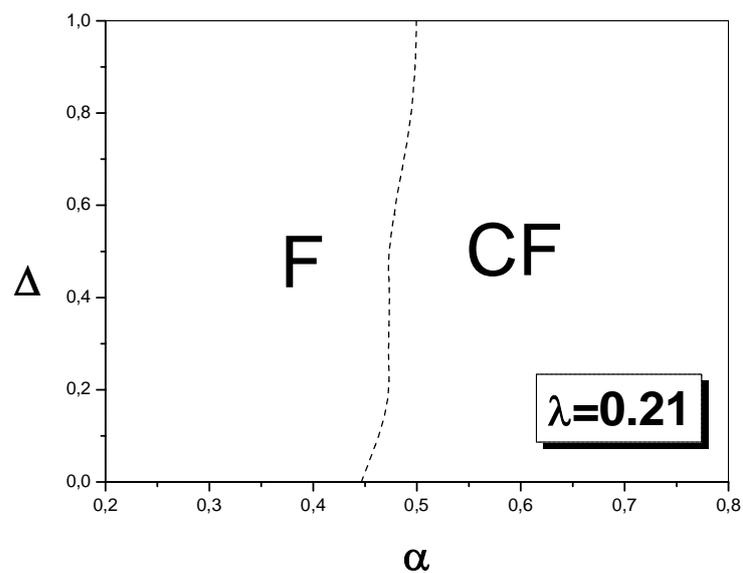


Figura 3.42: Diagrama de fases no plano $\Delta - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético anisotrópico obtido via EFT-4 para $\lambda = 0.21$. A linha tracejada corresponde a transição de primeira ordem. Os símbolos F e CF, indicam os estados fundamentais ferromagnético e colinear ferromagnético, respectivamente.

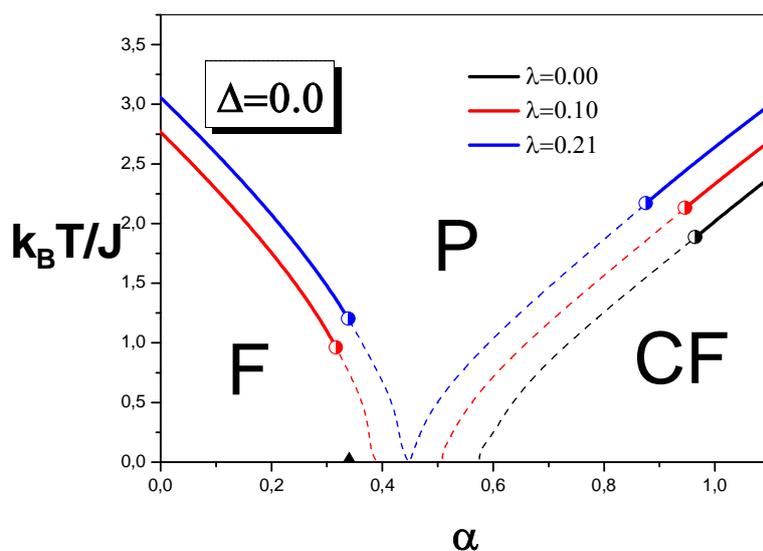


Figura 3.43: Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-4 ($J_1 < 0$) para $\lambda = 0.0, 0.1$ e 0.21 . As linhas contínuas correspondem às transições de segunda ordem, as linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e os pontos em meia lua correspondem aos pontos tricríticos. Os símbolos F, CF e P denotam os estados ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético, respectivamente.

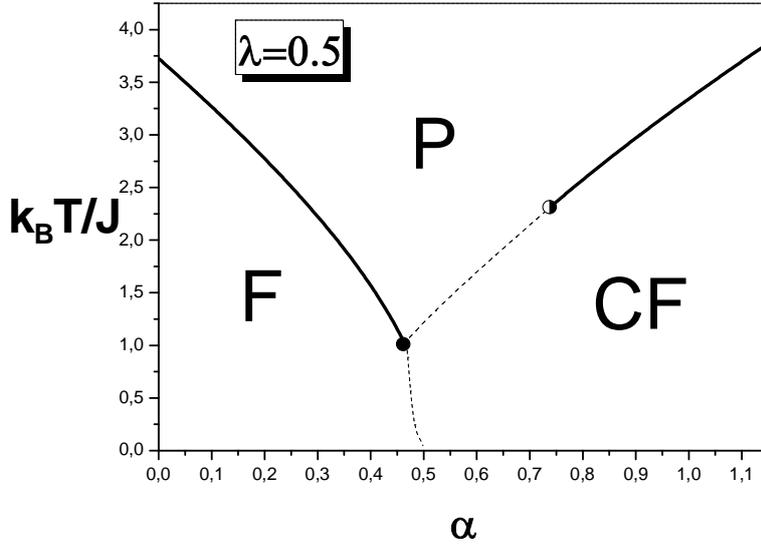


Figura 3.44: Diagrama de fases no plano $T - \alpha$ do modelo $J_1 - J_2$ de Heisenberg ferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via EFT-4 ($J_1 < 0$) para $\lambda = 0.5$. As linhas contínuas correspondem às transições de segunda ordem, as linhas tracejadas correspondem às transições de primeira ordem e o ponto em meia lua corresponde ao ponto tricrítico. Os símbolos F, CF e P denotam os estados ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético, respectivamente. O ponto em negro corresponde ao ponto crítico terminal.

Mermin-Wagner, com os valores de α no intervalo $\alpha \leq 0.347$. A fase CF é ordenada mesmo em duas dimensões como no caso CAF, com $\alpha \geq 0.57$. O comportamento é qualitativamente análogo ao caso em EFT-2 (Fig.3.29). Verifica-se também a presença da fase PQ ($0.345 < \alpha < 0.57$) no estado fundamental do sistema em duas dimensões ($\lambda = 0$). Com aumento do parâmetro λ as fases F e CF tornam-se cada vez mais estáveis, com o sistema necessitando de maior energia térmica para que ocorra as transições $F \rightleftharpoons P$ e $P \rightleftharpoons CF$ em cada região de domínio α de suas fases. Escolhendo $\lambda = 0.5$ verificamos a transição de 1ª ordem entre as fases F e CF no regime de baixas temperaturas (ver figura 3.44). Em altas temperaturas as transições são de 1ª e 2ª ordens (presença de ponto tricrítico) entre as fases P e CF e de 2ª ordem entre as fases F e P.

Referências

- [1] A. G. J. Ligtenbarg, R. Hage e B. L. Feringa. “Catalytic oxidations by vanadium complexes”. *Coordination Chemistry Reviews* **237**, 89–101 (2003).
- [2] M. Fukuma, S. Zembutsu e S. Miyazawa. “Preparation of VO_2 thin film and its direct optical bit recording characteristics”. *Applied Optics* **22**, 265–268 (1983).
- [3] W. R. Roach. “Holographic Storage in VO_2 ”. *Applied Physics Letters* **19**, 453–455 (1971).
- [4] D. C. Crans, J. J. Smee, E. Gaidamauskas e L. Yang. “The Chemistry and Biochemistry of Vanadium and the Biological Activities Exerted by Vanadium Compounds”. *Chemical Reviews* **104**, 849–902 (2004).
- [5] H. Michibata, N. Yamaguchi, T. Uyama e T. Ueki. “Molecular biological approaches to the accumulation and reduction of vanadium by ascidians”. *Coordination Chemistry Reviews* **327**, 41–51 (2003).
- [6] P. B. Rupert, A. P. Massey, S. Th. Sgurðsson e A. R. Ferré-D’Amaré. “Transition State Stabilization by Catalytic RNA”. *Science* **298**, 1421–1424 (2002).
- [7] S. Meyer, B. Mertens, e Hk. Müller-Buschbaum. “ $SrZnVO(PO_4)_2$ und $BaCdVO(PO_4)_2$: Zum $BaZnVO(PO_4)_2$ -Typ verwandte, jedoch nicht isotype Vanadylphosphate”. *Zeitschrift für Naturforschung* **52b**, 985–988 (1997).

- [8] P. Millet and C. Satto. “Synthesis and Structure of the layered vanadyl (IV) Silico-Germanates $Li_2VO(Si_{1-x}Ge_x)O_4$ ($x=0, 0.5, 1$)”. *Materials Research Bulletin* **33**, 1339–1345 (1998).
- [9] R. Melzi, P. Carretta, A. Lascialfari, M. Mambrini, M. Troyer, P. Millet e F. Mila, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1318-1321 (2000).
- [10] R. Melzi, S. Aldrovandi, F. Teodoldi, P. Carretta, P. Millet e F. Mila. “Magnetic and thermodynamic properties of Li_2VOSiO_4 : A two-dimensional $S = 1/2$ frustrated antiferromagnet on a square lattice”. *Physical Review B* **64**, 024409 (2001).
- [11] H. Rosner, R. R. P. Singh, W. H. Zheng, J-Oitamaa, S. L. Dreechsler e W. E.Pickett, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 186405 (2002).
- [12] G. Misguich, B. Bernu e L. Pierre, *Phys. Rev. B* **68**, 1134409 (2003).
- [13] S. T. Bramwell e P. C. W. Holdsworth, *J. Phys. Cond. Matter.* **5**, 153 (1993); *ibid Phys. Rev. B.* **49**, 8811 (1994).
- [14] S. Pati, R. Chitra, D. Sen e H. R. Krishnamusthy, *Europhys. Lett* **33**, 707-712(1996).
- [15] A. K. Kolezhuk e U. Schollwock, *Phys.Rev. B* **65**, 100401-100404 (2002)
- [16] N. Read e S. Sachdev, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1694 (1989).
- [17] S. Moukouri, *Phys. Lett. A* **352**, 256 (2006).
- [18] P. Chandra e B. Doucot, *Phys. Rew. B.* **48**, 9535 (1988).
- [19] Ver Tese de Doutorado de J.R.Viana, *Transição de Fase Quântica e Modelos de Spins Frustrados*, UFSCar (2007).
- [20] J. Ricardode Sousa, I. G. Araújo, *J. Mag. Mag.* **202**, 231 (1999). Ver também tese de doutorado de Ijanílio Araújo, *Estudo Sistemático da Fase Antiferromagnética do Modelo de Heisenberg Anisotrópico*, UFSCar (2004).

- [21] J. Cabral Neto, J. Ricardode Sousa, J. A. Plascak, *Phys. Rev. B* **66**, 064417 (2002).
- [22] P. Chandra e B. Daucot, *Phys. Rev. B* **38**, 9335 (1998).
- [23] L.B. Ioffe e A. I. Larkin, *Mod. Phys. B* **2**, 203 (1988).
- [24] N.B. Ivanov e J. Richter, *J. Phys. Cond. Matter.* **6**, 3785 (1994).
- [25] H. J. Shulz, T. A. L. Ziman e D. Poiblanç, *J.Phys.IFrance* **6**, 675 (1996); H. J. Shulz e T. A. L. Ziman, *Europhys. Lett.*, **18**, 355 (1992).
- [26] J. Richter, N. B. Ivanov e K. Retzlaff, *Europhys. Lett.* **25**, 545 (1994).
- [27] R. R. P. Singh, Zheng Weihong, C. J. Hamer e J. Oitmaa, *Phys,Rev. B* **60**, 7278 (1999).
- [28] L.Capriotti e S. Sorella, *Phys.Rev. Lett.* **92**, 157202 (2004).
- [29] C. Weber, F. Becca e F. Mila, *Phys. Rev. B* **72**, 24449 (2005).
- [30] L. Spanu e A. Parola, *Phys. Rev. B* **73**, 944427 (2006); V. Lante e A. Parola, *Phys. Rev. B* **73**, 94427 (2006).
- [31] R. Darradi, J. Richter e D. J. J. Farnell, *Phys. Rev.B* **72**, 104425 (2005).
- [32] J. Sirker, Zheng Weihong, O. O. Sushkov e J. Oitama, *Phys. Rev.B* **73**, 184420 (2006).
- [33] P. Sindzingre, *Phys. Rev. B* **69**, 94418 (2004).
- [34] J. Richter, R. Darradi, J. Schulenburg, D. J. J. Farnell e H. Rosner, *Phys. Rev.B* **81**, 174429 (2010).
- [35] J. Roberto Viana e J. Ricardo de Sousa, *Phys. Rev.B* **75**, 052403.
- [36] Rosana A. dos Anjos, J. Roberto Viana e J. Ricardo de Sousa, *Phys. Rev.E* **76**, 022103 (2007).

- [37] Octávio Salmon, J. Ricardo de Sousa e F. D. Nobre, *Phys. Lett. A* **373**, 2525 (2009).
- [38] J. Roberto Viana, J. Ricardo de Sousa e M. A. Continentino, *Phys. Rev.B* **77**, 172412 (2008).
- [39] W. A. S. Nunes, J. Ricardo de Sousa e J. Roberto Viana, *J. Phys. Cond. Matter* **22**, 146004 (2010).
- [40] Griffith Mendonça, Rodrigo Lapa, J. Ricardo Sousa, Minos Neto, K. Majumdar e T. Datta, *J.Stat.Mech.* **06**, 06022 (2010).
- [41] Rosana A. dos Anjos, J. Roberto Viana e J. Ricardo de Sousa, *Phys.Lett.A* **372**, 1180 (2008).
- [42] N. Shannon, B. Schmidt, K. Penc e P. Thalmeier, *Eur. Phys. J. B* **38**, 599 (2004).
- [43] N. Shannon, T. Momoi e P. Sindzingre, *Phys.Rev. Lett.* **96**, 027213 (2006).
- [44] P. Sindzingre, N. Shannon e T. Momoi, *J. Magn. Magn. Mat.* **310**, 1340 (2007).
- [45] D. V. Dmitriev, V. Ya. Krivnov e A.A. Ovchinnikov, *Phys. Rev.B* **55**, 3620 (1997).
- [46] M. Hartel, J. Richter, D. Ihle e S. L. Drechaler, *Phys. Rev.B* **81**, 174421 (2010).
- [47] S. Schmalfuß, R. Darradi, J. Richter, J. Schulenburg e D. Ihle, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 1572011 (2006).
- [48] Dissertação de Mestrado Rosana Aparecida dos Santos, *Modelo de Ising com interações competitivas: Efeitos de Campo Externo e Frustração*, UFAM (2006).
- [49] W. A. S. Nunes, J. Roberto Viana e J. Ricardo de Souza, *J. Est. Mechan.: Theory and Experiment*, **P05019** (2011).
- [50] Onofre Rojas, C. J. Hamer e J. Oitmaa, preprint (2011)- *Cond-Mat. arxiv: 1103.1679v1*.

[51] K. Majumdar, *J. Phys. Cond. Mat.* **23**, 046001 (2011).

[52] P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1993).

Capítulo 4

Teoria de Ondas de Spins

4.1 Introdução

Desde a descoberta casual da pedra de magnetita, que apresentava a propriedade de atrair pedaços de ferro, o homem vem tentando entender o mecanismo deste fenômeno. Foi somente a partir do século XX, com o advento da mecânica quântica, que a origem microscópica das propriedades magnéticas dos materiais foi compreendida, em particular, com a formulação da energia de troca por Heisenberg e conseqüentemente com a proposta de um Hamiltoniano (Heisenberg), que descreve as interações microscópicas entre os spins de uma rede cristalina.

A descrição microscópica de um sólido magnético envolve três problemas distintos: i) a natureza dos portadores de momento magnético; ii) a origem da interação entre eles e iii) a termodinâmica do sistema constituído por um conjunto (N) muito grande de momentos magnéticos interagentes. Neste trabalho, restringiremo-nos à termodinâmica de sistemas de spins localizados, onde as interações serão consideradas como parâmetros da teoria. Estas hipóteses definem completamente um modelo de partida (Hamiltoniano), sobre o qual se deve construir uma teoria apropriada para descrever a termodinâmica. Esta teoria tem que ser capaz de descrever as propriedades termodinâmicas em função dos parâmetros intensivos (temperatura, campo magnético,...), dos parâmetros de interação

e da estrutura cristalina do sólido em estudo. A natureza deste problema se coloca dentro do espírito da teoria de muitos corpos, haja vista que as interações envolvem excitações elementares de caráter coletivo. Por outro lado, pelas características do problema aqui definido, a teoria de muitos corpos deve ser estendida para poder incluir as peculiaridades inerentes ao modelo de partida, além das excitações de caráter coletivo comuns a outros problemas em que estas teorias se aplicam. Em particular, o problema dos momentos localizados interagentes envolve na sua termodinâmica dois aspectos distintos: o primeiro deles é o caráter coletivo mencionado acima, e o segundo é que a descrição da termodinâmica deve levar em consideração também a cinemática dos momentos localizados, que está associada às propriedades locais (não temporais) das relações existentes na álgebra de spins, como, por exemplo, da construção do operador nulo,

$$\prod_{r=-s}^s (r - S_i^\nu) = 0 \quad (4.1)$$

onde $\nu = x, y, z$ são as componentes do spin, e do índice de nilpotência dos operadores de abaixamento e levantamento

$$(S_i^\pm)^{2S+1} = 0. \quad (4.2)$$

Uma teoria de muitos corpos é construída com a necessidade de descrever as propriedades internas na matéria, constituída por um conjunto ($\simeq 10^{24}$) muito grande de partículas interagentes e suas respostas a uma perturbação externa. No sólido em especial estamos interessados em conhecer cada característica de um sistema, tais como seu espectro de energia, os valores médios dos observáveis físicos relacionados à termodinâmica, as probabilidades de transição e suas características dinâmicas.

A teoria de muitos corpos representa um método eficiente para resolver um dado modelo (descrito por um Hamiltoniano) em termos de alguma aproximação. Dentre um universo extenso de formalismos de muitos corpos, as teorias da campo efetivo têm se mostrado adequadas para estudar as propriedades termodinâmicas em todo o intervalo de temperatura, superestimando os valores destas grandezas quando comparadas com

métodos mais elaborados, como, por exemplo, Monte Carlo e expansão em séries. No capítulo anterior desenvolvemos uma teoria de campo efetivo para investigar a transição de fases quântica, e foi mostrado que essa metodologia é eficaz na descrição de diversos modelos teóricos.

A teoria de muitos corpos depende fortemente dos métodos teóricos de campo, onde o método da segunda quantização é uma ferramenta essencial muito simples e compacta. Nesse método, o conceito de partícula é de pouca importância, e esta é substituída por excitações elementares, que são os quanta de um campo contínuo, denotados por $\Psi(\vec{r})$ e $\Psi^\dagger(\vec{r})$. Neste formalismo de teoria quântica de campos a energia de interação entre as partículas são representadas em termos desses operadores $\Psi(\vec{r})$ e $\Psi^\dagger(\vec{r})$. É importante salientar que o número de partículas no processo de interação não é geralmente conservado, e também, o processo de excitações elementares de um sistema pode ser representado por uma **quase-partícula**.

Estudando o comportamento termodinâmico em baixas temperaturas dos materiais ferromagnéticos, modelados pelo Hamiltoniano de Heisenberg, Felix Bloch [1,2], em 1930, introduziu o conceito de ondas de spins. No estado fundamental ($T = 0$), os spins do ferromagneto se encontram alinhados paralelamente, i.e, $|\varphi_o\rangle = |S, S, \dots, S\rangle$. A onda de spin corresponde à propagação dos desvios dos spins coerentemente sobre a rede cristalina, decorrente da interação microscópica entre os spins para $T \ll T_c$. Exemplos típicos de materiais ferromagnéticos são *Fe*, *Ni*, *Co* e *Dy*. A idéia central desse formalismo consiste em fazer associação entre redes de spins interagentes com uma rede de osciladores acoplados, com os modos normais de oscilação designados por mágnons, correspondente ao quantum das excitações. Usando um tratamento semi-clássico, Bloch mostrou que os estados excitados próximos do estado fundamental podem ser descritos pela superposição de ondas desse tipo e o comportamento da magnetização espontânea em baixas temperaturas é dada por

$$M \simeq M_o - AT^{3/2}, \quad (4.3)$$

onde $M_o = M(T = 0 \text{ K})$ é a magnetização de saturação e a constante A , bem como M_o ,

depende do material. A Eq.(4.3) foi confirmada experimentalmente, e é conhecida na literatura como lei $T^{3/2}$ de Bloch.

Inicialmente, as evidências experimentais das ondas de spin eram feitas através de medidas das propriedades termodinâmicas. Atualmente, existe uma variedade de técnicas experimentais para estudar os processos linear e não linear envolvendo as excitações elementares das ondas de spins, como, por exemplo, espalhamento inelástico de luz ou partículas (nêutrons), espectroscopia de micro-ondas e várias formas de ressonância magnética.

A superposição linear das ondas de spin de Bloch enfrentou as seguintes objeções:

1) o número de spins da rede é **finito** e, portanto, deve ser considerado algum tipo de interação que limite o número de ondas excitáveis. Essa interação local foi denominada por Dyson [3] de *interação cinemática*.

2) a energia para a inversão de spins localizados na vizinhança de um spin invertido é menor do que a energia para a inversão de spins alinhados e isto dá origem à *interação dinâmica*.

O tratamento matemático feito até então por Bloch no estudo das ondas de spins nos ferromagnetos foi semiclássico, uma vez que usou a equação de movimento na descrição da dinâmica dos spins (segunda lei de Newton do movimento de rotação) descrita através do Hamiltoniano de Heisenberg que descreve microscopicamente as interações entre os spins localizados numa rede cristalina. Desta maneira, Bloch numa primeira aproximação, que fisicamente é aceitável no regime de baixas temperaturas ($T \ll T_c$), obteve uma dinâmica dos spins correspondendo à precessão dos spins em torno da posição de equilíbrio (eixo z), acoplados coerentemente através da energia de troca. A frequência de precessão (relação de dispersão) apresenta um comportamento quadrático com o vetor de onda ($\omega \approx k^2$), que é uma característica marcante dos ferromagnetos.

O tratamento quântico das ondas de spin foi somente formulado na década de 40 por Holstein e Primakoff [4], usando um conjunto de coordenadas que caracteriza precisamente o estado quântico do sistema de spins, onde definiram uma transformação de

operadores de spins em termos das amplitudes das ondas de spins. Da maneira na qual foi definida a transformação, proíbe-se o surgimento de estados com desvios de spins maiores que $2S$, onde S é a magnitude do spin. Essa exigência é necessária para garantir a biunivocidade da transformação, limitando o número e as amplitudes das ondas excitáveis para um número finito de spins na rede. A teoria de ondas de spin é extremamente útil e precisa para descrever as propriedades estáticas e dinâmicas no regime de baixas temperaturas.

O Hamiltoniano de Heisenberg ferromagnético escrito a partir das transformações HP (Holstein e Primakoff) se compõe de um termo quadrático na amplitude das ondas de spins, correspondente à superposição linear de Bloch, e os termos de ordens superiores representam as interações dinâmicas. Através deste formalismo, a lei $T^{3/2}$ de Bloch foi deduzida, mas as correções dinâmicas não foram exploradas. As primeiras tentativas nesse sentido foram feitas por Schafroth [5], em 1954, e por van Kranendonck [6], em 1955, onde ambos usaram o formalismo HP obtendo espuriamente correções na magnetização da ordem de $T^{7/4}$ e T^2 na temperatura, não confirmadas experimentalmente nos materiais ferromagnéticos. Em 1956, Dyson [3] apresentou um cálculo rigoroso da forma assintótica da energia livre em termos das ondas de Bloch, levando em consideração as interações cinemáticas e dinâmicas, num tratamento análogo ao de teoria de campo com interações fracas na eletrodinâmica quântica. Neste trabalho estabelece-se a inexistência dos termos $T^{7/4}$ e T^2 na magnetização espontânea, cuja origem estaria no tratamento inadequado da interação cinemática. Segundo Dyson, a contribuição dessa interação é desprezível e a contribuição da interação dinâmica é da ordem em T^4 , obtendo assim uma expansão assintótica do tipo

$$M(T) \simeq M_o - a_1 T^{3/2} - a_2 T^{5/2} - a_3 T^{7/2} - a_4 T^4, \quad (4.4)$$

onde as potências semi-inteiras da temperatura são devidas às ondas de spins livres (cinemática) e a quarta potência da temperatura é devida às interações entre elas (dinâmica).

Em 1960, Oguchi [7] fez uma expansão rigorosa do Hamiltoniano de Heisenberg com as transformações HP em ordem S^{-1} e reproduziu o resultado de Dyson. Nesta expansão foi incluída as interações entre as ondas de spins que são responsáveis pelo termo T^4 da Eq.(4.4). O estado fundamental do ferromagneto de Heisenberg é bem caracterizado com todos os sítios da rede no estado $S_i^z = S$ em qualquer dimensão. Em temperatura finita e baixa dimensão $d \leq 2$, o sistema não apresenta ordem de longo alcance, segundo o teorema de Mermin-Wagner [8]. Uma generalização deste teorema, para incluir interação de longo alcance, foi feita recentemente por Bruno [9]. Entretanto, a presença de anisotropia, por exemplo, em duas dimensões ($d = 2$) pode induzir ordem de longo alcance em baixa temperatura ($T < T_c$) [9,10,11].

Por outro lado, o estado fundamental antiferromagnético do modelo de Heisenberg quântico não é conhecido exatamente. O estado clássico AF (Neél), que é caracterizado por apresentar spins antiparalelos sobre toda a rede cristalina, não é auto-estado do Hamiltoniano de Heisenberg quântico. Isso mostra claramente que flutuações quânticas desempenham um papel muito mais importante em antiferromagnetos (quânticos) que em ferromagnetos. Por exemplo, uma cadeia ferromagnética em $T = 0 K$ (estado fundamental) é ordenado apresentando todos os spins no estado $S_i^z = S$, enquanto o caso antiferromagnético com apenas interação entre primeiros vizinhos não apresenta ordem de longo alcance. No início dos anos 30, Bethe e Hulthén [12] aplicaram o que hoje co-nhecemos por *ansatz de Bethe* e mostraram que a cadeia de Heisenberg quântica de spin $1/2$ é um modelo integrável. O estado fundamental (exato) é não degenerado, exibindo somente correlações de curto alcance, mas nenhuma ordem de longo alcance foi estabelecida. O espectro de excitação é sem gap, e é um protótipo de um sistema quântico crítico (desordenado). Nos anos 60, Lieb, Schultz e Mattis [13] provaram um importante teorema que garante que uma cadeia de spins $S = 1/2$ ou tem um estado fundamental degenerado ou é sem gap. Este teorema foi estendido para todos os valores de spin semi-inteiro, e, inicialmente, pensava-se que fosse válido também para spin inteiro.

No caso de uma cadeia Heisenberg AF com spins inteiros as propriedades são bem

diferentes do que para spins semi-inteiros: conjectura de Haldane [14]. Segundo esta conjectura, para valores de spins inteiros o sistema exibe um gap no espectro, ou seja, o primeiro estado de energia mais baixa é separado do estado fundamental por uma diferença de energia. A conjectura de Haldane tem sido comprovada experimentalmente em diversos compostos magnéticos quase unidimensionais como, por exemplo, $CsNiCl_3$ [15], $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2(ClO_4)$ (NENP)[16], $Ni(C_3H_{10}N_2)_2N_3(ClO_4)$ (NINAZ) [17] e Y_2BaNiO_5 [18]. Estes materiais apresentam propriedades estruturais e magnéticas diferentes. Por exemplo, o composto $CsNiCl_3$ possui uma anisotropia de íon único $D/J \simeq -0.038$ e $\lambda = J'/J \simeq 0.017$ (onde J e J' são as interações de troca da cadeia e intracadeia, respectivamente), enquanto o NENP possui uma anisotropia mais acentuada $D/J \simeq 0.17$ e $\lambda \simeq 10^{-4}$; esses são, também, os valores encontrados para o NINAZ. O composto Y_2BaNiO_5 apresenta $\lambda \lesssim 10^{-4}$ e $D/J \simeq -0.03$. Desta maneira, o composto $CsNiCl_3$, apesar de apresentar uma pequena anisotropia axial, não é um bom exemplo de magneto $1d$, porque a interação entre as cadeias tem um valor muito grande em comparação com os outros compostos citados.

A dependência das propriedades termodinâmicas na região de baixas temperaturas é determinada pela natureza do espectro de excitação (com gap). Para o líquido de Fermi, o espectro de excitação é sem gap, e, portanto, o calor específico eletrônico possui uma dependência com lei de potência da temperatura. No caso de um supercondutor convencional existe um gap Δ (pares de Cooper) no espectro de excitação e o calor específico eletrônico é proporcional a $e^{-\Delta/k_B T}$.

Após um longo debate de intensos cálculos teóricos e numéricos é aceito atualmente que o estado fundamental do antiferromagneto Heisenberg quântico de spin $s = 1/2$ numa rede quadrada ($2d$) apresenta ordem de longo alcance [19]. Devido as fortes flutuações quânticas, causadas sobretudo ao valor pequeno do spin e dimensionalidade, a magnetização de subrede é reduzida cerca de 60% do seu valor clássico $m_A(0) = 1/2$. Em temperatura finita, a ordem magnética é destruída por flutuações térmicas, mas o comprimento de correlação apresenta um comportamento crescente exponencialmente, com

o decréscimo da temperatura (i.e. $\xi(T) \simeq \xi_0 e^{a/T}$). Apesar de não conhecermos o estado fundamental do antiferromagneto Heisenberg, o ponto de partida para descrição teórica deste modelo é usar o estado clássico de Néel como sendo o “pseudo” estado fundamental.

Em 1936, Hulthén [20] generalizou o tratamento semiclássico das ondas de spin para estudar o antiferromagneto Heisenberg, onde a idéia da precessão dos spins (subrede) em torno da posição de equilíbrio foi utilizada, ignorando a energia do ponto zero. Em 1952, Anderson [21] estendeu o tratamento de Hulthén incluindo a energia do ponto zero, com isto obteve resultados coerentes para as grandezas termodinâmicas em $T = 0 K$, descrevendo adequadamente as flutuações quânticas. No mesmo ano, Kubo [22] formulou a teoria quântica das ondas de spins no antiferromagneto Heisenberg, onde as transformações de HP foram generalizadas. Este formalismo ficou conhecido na literatura como teoria de ondas de spins linear (LSWT). A LSWT é extremamente precisa para descrição das propriedades termodinâmicas em dimensões $d > 1$, uma vez que para $d = 1$ este formalismo apresenta alguns resultados inconsistentes. Por exemplo, a magnetização de subrede apresenta um comportamento divergente, diferindo-se do resultado correto $m_A(0) = 0$, segundo a solução exata obtida via ansatz de Bethe. Com a inclusão de uma anisotropia de troca, a LSWT induz um ordenamento em temperatura finita. Este ordenamento é, certamente, improvável, como podemos perceber ao analisar o comportamento termodinâmico do modelo de Ising ($s > 1/2$) na presença de uma anisotropia de íon único, por exemplo, numa rede $1d$, que é exatamente tratável e não apresenta ordem de longo-alcance em $T > 0 K$, apenas em $T = 0 K$. Assim sendo, devido às fortes flutuações quânticas, o antiferromagneto de Heisenberg não é ordenado em qualquer regime de temperaturas. Outro resultado inconsistente obtido pela LSWT é a inexistência de um gap no espectro de excitação para spin inteiro, contrariando a conjectura de Haldane.

Desejando eliminar as inconsistências na teoria LSWT, Takahashi [23] propôs uma simples modificação na teoria, obtendo as propriedades termodinâmicas no modelo de Heisenberg ferromagnético $1d$ em boa concordância com a solução exata da cadeia com spin $s = 1/2$ obtida pelo ansatz de Bethe. Neste novo formalismo foi introduzido um

parâmetro variacional η no Hamiltoniano de modo que a magnetização em $T > 0$ K seja nula, satisfazendo o teorema de Mermin-Wagner. A restrição de magnetização total nula implica em manter finito o número de ondas de spins sobre interações ferromagnéticas, mas não funciona na cadeia antiferromagnética. Assim sendo, Takahashi [23] e, independentemente, Hirsh e Tang [24], propuseram que, para a cadeia AF, a restrição deveria ser a imposição da magnetização de subrede nula. Esta restrição, além de satisfazer o teorema de Mermin-Wagner, restaura a simetria da subrede do estado fundamental.

Uma versão suavemente diferente da LSWT modificada (MSWT) tem sido proposta por Yamamoto e Hori [25], onde resultados ligeiramente superiores foram encontrados. As metodologias usadas nas teorias SW são idênticas, no sentido de que os autores iniciam escrevendo o Hamiltoniano de Heisenberg AF em termos de operadores de bósons na aproximação linear, ou seja, obtém inicialmente o Hamiltoniano quadrático. Porém, os procedimentos usados na diagonalização do Hamiltoniano transformado no espaço dos momentos são diferentes e levam a sistemas de equações particulares. Após algumas manipulações, a energia livre é minimizada sobre a restrição da magnetização de subrede nula. Desta maneira, Takahashi e Hirsh [23,24] introduzem uma matriz densidade de onda de um gás ideal após a transformação de Bogoliubov. Por outro lado, Yamamoto e Hori [25] diagonalizaram o Hamiltoniano resultante impondo que o coeficiente dos termos cruzados dos operadores seja zero, no qual foi denominado este esquema de diagonalização total da onda de spin modificada interagente que, por simplicidade, designaremos simplesmente por FD (“Full Diagonalization”). Estas e outras modificações da teoria SW têm sido propostas na literatura [26], em particular, a conjectura de Haldane para spin $S = 1$ (existência de gap no espectro de excitação) foi investigada, corrigindo assim a inconsistência dos resultados da teoria SW linear.

Apesar da teoria quântica de ondas de spins convencional não ser adequada na descrição do modelo de Heisenberg unidimensional, esta tem se mostrado eficiente para redes $d \geq 2$, obtendo resultados qualitativos e quantitativos quando comparados com métodos mais elaborados, como, por exemplo, Monte Carlo quântico e expansão em série, como

veremos a seguir.

4.2 Transformações de Holstein e Primakoff

Certas características das ondas de spins não aparecem no tratamento semi-clássico porque são de natureza intrinsecamente quântica. Outras são comuns tanto ao tratamento semi-clássico como quântico (relação de dispersão, por exemplo). A abordagem quântica pode ser feita de várias maneiras, aqui utilizaremos o formalismo da segunda quantização, onde a energia do sistema é escrita em termos de operadores de criação e destruição de quanta (magnon) de ondas de spins.

No magnetismo localizado, a cada sítio i da rede associamos um operador de spin efetivo, \vec{S}_i . Para N sítios na rede, tomados com idênticas magnitudes de spin S , o Hamiltoniano de Heisenberg é dado por:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i, \delta \rangle} J_{i, i+\delta} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+\delta} = - \sum_{\langle i, \delta \rangle} J_{i, i+\delta} [S_i^z S_{i+\delta}^z + \frac{1}{2}(S_i^- S_{i+\delta}^+ + S_i^+ S_{i+\delta}^-)], \quad (4.5)$$

onde J_{ij} é a energia de interação de troca entre os primeiros vizinhos, $\vec{\delta}$ representa o vetor primeiros vizinhos e S_i^\pm são os operadores de levantamento (+) e abaixamento (-).

Para o caso ferromagnético, $J_{i,j} > 0$, é fácil verificar que o estado fundamental é aquele no qual todos os spins apontam na direção z (eixo fácil de magnetização), ou seja, $|\varphi_o\rangle = |S, S, S, S, S, S, \dots S\rangle$ com energia $E_{oF} = -zNJS^2$.

Sendo S a magnitude do spin, podemos construir em cada sítio da rede operadores cujos autovalores representam os desvios dos spins em relação ao seu autovalor máximo. Esses autovalores são números que variam de zero (nenhum desvio) a $2S$ desvios. Por exemplo, escolhendo a componente z dos operadores de spin, o conjunto de operadores de desvios é definido por:

$$\hat{n}_i = S - S_i^z, \quad i = 1, \dots, N, \quad (4.6)$$

que obedecem às seguintes relações de comutação:

$$[n_i, S_i^z] = [n_i, \vec{S}_i^2] = 0, \quad (4.7)$$

gerando um conjunto de observáveis compatíveis $\{n_i, S_i^z, \vec{S}_i^2\}$ e base de autoestados (de desvios) comuns $|n_i\rangle$ de n_i , isto é,

$$\hat{n}_i |n_i\rangle = n_i |n_i\rangle; \quad n_i = 0, 1, \dots, 2S, \quad (4.8)$$

de dimensão $2S + 1$.

A atuação dos operadores

$$S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y \text{ e } S_i^z, \quad (4.9)$$

na base $\{|n_i\rangle \quad i = 1, \dots, N\}$ resultam:

$$S_i^+ |n_i\rangle = \sqrt{n_i(2S + n_i - 1)} |n_i - 1\rangle, \quad (4.10)$$

$$S_i^- |n_i\rangle = \sqrt{(n_i - 1)(2S - n_i)} |n_i + 1\rangle \quad (4.11)$$

e

$$S_i^z |n_i\rangle = (S - n_i) |n_i\rangle. \quad (4.12)$$

O primeiro estado excitado do conjunto de N spins pode ser representado por uma combinação linear de estados de desvio único nos sítios. Contudo, a probabilidade de que um sítio em particular apresente um desvio é a mesma para todos os sítios, implicando na simetria de translação da rede cristalina. Com isto, define-se novos operadores, S_K^+ , S_K^- e S_K^z , como as transformadas de Fourier dos operadores S_i^\pm e S_i^z , isto é,

$$S_K^+ = \frac{1}{\sqrt{2SN}} \sum_j e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_j} S_j^-, \quad (4.13)$$

$$S_K^- = \frac{1}{\sqrt{2SN}} \sum_j e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}_j} S_j^+, \quad (4.14)$$

$$S_K^z = \frac{1}{N} \sum_j e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}_j} S_j^z, \quad (4.15)$$

que satisfazem as regras de comutação

$$[S_K^+, S_{K'}^-] = \frac{S_{K-K'}^z}{S}, \quad (4.16)$$

$$[S_K^z, S_{K'}^\pm] = \mp \frac{S_{K\pm K'}^\pm}{N}. \quad (4.17)$$

Entretanto, este tipo de transformação modifica a Física do problema original, pois, esperávamos que a relação de comutação (4.16) tivesse a forma

$$[S_K^+, S_{K'}^-] = C \delta_{K,K'} S_K^z. \quad (4.18)$$

já que no espaço das coordenadas temos

$$\begin{aligned} [S_i^+, S_j^-] &= 2S_i^z \delta_{ij}, \\ [S_i^z, S_j^\pm] &= \pm S_i^\pm \delta_{ij}, \end{aligned} \quad (4.19)$$

que são as relações de comutação originais. Desta maneira dizemos que as transformadas de Fourier (4.13) e (4.14) não são canônicas, e, portanto, devemos encontrar um outro tipo de representação para tratar o modelo dado na Eq.(4.5).

Torna-se, portanto, necessário transformar as componentes dos operadores \vec{S}_j em operadores tais que, são transformados canonicamente e têm uma estatística bem definida no espaço dos momentos. No regime de baixas temperaturas, Holstein e Primakoff mapearam o espaço dos spins interagentes na rede no espaço de bósons interagentes usando

as seguintes transformações de operadores:

$$S_i^+ = \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{a_i^+ a_i}{2S}} a_i, \quad (4.20)$$

$$S_i^- = \sqrt{2S} a_i^+ \sqrt{1 - \frac{a_i^+ a_i}{2S}} \quad (4.21)$$

e

$$S_i^z = S - a_i^+ a_i, \quad (4.22)$$

onde os operadores bosônicos de criação a_i^+ (destruição a_i) criam e aniquilam mágnons nos sítios i da rede e que satisfazem as relações de comutação:

$$[a_i, a_j^+] = \delta_{ij}, \quad (4.23)$$

$$[a_i^+, a_j^+] = [a_i, a_j] = 0. \quad (4.24)$$

A transformação HP introduz um “erro”, porque transforma um espaço de spins com métrica finita em um espaço de bósons com métrica infinita. Este erro sistemático foi estudado por Dyson, que é desprezível em baixas temperaturas ($T \ll T_c$). Portanto, este formalismo de ondas de spins não é adequado para descrever a termodinâmica de modelos de spins em todo regime de temperatura, e sim na região de baixas temperaturas ($T \ll T_c$).

4.3 Teoria de Onda de Spins Linear

4.3.1 Modelo de Heisenberg Ferromagnético

Usando as transformações dos operadores dadas pelas Eqs.(4.20) e (4.21), a teoria de onda de spins linear surge, então, da expansão binomial de $\sqrt{1 - \frac{a_i^+ a_i}{2S}}$ até primeira

ordem, assumindo que $1 \gg \frac{a_i^+ a_i}{4S}$. Desta forma, têm-se:

$$S_i^+ \approx \sqrt{2S} a_i \quad (4.25)$$

$$S_i^- \approx \sqrt{2S} a_i^+ \quad (4.26)$$

$$S_i^z = S - a_i^+ a_i. \quad (4.27)$$

Substituindo as Eqs.(4.25 - 4.27) no Hamiltoniano da Eq.(4.5), escrevemos a nova representação do Hamiltoniano do sistema em função dos operadores de bósons (segunda quantização) na forma

$$\mathcal{H} = E_{0F} - 2S \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} (a_i^+ a_i + a_i^+ a_j), \quad (4.28)$$

no qual os termos com quatro operadores foram desprezados e $E_{0F} = -\frac{NzS^2}{2}J$ é a energia do estado fundamental ferromagnético (z é o número de coordenação).

Introduzimos a Transformada de Fourier deste operador como

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\vec{K} \cdot \vec{r}_j} a_k, \quad (4.29)$$

onde a_k (a_k^+) são os correspondentes operadores de destruição (criação) no espaço recíproco k . Por inspeção, os operadores transformados satisfazem as seguintes relações de comutação:

$$[a_k, a_{k'}^+] = \delta_{kk'} \equiv \frac{1}{N} \sum_j e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}_j}, \quad (4.30)$$

$$[a_k, a_{k'}] = [a_k^+, a_{k'}^+] = 0. \quad (4.31)$$

Os termos quadráticos no Hamiltoniano da Eq.(4.28) podem ser diagonalizados me-

diante o uso da transformada de Fourier Eq.(4.29), vejamos

$$\sum_j a_j^+ a_j = \frac{1}{N} \left(\sum_{k,k'} a_k^+ a_{k'} \right) \sum_j e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}_j} = \sum_k a_k^+ a_k, \quad (4.32)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} a_i^+ a_j &= \frac{1}{N} \left(\sum_{k,k'} a_k^+ a_{k'} \right) \sum_{i,\delta} e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}_i} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{\delta}} \\ &= z \sum_k a_k^+ a_k \gamma_k, \end{aligned} \quad (4.33)$$

onde $\gamma_k = \frac{1}{z} \sum_{\vec{\delta}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}}$ é o fator de topologia da rede. Portanto, o Hamiltoniano (4.28) ficará escrito na forma

$$\mathcal{H} = E_{oF} + \sum_k w_k a_k^+ a_k, \quad (4.34)$$

onde a relação de dispersão é dada por

$$w_k = 2JSz(1 - \gamma_k), \quad (4.35)$$

que é idêntica à obtida usando primeiros princípios.

O valor médio da magnetização é obtida através da expressão:

$$m = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i S_i^z \right\rangle = S - \frac{1}{N} \sum_i \langle a_i^+ a_i \rangle. \quad (4.36)$$

Com o auxílio do resultado Eq.(4.32) e lembrando que o valor médio do número de ocupação é dado pela distribuição de Bose-Einstein, ficaremos:

$$m = S - \frac{1}{N} \sum_k \langle a_k^+ a_k \rangle = S - \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{e^{\beta w_k} - 1}. \quad (4.37)$$

Usando a expressão $(e^{\beta w_k} - 1)^{-1} = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n\beta w_k}$, a Eq.(4.37) ficará reescrita por

$$m = S - \frac{1}{N} \sum_k \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n\beta w_k}. \quad (4.38)$$

Para uma rede cúbica simples ($z = 6$) $\gamma_k = \frac{1}{z}(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$ e a soma dos momentos é transformada numa integral na primeira zona de Brillouin, ou seja

$$m = S - \frac{a^3}{(2\pi)^3} \sum_{n=1}^{\infty} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_x \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_y \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_z e^{-2n\beta z J S(1-\gamma_k)}. \quad (4.39)$$

Fazendo as mudanças de variáveis $x = k_x a, y = k_y a$ e $z = k_z a$, ficaremos

$$m = S - \frac{1}{\pi^3} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n/\tau} \left[\int_0^{\pi} dx e^{\frac{n}{3\tau} \cos x} \right]^3, \quad (4.40)$$

onde $\tau \equiv (2\beta z S J)^{-1}$, e como a função integral é par e as três integrais idênticas levou ao resultado acima.

Da definição de função de Bessel modificada $I_o(A)$, dada por

$$I_o(A) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} e^{A \cos x} dx = \frac{e^A}{\sqrt{2\pi A}} \sum_{r=0}^{\infty} \frac{[\Gamma(r + \frac{1}{2})]^2}{\pi r! (2A)^r}, \quad (4.41)$$

onde $\Gamma(x)$ é a função gama, a Eq.(4.40) ficará finalmente escrita por

$$m = S - \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n/\tau} I_o^3\left(\frac{n}{3\tau}\right). \quad (4.42)$$

Usando a expansão em série da função de Bessel $I_o(x)$, ficaremos

$$m \simeq S - a_0 \theta^{3/2} - a_1 \theta^{5/2} - a_2 \theta^{7/2} - \dots, \quad (4.43)$$

onde $a_o = \xi(3/2)$, $a_1 = \frac{3\pi}{4}\xi(5/2)$, $a_2 = \frac{33\pi^2}{32}\xi(7/2)$, $\xi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^x}$ é a função Zeta de Riemann e $\theta \equiv \frac{k_B T}{8\pi J S}$ é a temperatura reduzida.

A Eq.(4.43) apresenta uma expansão com apenas as interações cinemáticas das ondas de spins (termos bilineares dos operadores de bósons), resultando, assim, numa série de potências semi-inteiras da temperatura. Por outro lado, Dyson considerando em teoria de perturbação o termo de quatro operadores de bósons da expansão das transformações de HP, obteve um termo aditivo $-b_o\theta^4$, onde $b_o = 10\pi(\frac{3}{4\pi})^4\xi(\frac{3}{2})\xi(\frac{5}{2})$. Nessa mesma aproximação de ondas de spin linear, obtemos uma expansão em baixas temperaturas para o calor específico na forma

$$\frac{c_o}{k_B} \simeq \alpha_o\theta^{3/2} + \alpha_1\theta^{5/2} + \alpha_2\theta^{7/2} + \dots, \quad (4.44)$$

onde $\alpha_o = \frac{15}{4}\xi(5/2)$, $\alpha_1 = \frac{105}{16}\pi\xi(7/2)$ e $\alpha_2 = \frac{63}{4}\pi^2\xi(9/2)$.

4.3.2 Modelo de Heisenberg Antiferromagnético

Apesar do estado de Néel não ser o estado fundamental do modelo de Heisenberg quântico antiferromagnético, a generalização da transformação HP parte da idéia da divisão do sistema em duas subredes (A e B) interpenetrantes, no qual na ausência de campo externo temos $m_A = -m_B$, onde $m_A(m_B)$ é a magnetização por spin da subrede $A(B)$. No subespaço dos spins na subrede A (spins apontando no sentido positivo do eixo z), a ação do operador levantamento no sítio $i \in A$, S_i^+ , sobre o estado $|m_i\rangle$ é alterar para o estado $|m_i + 1\rangle$, e na representação dos operadores de bósons, $\hat{n}_i = S - S_i^z = a_i^\dagger a_i$ teremos um decréscimo de uma unidade, ou seja, temos uma mudança no estado $|n_i\rangle$ para o estado $|n_i - 1\rangle$. Desta maneira a transformação HP na subrede A será dada por

$$\begin{cases} S_i^+ = \sqrt{2S}\phi_S^A(\hat{n}_{iA})a_i, \\ S_i^- = \sqrt{2S}a_i^\dagger\phi_S^A(\hat{n}_{iA}), \\ S_i^z = S - \hat{n}_{iA}, \end{cases} \quad (4.45)$$

onde $\hat{n}_{iA} = a_i^\dagger a_i$, $\phi_S^A(\hat{n}_{iA}) = \left(1 - \frac{\hat{n}_{iA}}{2S}\right)^{1/2}$ e $a_i^\dagger(a_i)$ é o operador criação (destruição) na subrede A .

Na subrede B associamos no formalismo da segunda quantização os operadores de bósons $b_i^\dagger(b_i)$. No qual, na representação dos spins, corresponde a uma orientação dos spins apontando na direção negativa do eixo z . Sendo a magnetização por spin nesta subrede B o negativo da subrede, então escolhe-se $S_j^z = -S + \hat{n}_{jB}(j \in B)$, onde o operador número (desvio dos spins) é $\hat{n}_{jB} = b_j^\dagger b_j$. Agora o operador abaixamento S_j^- faz papel do operador levantamento S_j^+ na subrede A apresentando, assim, a mesma transformação HP dada na Eq.(4.46). Na subrede B a ação do operador S_j^- no estado $|m_j\rangle$ é modificar para o estado $|m_j - 1\rangle$, sendo $m_j = -S + n_j$. Então, no espaço do número de ocupação $|n_j\rangle$ temos a modificação para o estado $|m_j - 1\rangle$ e que corresponde a ação do operador de bósons de destruição b_j . Assim sendo, ficaremos com a seguinte transformação HP para a subrede B

$$\begin{cases} S_j^+ = \sqrt{2S} \phi_S^B(\hat{n}_{jB}) b_j, \\ S_j^- = \sqrt{2S} b_j^\dagger \phi_S^B(\hat{n}_{jB}), \\ S_j^z = S - \hat{n}_{jB}. \end{cases} \quad (4.46)$$

Na teoria de ondas de spins linear introduzida por Anderson, aproximamos $\phi_S^{A,B}(\hat{n}_{iA,B}) \simeq 1$. Com isto, substituindo as transformações das Eqs.(4.45) e (4.46) no Hamiltoniano da Eq.(4.5) e permutando J_{ij} por $-J_{ij}(J > 0)$, teremos

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & E_{0N} + SJ_0 \left(\sum_{i \in A} \hat{n}_{iA} + \sum_{j \in B} \hat{n}_{jB} \right) \\ & + SJ \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i b_j + a_i^\dagger b_j^\dagger), \end{aligned} \quad (4.47)$$

onde $E_{0N} = -NS^2 J_0$ é a energia do estado fundamental de Néel (AF clássico), $J_0 = zJ$ e z é o número de coordenação. Este Hamiltoniano conecta os estados físicos com $0 \leq n_i \leq 2S$ com estados tendo $n_i > 2S$. Se no estado fundamental o valor médio do número de ocupação, $\langle \hat{n}_i \rangle$, for menor do que $2S$ (1 para o caso de spin 1/2), esta aproximação

faz sentido. Esta condição pode ser checada uma vez que o espectro da Eq.(4.47) é encontrado.

Um Hamiltoniano quadrático tal como o da Eq.(4.47) pode ser sempre diagonalizado. Introduzimos as transformadas de Fourier destes operadores como

$$\begin{cases} a_j = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k a_k e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j}, \\ b_j = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k b_k e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_j}, \end{cases} \quad (4.48)$$

onde agora temos $\frac{N}{2}$ sítios na subrede $A(B)$ e por isto justifica-se o termo multiplicativo nas transformadas de Fourier (4.48).

Substituindo a (4.48) na Eq.(4.47) ficaremos com

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & E_{0N} + SJ_0 \sum_k (a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k) + \\ & SJ_0 \sum_k \gamma_k (a_k b_k + a_k^\dagger b_k^\dagger), \end{aligned} \quad (4.49)$$

onde o vetor de onda \vec{k} corresponde ao espaço da rede recíproca das subredes A e B .

O termo diagonal (segundo termo da Eq.(4.49)) corresponde a subredes desacopladas, enquanto o termo não diagonal (terceiro termo da equação), corresponde ao acoplamento entre as duas subredes. Para diagonalizar o Hamiltoniano quadrático da Eq.(4.49) devemos reescrever os operadores a_k e b_k como uma combinação linear dos novos operadores \tilde{a}_k e \tilde{b}_k , de modo a escolher adequadamente as constantes para que o Hamiltoniano seja diagonal nessa nova coleção de operadores. Esta transformação (canônica) é chamada na literatura de transformação de Bogoliubov, e é expressa por

$$\begin{cases} a_k = \alpha_k \tilde{a}_k + \beta_k \tilde{b}_k^\dagger, \\ b_k = \alpha_k \tilde{a}_k^\dagger + \beta_k \tilde{b}_k, \end{cases} \quad (4.50)$$

onde α_k e β_k são constantes reais arbitrárias a serem determinadas impondo: (i) que

ela seja canônica, isto é, $[a_k, a_k^\dagger] = [\tilde{a}_k, \tilde{a}_k^\dagger] = [b_k, b_k^\dagger] = [\tilde{b}_k, \tilde{b}_k^\dagger] = 1$, desta maneira os coeficientes devem satisfazer a relação

$$\alpha_k^2 - \beta_k^2 = 1. \quad (4.51)$$

Substituindo a Eq.(4.50) no Hamiltoniano dado pela Eq.(4.49), ficaremos

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \mathcal{H}_0 + SJ_0 \sum_k (\alpha_k^2 + \beta_k^2 + 2\gamma_k \alpha_k \beta_k) (\tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k + \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k) \\ & + SJ_0 \sum_k [2\alpha_k \beta_k + \gamma_k (\alpha_k^2 + \beta_k^2)] (\tilde{a}_k \tilde{b}_k + \tilde{a}_k^\dagger \tilde{b}_k^\dagger), \end{aligned} \quad (4.52)$$

sendo

$$\mathcal{H}_0 = E_{0N} + 2SJ_0 \sum_k (\beta_k^2 + \gamma_k \alpha_k \beta_k). \quad (4.53)$$

A segunda imposição (ii) para as constantes α_k e β_k é tal que o último termo da Eq.(4.52), não diagonal, seja nulo. Assim sendo, encontramos

$$\tanh(2\theta_k) = \gamma_k, \quad (4.54)$$

onde escolhemos $\alpha_k = \cosh(\theta_k)$ e $\beta_k = -\sinh(\theta_k)$.

Substituindo os valores de α_k e β_k na Eq.(4.52) obtemos o Hamiltoniano diagonal com os novos operadores

$$\mathcal{H} = E_{oAF} + \sum_k \omega_k (\tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k + \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k), \quad (4.55)$$

sendo

$$\omega_k = SJ_0 \sqrt{1 - \gamma_k^2} \quad (4.56)$$

e

$$E_{oAF} = -NS(S+1)J_0 + \sum_k \omega_k. \quad (4.57)$$

Estando o Hamiltoniano da Eq.(4.55) escrito na forma diagonal com as subredes desacopladas, podemos facilmente mostrar as seguintes relações:

$$\langle \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k \rangle = \langle \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta \omega_k} - 1}, \quad (4.58)$$

que é a distribuição de Bose-Einstein, mostrando serem os mágnons, com quantum de energia ω_k , bósons livres nesta primeira aproximação.

Usando as relações da Eq.(4.50), podemos mostrar que $\langle a_k^\dagger a_k \rangle$ e $\langle b_k^\dagger b_k \rangle$ são expressos por

$$\langle a_k^\dagger a_k \rangle = \langle b_k^\dagger b_k \rangle = \frac{1}{2} \left[-1 + \frac{\coth(\beta \omega_k / 2)}{\sqrt{1 - \gamma_k^2}} \right]. \quad (4.59)$$

Substituindo a Eq.(4.57) na Eq.(4.54), obtemos o valor médio da energia por spin dada por

$$\mathcal{E}(T) \equiv \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{N} = -S(S+1)J_0 + \frac{SJ_0}{N} \sum_k \sqrt{1 - \gamma_k^2} \coth(\beta \omega_k / 2), \quad (4.60)$$

que é válida na região de baixas temperaturas.

Para obtermos $\mathcal{E}(T)$ da Eq.(4.60) devemos transformar o somatório dos momentos numa integral na primeira zona de Brillouin, ou seja,

$$\frac{2}{N} \sum_k F(\vec{k}) = v_0 \int_{1^\alpha ZB} F(\vec{k}) d\vec{k}, \quad (4.61)$$

onde v_0 é o volume da célula unitária da rede recíproca. Vejamos, numa rede quadrada $v_0 = (\frac{a}{2\pi})^2$, rede cúbica $v_0 = (\frac{a}{2\pi})^3$, e assim por diante.

Expandindo a Eq.(4.45) até a ordem $1/S$, encontramos um Hamiltoniano na forma [27]

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & E_0 + \omega_k (\tilde{n}_{ak} + \tilde{n}_{bk}) + \frac{J_0}{2N} \sum_{k_1 k_2} [(1 - c_{12}) (\tilde{n}_{ak_1} \tilde{n}_{ak_2} + \\ & \tilde{n}_{bk_1} \tilde{n}_{bk_2} - 2(1 + c_{12}) \tilde{n}_{ak_1} \tilde{n}_{bk_2} + \dots, \end{aligned} \quad (4.62)$$

sendo

$$E_0 = -\frac{J_0 S^2 N}{2} \left(1 + \frac{A}{2S}\right)^2, \quad (4.63)$$

$$\omega_k = \omega_{0k} \left(1 + \frac{A}{2S}\right), \quad (4.64)$$

$$\omega_{0k} = S J_0 \sqrt{1 - \gamma_k^2}, \quad (4.65)$$

$$c_{12} = \sqrt{1 - \gamma_{k_1}^2} \sqrt{1 - \gamma_{k_2}^2}, \quad (4.66)$$

e

$$A = \frac{2}{N} \sum_k [1 - \sqrt{1 - \gamma_k^2}], \quad (4.67)$$

onde $\tilde{n}_{ak} = \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k$ e $\tilde{n}_{bk} = \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k$.

A energia média por spin em $T = 0$ K (estado fundamental) numa rede quadrada e spin $S = 1/2$ vale $\frac{\mathcal{E}(0)}{J} = -0.658$ e -0.6705 nas aproximações linear e segunda ordem na teoria de ondas de spins, respectivamente. A próxima correção na expansão $1/S$ [28] é pequena, mostrando uma certa convergência no caso da energia média, o que de certa forma justifica os resultados na teoria de ondas de spins linear e a não necessidade da expansão em potência $1/S$ para o caso $S = 1/2$. Os resultados de $\mathcal{E}(0)$ obtidos pelas aproximações de teoria de ondas de spins (expansões $1/S$) podem ser comparados com outros métodos, como, por exemplo, Monte Carlo Quântico, Expansão em Série, Diagonalização Exata. Na tabela (IV.1) apresentamos alguns desses resultados, onde observamos a coerência dos resultados de ondas de spin linear subestimando os resultados em comparação com os resultados mais elaborados.

Para pequeno vetor de onda temos que o fator topologia da rede é aproximado por $\gamma_k \simeq 1 - \frac{(ka)^2}{z}$, então da Eq.(4.56) mostramos a dependência linear da relação de dispersão, $\omega_k \simeq k$, que é uma das características marcantes dos compostos antiferromagnéticos, distinto do comportamento quadrático, $\omega_k \simeq k^2$, dos compostos ferromagnéticos. Medidas de espalhamento de nêutrons no composto antiferromagnético $RbMnF_3$ têm confirmado este comportamento linear na relação de dispersão [34].

MÉTODO	$\epsilon(0)/J$
Ondas de Spin Linear	-0.658
Ondas de Spins não Linear [27]	-0.670
Expansão em Série [29]	-0.6696 ± 0.0003
Monte Carlo com Função de Green [30]	-0.6692 ± 0.0002
Monte Carlo Variacional [31]	-0.6682 ± 0.0004
Monte Carlo Projetor [32]	-0.6661 ± 0.0002
Diagonalização Exata [33]	-0.672 ± 0.001

Tabela IV.1: Comparação da energia média por spin no estado fundamental (em unidades de J) do modelo de Heisenberg Antiferromagnético de spin $1/2$ numa rede quadrada calculada por vários métodos.

Apesar de não conhecermos exatamente o estado fundamental AF, este é caracterizado por apresentar excitações elementares com pequenas “oscilações”, valor da amplitude ($n_{\alpha k}$) de uma dada subrede. A convergência da expansão da teoria de ondas de spin é verificada se

$$\epsilon \equiv \frac{1}{N} \sum_k \langle n_k \rangle \ll 1, \quad (4.68)$$

em $T = 0 K$. Usando o resultado dado na Eq.(4.58), ficamos com

$$\epsilon \equiv \frac{1}{2N} \left[\frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_k^2}} - 1 \right], \quad (4.69)$$

onde para uma rede quadrada obtemos $\epsilon \simeq 0.197$, que é um número pequeno, justificando assim a expansão linear como sendo uma boa aproximação.

O valor médio da magnetização da subrede, como definido pela Eq.(4.46), em $T = 0 K$ e $S = 1/2$ é dado por

$$m_A = \frac{1}{2} - \epsilon, \quad (4.70)$$

que para uma rede quadrada seu valor é $m_A \simeq 0.303$. Então, a Teoria de Ondas de Spins (linear) prediz uma ordem de longo-alcance para o estado fundamental AF numa rede quadrada em $T = 0 K$, sendo a magnetização da subrede m_A com um valor aproximadamente 61% do seu correspondente valor clássico ($m_A = \frac{1}{2}$). Em uma dimensão ($d = 1$),

MÉTODO	$m_A(0)$
Ondas de Spin Linear	0.303
Ondas de Spins não Linear [27]	0.307
Expansão em Série [29]	0.308 ± 0.008
Monte Carlo com Função de Green [30]	0.31 ± 0.02
Monte Carlo Variacional [31]	0.349 ± 0.002
Monte Carlo Projetor [32]	0.29
Diagonalização Exata [33]	0.25

Tabela IV.2: Comparação da magnetização de subrede por spin em $T=0$ do modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin 1/2 numa rede quadrada calculada por vários métodos.

a intergral (4.69) diverge devido aos grandes modos do comprimento de onda. Esta instabilidade pode ser atribuída ao fato que o estado fundamental falha para desenvolver expansão da transformada HP em torno de um estado ordenado. Assim sendo, $\epsilon \rightarrow \infty$ e não existe uma expansão para pequeno parâmetro, e que a expansão perturbativa não é adequada para tratar a cadeia antiferromagnética, que por natureza é desordenada.

O valor encontrado para a magnetização de subrede ($m_A \simeq 0.303$) usando Teoria de Ondas de Spins Linear numa rede quadrada, pode ser comparado a outros resultados. Ondas de Spins não Linear obtém o mesmo valor quando é expandida a relação HP até a segunda ordem [27], e $m_A \simeq 0.307$ quando expandida até a terceira ordem [28].

Os resultados apresentados na tabela (IV.2) confirmam que o estado fundamental do modelo de Heisenberg AF com spin-1/2 em $T = 0 K$, na rede quadrada, é magneticamente ordenado, mas em $T > 0 K$ as flutuações térmicas destroem esta ordem de longo-alcance segundo o Teorema de Mermin e Wagner. Uma outra maneira de destruir o ordenamento AF numa rede quadrada é introduzir no Hamiltoniano interações competitivas, como, por exemplo, interação de segundos vizinhos causando no sistema o efeito de frustração e induzindo novo estado magnético. Este tópico será explorado no próximo capítulo desta tese.

Referências

- [1] Z. F. Block, *Physik* **61**, 206 (1930)
- [2] Z. F. Block, *Physik* **74**, 295 (1932).
- [3] F. J. Dyson, *Phys.Rev.* **102**, 1217 (1956); *ibid* **102**, 1230 (1956)
- [4] T. Holstein e H. Primakoff, *Phys. Rev.* **58**, 1098 (1940).
- [5] M. R. Schafroth, *Proc. Phys. Soc.(London) A* **67**, 33 (1954).
- [6] van Kranendonck, *Physica A* **21**, 81(1955).
- [7] T. Oguchi, *Phys. Rev.* **117**, 117(1960).
- [8] N. D. Mermin e H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [9] P. Bruno, *Phys. Rev. B* **87**, 137203 (2001).
- [10] L. A. S. Moi e B.V. Costa, *Phys. Rev. B* **79**, 054404 (2009).
- [11] M. G. Pini, P. Politi e R. L. Stamps, *Phys. Rev. B* **72**, 014454 (2005).
- [12] H. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931); H. Hulthein, *Arkiv. Nat. Astron. Fys.* **26A**, n°11 (1938).
- [13] E. Lieb, T. Schultz e D. C. Mattis, *Ann. Phys.* **16**, 406 (1961).
- [14] F. D. Haldane, *Phys. Lett. A* **93**, 464 (1983); *Phys. Rev. Lett* **50**, 1153 (1983); *J. Appl. Phys.* **57**, 3359 (1985).

- [15] W. J. L. Buyers, et al. *Phys. Rev. Lett.* **56**, 371 (1986); M. Steiner, K. Kakurai, J. K. Kjens, D. Petitgrand, e R. Pynn, *J. Appl. Phys.* **61**, 3953 (1981).
- [16] J. P. Renard, et al., *Europhys. Lett.* **15**, 945 (1987); K. Katsumata, et al., *Phys. Rev. B* **63**, 86 (1989)
- [17] A. Zheludev, et al., *Phys. Rev. B* **53**, 15004 (1989).
- [18] T. Sakaguchi, K. Kakurai, T. Yokoo e J. Akimitsu, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 3025 (1996).
- [19] E. Manousakis, *Rev. Mod. Phys.* **63**, 1 (1991). Este artigo de revisão sobre o modelo de Heisenberg AF numa rede quadrada discute diversos resultados teóricos e compara com medidas experimentais nos compostos isolantes formados por planos de CuO_2 , que quando dopados tornam-se supercondutores em altas temperaturas.
- [20] H. Hulthein, *Proc. Roy. Acad. Sci. Amsterdam* **39**, 190 (1936).
- [21] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **86**, 694 (1952).
- [22] R. Kubo, *Phys. Rev.* **87**, 568 (1952).
- [23] M. Takahashi, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 168 (1987).
- [24] J. E. Hirsh e S. Tang, *Phys. Rev. B* **40**, 4769 (1989); *ibid Phys. Rev. B* **39**, 2850 (1989)
- [25] S. Yamamoto e H. Hori, *J. Phys. Soc. Jpn.* **72**, 769 (2003).
- [26] S. M. Rezende, *Phys. Rev. B* **42**, 2589 (1990); J. Dreiser, et al., *Phys. Rev. B* **81**, 024408 (2010); S. Yamamoto, *Phys. Rev. B* **69**, 064426 (2004); S. Yamamoto e J. Ohara, *Phys. Rev. B* **76**, 014409 (2007).
- [27] Wuhong, et al., *Phys. Rev. B* **43**, 832 (1991).
- [28] Hamer, et al., *Phys. Rev. B* **46**, 6276 (1992).

- [29] R. R. P. Singh, *Phys. Rev. B* **39**, 9760 (1989).
- [30] N. Trivedi e D. M. Ceperley, *Phys. Rev. B* **40**, 2747 (1989).
- [31] S. Liang, B. Doucot e P. W. Anderson, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 365 (1988).
- [32] M. Gross, E. Sanchez-Velasco e E. Siggia, *Phys. Rev. B* **39**, 2484 (1989); *ibid* **40**, 11328 (1989)
- [33] S. Tang e J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **39**, 4548 (1989).
- [34] C. G. Windsor e R. W. H. Stevenson, *Proc. Phys.Soc. (London)* **87**, 501 (1966).

Capítulo 5

Modelo de Heisenberg com Interações Competitivas. Teoria de Onda de Spins Linear

5.1 Introdução

O modelo de Heisenberg AF de spin $S = 1/2$ numa rede quadrada representa um protótipo de um sistema usado para descrição de flutuações quânticas em $T = 0 K$, onde, por exemplo, a magnetização de subrede tem redução de cerca de 60% do seu valor clássico $m_A(0) = 1/2$. Em temperatura finita ($T > 0 K$), as flutuações térmicas destroem a ordem de longo alcance deste modelo. Uma maneira não térmica de destruir a ordem AF em $T = 0 K$ é através da introdução de frustração. Topologicamente falando, a frustração pode ser introduzida ao tratarmos o modelo de Heisenberg AF, por exemplo nas redes triangular e kagomé (frustração geométrica), que em $T = 0 K$ não apresentam ordem de longo alcance, mas contrariamente ao caso de modelos clássicos (Ising ou Heisenberg ou XY com $S = \infty$), neste modelo quântico temos uma ordem local caracterizada por estados singletos distribuídos aleatoriamente, característico do estado líquido de spins. Por outro lado, a frustração também pode ser introduzida através de

interações competitivas. Revemos uma outra vez o modelo $J_1 - J_2$ estudado anteriormente usando teoria de campo efetivo. Os primeiros estudos usando LSWT no modelo $J_1 - J_2$ foram feitos independentemente por Chandra e Doucot [1] e por Ioffe e Larkin [2], onde observaram para a rede AF ($J_1 > 0$) frustrada estados fundamentais dependentes do parâmetro de frustração α . Para $\alpha < \alpha_{1c} \simeq 0.38$ temos um ordenamento AF, para $\alpha > \alpha_{2c} \simeq 0.51$ um ordenamento colinear (CAF) e na região $\alpha_{1c} < \alpha < \alpha_{2c}$ o estado líquido de spin. Apesar do método ser rigoroso em $T = 0$ K, este não foi capaz de desvendar qual a ordem da transição de fases (primeira ou segunda ordem) em $\alpha = \alpha_{1c}$ e $\alpha = \alpha_{2c}$. No caso de Teoria de Campo Efetivo (EFT), descrito no capítulo 3 desta tese, identificamos claramente o verdadeiro tipo de transição de fases analisando o funcional da energia livre, ou seja, em $\alpha = \alpha_{1c}$ temos uma transição contínua e em $\alpha = \alpha_{2c}$ uma transição descontínua. Este diagrama de fases do estado fundamental do modelo $J_1 - J_2$ de spin $S = 1/2$ tem sido estudado por diversas técnicas aproximativas [3-22]. O estudo do modelo $J_1 - J_2$ antiferromagnético tem sido motivado, sobretudo, por causa dos resultados experimentais nos compostos formados por planos de vanádio. Por exemplo, os materiais $Li_2VO Si O_4$ e $LiVO Ge O_4$ são antiferromagnetos colinear (CAF)[23] com acoplamento $J_2 \gg J_1$, enquanto que os materiais $VOMoO_4$ e $PbVO_3$ são antiferromagnetos (AF) [24] com $J_2 \ll J_1$. Estes compostos de vanádio isoestruturais são caracterizados por uma estrutura de planos contendo íons V^{4+} que têm um spin $S = 1/2$ distribuídos numa rede quadrada com interações de primeiros (J_1) e segundos (J_2) vizinhos, onde existe um pequeno acoplamento entre planos $J_{\perp} \simeq \lambda |J_1|$, sendo $\lambda \simeq 10^{-3}$.

Por outro lado, o caso de interação ferromagnética ($J_1 < 0$) tem sido muito pouco investigado na literatura. Do ponto de vista experimental um novo material frustrado composto de planos de vanádio (modelo $J_1 - J_2$) foi estudado, o composto $Pb_2VO(PO_4)_2$, onde a termodinâmica revela a presença de uma interação de troca ferromagnética [25] $J_1 \simeq -2K$ e interação de segundos vizinhos $J_2 \simeq 6.5K$ apresentando um estado colinear ferromagnético (CF).

Especificamente falando, desenvolvemos neste capítulo a teoria de ondas de spins

linear (LSWT) incluindo no Hamiltoniano anisotropia de exchange (Δ), espacial (λ) e parâmetro de frustração $\alpha = J_2/J_1$. Se $J_1 > 0$ (antiferromagnética), a fase colinear estável é aquela formada por linhas de spins com a mesma orientação adjacentes a linhas com spins de orientação oposta, isto é, duas subredes em linhas como mostra a figura 3.6. Se $J_1 < 0$ (ferromagnética), o estado fundamental colinear é aquele formado por planos de spins com mesma orientação adjacentes a planos com orientação oposta, como indicado na figura 3.8. O formalismo LSWT foi desenvolvido no capítulo 4, e a seguir aplicaremos para estudar a transição de fase quântica no modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg ferromagnético ($J_1 < 0$) e antiferromagnético ($J_1 > 0$), onde introduzimos dois tipos de anisotropias, uma de interação de troca (Δ) e a outra através do acoplamento entre planos (λ). Estudos similares foram realizados no capítulo 3 usando a teoria de campo efetivo e aqui faremos este novo estudo a fim de comparação.

Seja o seguinte o Hamiltoniano de Heisenberg frustrado

$$\mathcal{H}_{AF} = \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{J_{ij}^{(1)}}{2} \{ \eta(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z \} + \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{J_{ij}^{(2)}}{2} \{ \eta(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z \}, \quad (5.1)$$

onde $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ é o operador de spin ($S = 1/2$) situado em cada sítio i da rede, $J_{ij}^{(1)}$ ($J_{ij}^{(2)}$) é a energia de acoplamento entre os primeiros (segundos) vizinhos,

$$J_{ij}^{(1)} = \begin{cases} J_1, & \text{no plano} \\ \lambda J_1, & \text{entre planos} \end{cases},$$

$$J_{ij}^{(2)} = \begin{cases} J_2, & \text{no plano} \\ 0, & \text{entre planos} \end{cases},$$

e $\eta = (1 - \Delta)$ é o parâmetro de anisotropia que simula os casos particulares, Heisenberg Isotrópico ($\Delta = 0$) e Ising ($\Delta = 1$).

5.2 Estado Antiferromagnético (AF)

Usando as expressões dos operadores de abaixamento e levantamento, isto é,

$$S^\pm = S^x \pm iS^y, \quad (5.2)$$

o Hamiltoniano (5.1) ficará reescrito na forma

$$\mathcal{H}_{AF} = \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{J_{ij}^{(1)}}{2} \left\{ \frac{\eta}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right\} + \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{J_{ij}^{(2)}}{2} \left\{ \frac{\eta}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right\}, \quad (5.3)$$

onde $i(j)$ corresponde ao sítio na subrede A(B).

Em seguida usamos as transformações dos operadores de spin em função dos operadores de bósons na aproximação linear definidas por

$$S_{A_i}^+ \simeq \sqrt{2S} a_i, \quad (5.4)$$

$$S_{A_i}^- \simeq \sqrt{2S} a_i^\dagger, \quad (5.5)$$

$$S_{A_i}^z \simeq S - a_i^\dagger a_i, \quad (5.6)$$

da subrede A e

$$S_{B_j}^+ \simeq \sqrt{2S} b_j^\dagger, \quad (5.7)$$

$$S_{B_j}^- \simeq \sqrt{2S} b_j, \quad (5.8)$$

$$S_{B_j}^z \simeq -S + b_j^\dagger b_j, \quad (5.9)$$

da subrede B . Com isso, o Hamiltoniano (5.2) ficará

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{AF} = & S \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{J_{ij}^{(1)}}{2} \{ \eta(a_i b_j + b_i a_j + a_i^\dagger b_j^\dagger + b_i^\dagger a_j^\dagger) + a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i + a_j^\dagger a_j + b_j^\dagger b_j \} + \\ & S \sum_{\langle i,j,xy \rangle} \frac{J_{ij}^{(2)}}{2} \{ \eta(a_i a_j^\dagger + a_i^\dagger a_j + b_i b_j^\dagger + b_i^\dagger b_j) \\ & - (a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i + a_j^\dagger a_j + b_j^\dagger b_j) \}, \end{aligned} \quad (5.10)$$

onde os termos com produtos de quatro operadores foram desprezados (aproximação linear) e o primeiro somatório contém sítios no plano XY e entre planos, enquanto o segundo contém apenas sítios no plano.

Com o auxílio das transformadas de Fourier dos operadores, isto é,

$$a_i = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i \vec{k} \cdot \vec{r}_i} a_{\vec{k}}, \quad (5.11)$$

$$a_i^\dagger = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}_i} a_{\vec{k}}^\dagger, \quad (5.12)$$

$$b_j = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i \vec{k} \cdot \vec{r}_j} b_{\vec{k}}, \quad (5.13)$$

$$b_j^\dagger = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}_j} b_{\vec{k}}^\dagger, \quad (5.14)$$

chegamos a forma

$$\mathcal{H}_{AF} = \sum_{\vec{k}} A_k^{AF} (a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k) + B_k^{AF} (a_k b_{-k} + a_k^\dagger b_{-k}^\dagger) + E_o^{AF}, \quad (5.15)$$

sendo

$$A_k^{AF} = S(J_o^{(1)} + \eta J_k^{(2)} - J_o^{(2)}), \quad (5.16)$$

$$B_k^{AF} = \eta S J_k^{(1)}, \quad (5.17)$$

$$E_o^{AF} = -S^2 \left(\sum_{(i,j)} J_{ij}^{(1)} - \sum_{(i,j)} J_{ij}^{(2)} \right), \quad (5.18)$$

$$J_o^{(1)} = \sum_{\vec{\delta}_1} J_{i,\vec{\delta}_1} = 2J_1(2 + \lambda), \quad (5.19)$$

$$J_k^{(1)} = \sum_{\vec{\delta}_1} J_{i,\vec{\delta}_1} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_1} = 2J_1(\cos k_x a + \cos k_y a + \lambda \cos k_z a), \quad (5.20)$$

$$J_o^{(2)} = \sum_{\vec{\delta}_2} J_{i,\vec{\delta}_2} = 4J_2, \quad (5.21)$$

$$J_k^{(2)} = \sum_{\vec{\delta}_2} J_{i,\vec{\delta}_2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_2} = 4J_2 \cos k_x a \cos k_y a, \quad (5.22)$$

$$\sum_{(i,j)} J_{ij}^{(1)} = 2N(2 + \lambda)J_1, \quad (5.23)$$

$$\sum_{(i,j)} J_{ij}^{(2)} = 4NJ_2. \quad (5.24)$$

5.3 Estado Colinear

Partindo do Hamiltoniano que descreve a fase colinear

$$\mathcal{H} = \sum_{(i,j)} \frac{J_{ij}^{(1)}}{2} \left\{ \frac{\eta}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right\} + \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{J_{ij}^{(2)}}{2} \left\{ \frac{\eta}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right\}, \quad (5.25)$$

analisamos a estabilidade do sistema para os dois casos seguintes: (i) $J_{ij}^{(1)} > 0$, $J_{ij}^{(2)} > 0$ e (ii) $J_{ij}^{(1)} < 0$, $J_{ij}^{(2)} > 0$. Seguindo os mesmos procedimentos realizados na fase AF para cada um dos casos, encontramos:

5.3.1 Estado Colinear Antiferromagnético (CAF)

Neste caso o Hamiltoniano da fase assume a seguinte forma:

$$\mathcal{H}_{CAF} = \sum_{\vec{k}} A_k^{CAF} (a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k) + B_k^{CAF} (a_k b_{-k} + a_k^\dagger b_{-k}^\dagger) + E_o^{CAF}, \quad (5.26)$$

onde os coeficientes são

$$A_k^{CAF} = 2J_1S(\lambda + \eta \cos k_y a) + 4J_2S, \quad (5.27)$$

$$B_k^{CAF} = 2\eta J_1S(\cos k_x a + \lambda \cos k_z a) + 4\eta J_2S \cos k_x a \cos k_y a, \quad (5.28)$$

e E_o^{CAF} dada por:

$$E_o^{CAF} = S^2 \left(\sum_{i,jx} J_{ijx}^{(1)} - \sum_{i,jyz} J_{ijyz}^{(1)} - \sum_{i,j} J_{ij}^{(2)} \right) = -2NS^2(\lambda J_1 + 2J_2). \quad (5.29)$$

5.3.2 Estado Colinear Ferromagnético (CF)

Neste caso o Hamiltoniano será

$$\mathcal{H}_{CF} = \sum_{\vec{k}} A_k^{CF} (a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k) + B_k^{CF} (a_k b_{-k} + a_k^\dagger b_{-k}^\dagger) + E_o^{CF}, \quad (5.30)$$

sendo

$$A_k^{CF} = -2J_1S(\eta(\cos k_y a + \lambda \cos k_z a) - \lambda) + 4J_2S, \quad (5.31)$$

$$B_k^{CF} = -2\eta J_1S \cos k_x a + 4\eta J_2S \cos k_x a \cos k_y a, \quad (5.32)$$

e E_o^{CF} dada por:

$$E_o^{CF} = E_o^{CAF} \quad (5.33)$$

5.4 Magnetização de Subrede

A fim de diagonalizar os Hamiltonianos (5.15), (5.16), (5.34) e (5.38) no espaço dos momentos usaremos a seguinte transformação de Bogoliubov:

$$a_k = \alpha_k \tilde{a}_k + \beta_k \tilde{b}_k^\dagger, \quad (5.34)$$

$$b_k = \beta_k \tilde{a}_k^\dagger + \alpha_k \tilde{b}_k. \quad (5.35)$$

Delas obtemos os produtos

$$a_k a_k^\dagger + b_k^\dagger b_k = (\alpha_k^2 + \beta_k^2)(\tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k + \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k) + 2\beta_k^2 + 2\alpha_k \beta_k (\tilde{a}_k^\dagger \tilde{b}_k + \tilde{a}_k \tilde{b}_k^\dagger), \quad (5.36)$$

$$a_k b_k + a_k^\dagger b_k^\dagger = (\alpha_k^2 + \beta_k^2)(\tilde{a}_k^\dagger \tilde{b}_k + \tilde{a}_k \tilde{b}_k^\dagger) + 2\alpha_k \beta_k (\tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k + \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k) + 2\alpha_k \beta_k. \quad (5.37)$$

Multiplicando o termo que contém $a_k a_k^\dagger + b_k^\dagger b_k$ por A_k e o que contém $a_k b_k + a_k^\dagger b_k^\dagger$ por B_k e agrupando os termos, encontramos:

$$[A_k(\alpha_k^2 + \beta_k^2) + 2\alpha_k \beta_k B_k](\tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k + \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k) + [2\alpha_k \beta_k A_k + (\alpha_k^2 + \beta_k^2) B_k](\tilde{a}_k^\dagger \tilde{b}_k + \tilde{a}_k \tilde{b}_k^\dagger) + const. \quad (5.38)$$

Impondo a condição

$$2\alpha_k \beta_k A_k + (\alpha_k^2 + \beta_k^2) B_k = 0, \quad (5.39)$$

para diagonalizar o operador, encontramos:

$$\alpha_k \beta_k = -\frac{1}{2} \frac{(\alpha_k^2 + \beta_k^2)}{A_k} B_k. \quad (5.40)$$

Definindo

$$\alpha_k = \cosh \theta_k, \quad (5.41)$$

$$\beta_k = -\sinh \theta_k, \quad (5.42)$$

uma vez que a condição para que as transformações (5.34) e (5.35) seja canônica temos $\alpha_k^2 - \beta_k^2 = 1$. Substituindo as Eqs.(5.41) e (5.42) na Eq.(5.40) encontramos a relação entre os coeficientes A_k e B_k , dada por:

$$\tanh 2\theta_k = \frac{B_k}{A_k} \quad (5.43)$$

A relação de dispersão, que corresponde ao segundo termo da Eq. (5.38) será dada por:

$$w_k = A_k(\alpha_k^2 + \beta_k^2) + 2\alpha_k\beta_k B_k = \frac{(A_k^2 - B_k^2)(\alpha_k^2 + \beta_k^2)}{A_k}. \quad (5.44)$$

Usando a Eq.(5.43) e a identidade

$$\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1, \quad (5.45)$$

obtemos

$$w_k = \sqrt{A_k^2 - B_k^2}, \quad (5.46)$$

onde A_k e B_k são os coeficientes associados a cada fase analisada (AF, CAF e CF).

Desta maneira reescrevemos o Hamiltoniano em função destes novos operadores por

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}} w_k (\tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k + \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k) + const. \quad (5.47)$$

Para obter a magnetização por spin da subrede A das respectivas fases, isto é, m_{AF} , m_{CAF} e m_{CF} , vamos calcular a média do operador $a_k a_k^\dagger$ (ou $b_k b_k^\dagger$). Partindo das Eqs.(5.34) e (5.35) obtemos,

$$\langle a_k a_k^\dagger \rangle = \alpha_k^2 \langle \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k \rangle + \beta_k^2 \langle \tilde{b}_k \tilde{b}_k^\dagger \rangle + \alpha_k \beta_k \langle \tilde{a}_k^\dagger \tilde{b}_k^\dagger \rangle + \alpha_k \beta_k \langle \tilde{b}_k \tilde{a}_k \rangle. \quad (5.48)$$

Com o uso da relação de comutação

$$[\tilde{b}_k, \tilde{b}_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'}, \quad (5.49)$$

e o fato de que

$$\langle \tilde{a}_k^\dagger \tilde{b}_k \rangle = \langle \tilde{b}_k \tilde{a}_k \rangle = 0, \quad (5.50)$$

$$\langle \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k \rangle = \langle \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k \rangle, \quad (5.51)$$

reescrevemos a Eq.(5.48) na forma

$$\langle a_k a_k^\dagger \rangle = (\alpha_k^2 + \beta_k^2) \langle \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k \rangle + \beta_k^2. \quad (5.52)$$

Usando a relação trigonométrica

$$\cosh^2(\theta_k) + \sinh^2(\theta_k) = \cosh(2\theta_k), \quad (5.53)$$

e as definições (5.41) e (5.42), a Eq.(5.52) ficará

$$\langle a_k a_k^\dagger \rangle = \langle \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k \rangle \cosh(2\theta_k) + \frac{1}{2}(\cosh(2\theta_k) - 1). \quad (5.54)$$

Da Eq.(5.43) obtemos a relação

$$\cosh(2\theta_k) = \frac{A_k}{w_k}, \quad (5.55)$$

que substituindo na Eq.(5.54) obtemos

$$\langle a_k a_k^\dagger \rangle = \frac{A_k}{2w_k} \left[1 + 2 \langle \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k \rangle \right] - \frac{1}{2}. \quad (5.56)$$

O Hamiltoniano da Eq.(5.47) representa uma coleção de osciladores com energias w_k ($\hbar = 1$) no qual o valor médio do número de ocupação é dado pela distribuição de Bose-Einstein, isto é,

$$\tilde{n}_k = \langle \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k \rangle = \langle \tilde{b}_k^\dagger \tilde{b}_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta w_k} - 1}. \quad (5.57)$$

Substituindo (5.57) na Eq.(5.56) obtemos

$$\langle a_k a_k^\dagger \rangle = \frac{A_k}{2w_k} \left[1 + 2 \frac{1}{e^{\beta w_k} - 1} \right] - \frac{1}{2} = \frac{A_k}{2w_k} \coth\left(\frac{\beta w_k}{2}\right) - \frac{1}{2}. \quad (5.58)$$

O valor médio da magnetização por spin na subrede A é encontrado pela relação

$$m_A = S - \frac{2}{N} \sum_i \langle a_i^\dagger a_i \rangle, \quad (5.59)$$

que com auxílio da transformada de Fourier, finalmente encontramos

$$m_A = S - \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} \langle a_k a_k^\dagger \rangle = S - \frac{1}{2} \left(\frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{A_k}{w_k} \coth\left(\frac{\beta w_k}{2}\right) - 1 \right] \right). \quad (5.60)$$

A magnetização da subrede A no estado fundamental é encontrada tomando o limite $\beta \rightarrow \infty$, isto é:

$$m_A(T = 0) = S \left[1 - \frac{1}{2S} \left(\frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{A_k}{\sqrt{A_k^2 - B_k^2}} - 1 \right] \right) \right]. \quad (5.61)$$

Para cada fase ordenada AF, CAF e CF as soluções numéricas são obtidas fazendo-se as transformações usuais dos somatórios em integrais em d dimensões restritas à primeira zona de Brillouin.

5.5 Estado Ferromagnético (F)

Neste caso o estado fundamental é caracterizado por todos os spins orientados paralelamente, e o Hamiltoniano é dado por

$$\mathcal{H}_F = \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{J_{ij}^{(1)}}{2} \{ \eta (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z \} + \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{J_{ij}^{(2)}}{2} \{ \eta (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z \}, \quad (5.62)$$

com

$$J_{ij}^{(1)} = \begin{cases} -J_1, & \text{no plano} \\ -\lambda J_1, & \text{entre planos} \end{cases},$$

$$J_{ij}^{(2)} = \begin{cases} J_2, & \text{no plano} \\ 0, & \text{entre planos} \end{cases},$$

onde agora só teremos apenas uma subrede.

Usando as transformações dos operadores para uma única subrede A

$$S_i^+ \simeq \sqrt{2S}a_i, \quad (5.63)$$

$$S_i^- \simeq \sqrt{2S}a_i^\dagger, \quad (5.64)$$

$$S_i^z = S - a_i^\dagger a_i, \quad (5.65)$$

e as transformadas de Fourier

$$a_i = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} a_k, \quad (5.66)$$

$$a_i^\dagger = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} a_k^\dagger, \quad (5.67)$$

o Hamiltoniano da Eq.(5.62) ficará reescrito no espaço dos momentos na forma

$$\mathcal{H}_F = E_o^F + \sum_{\vec{k}} w_k^F a_k^\dagger a_k, \quad (5.68)$$

sendo

$$E_o^F = -S^2(J_0^{(1)} - J_0^{(2)})N, \quad (5.69)$$

$$w_k^F = 2S \left[\eta \left(J_k^{(2)} - J_k^{(1)} \right) + J_0^{(1)} - J_0^{(2)} \right], \quad (5.70)$$

$$J_k^{(1)} = 2J_1(\cos k_x a + \cos k_y a + \lambda \cos k_z a), \quad (5.71)$$

e

$$J_k^{(2)} = 4J_2 \cos k_x a \cos k_y a. \quad (5.72)$$

A magnetização da fase ferromagnética é obtida diretamente da definição da média do operador S_z , da transformada de Fourier dos operadores de criação (destruição) $a_i^\dagger(a_i)$ e da transformação dos somatórios em integrais como anteriormente mencionado na Eq.(5.61), ou seja,

$$m = S - \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \langle a_k a_k^\dagger \rangle = S - \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{e^{\beta w_k} - 1}, \quad (5.73)$$

onde em $T = 0$ K temos $m(T = 0) = S$.

5.6 Resultados

Apresentamos nesta seção os resultados da Teoria de Ondas de Spins Linear no Modelo de Heisenberg com Interações Competitivas no plano e interação de primeiros vizinhos λJ_1 entre planos, numa rede cúbica simples. Inicialmente, o caso com interação de primeiros vizinhos antiferromagnética é analisado. Mostramos os comportamentos das magnetizações em função do parâmetro de frustração α e de acoplamento entre planos λ , e a partir destes resultados construímos os diagramas de fase do estado fundamental nos planos $\alpha - \lambda$, $\Delta - \alpha$. Em seguida apresentamos os resultados para a interação de primeiros vizinhos ferromagnética.

A figura 5.1 apresenta, para o estado fundamental ($T = 0$), o comportamento das magnetizações de subrede A das fases antiferromagnética (AF) e colinear antiferromagnética (CAF) em função do parâmetro de frustração $\alpha (= \frac{J_2}{J_1})$ para diversos valores de $\lambda (= 0.0; 0.01; 0.1; 0.2$ e $0.8)$ no limite isotrópico $\Delta = 0$. Esses resultados são encontrados resolvendo numericamente a Eq.(5.61) com os coeficientes dados pelas Eqs.(5.16) e (5.17) para a fase AF e as Eqs.(5.27) e (5.28) da fase CAF. Para todos esses casos observa-se

que o aumento do parâmetro λ (α fixo) torna as fases AF e CAF mais estáveis com $m_{AF}(\lambda = 0.8) > m_{AF}(\lambda = 0.2) > \dots > m_{AF}(\lambda = 0.0)$ e $m_{CAF}(\lambda = 0.8) > m_{CAF}(\lambda = 0.2) > \dots > m_{CAF}(\lambda = 0.0)$, uma vez que as flutuações quânticas são reduzidas gradativamente. As presenças de flutuações quânticas são evidenciadas no fato de $m_A < 0.5$ nas duas fases para os diversos valores de α e λ . No caso bidimensional ($\lambda = 0$), a Teoria de Ondas de Spin Linear (LSW) prevê a existência de uma fase (paramagnética quântica PQ) sem ordem de longo alcance ($m = 0$) intermediária às fases AF e CAF na região $0.38 < \alpha < 0.51$. Esta fase intermediária vai sendo reduzida a medida que o valor de λ cresce, desaparecendo para $\lambda > 0.2$, onde temos uma transição de primeira ordem entre as fases AF e CAF no ponto $\alpha(\lambda) = 1/2$. As transições de fase em $T = 0$, são contínuas entre as fases AF e PQ e descontínuas entre as fases CAF e PQ no limite $2d$. Da mesma forma, para $\lambda > 0$ observamos uma descontinuidade do parâmetro de ordem $m_{CAF}(\alpha)$ quando é atingido o ponto de transição $\alpha_c(\lambda)$, sendo que para $\lambda < 0.2$ temos uma transição de 1ª ordem entre as fases CAF e PQ, enquanto que para $\lambda > 0.2$ esta fase intermediária não existe e observamos uma transição de 1ª ordem entre as fases ordenadas AF e CAF. Estes resultados qualitativos para os comportamentos dos parâmetros de ordem são semelhantes aos obtidos usando EFT (ver figuras 3.14 e 3.32), sendo que a EFT superestima os resultados.

Vimos que o aumento da dimensionalidade, que aqui é simulada através do parâmetro λ , diminui as flutuações quânticas e conseqüentemente o estado paramagnético quântico é destruído existindo apenas estados ordenados (AF e CAF). Uma segunda maneira de diminuir estas flutuações quânticas é através do parâmetro de anisotropia Δ , onde no limite $\Delta = 1$ temos o modelo de Ising (clássico). Em duas dimensões ($\lambda = 0$), o estado intermediário é destruído apenas no caso extremo de $\Delta = 1$, conforme mostramos nas figuras 3.17 e 3.33 usando teoria de campo efetivo em aglomerados com $N=2$ (EFT-2) e $N=4$ (EFT-4) spins, respectivamente. Os valores das propriedades termodinâmicas são superestimados usando EFT. No caso da teoria de ondas de spins, temos resultados mais precisos quando comparamos com as teorias clássicas (EFT). Desta maneira, na figura

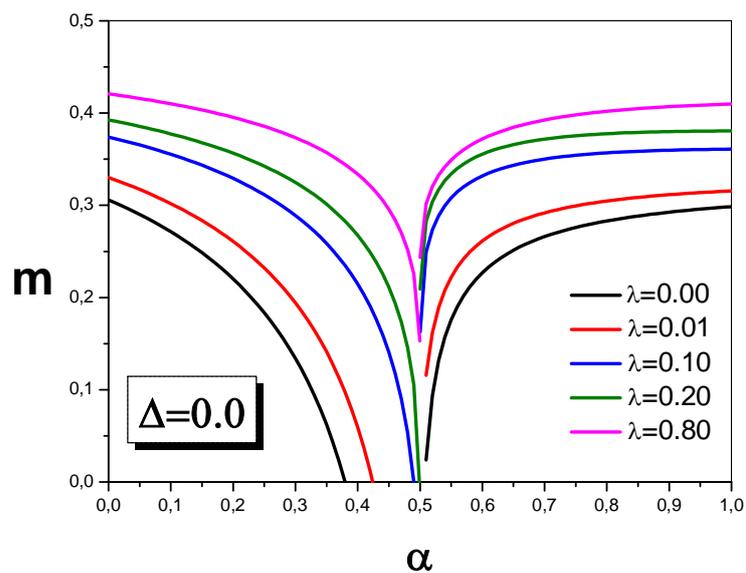


Figura 5.1: Comportamento da magnetização de subrede (parâmetro de ordem) em $T = 0$ dos estados AF e CAF como função do parâmetro de frustração α no modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via Teoria de Ondas de Spin Linear em ordem crescente de λ indicados na figura.

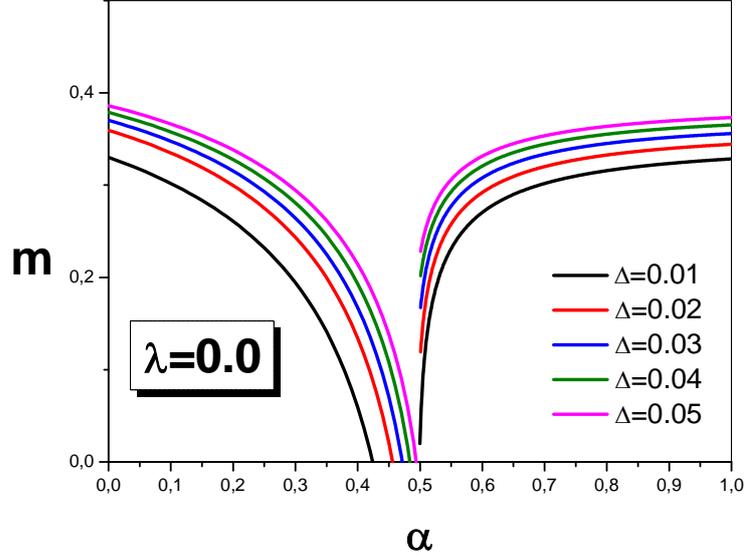


Figura 5.2: Comportamento da magnetização de subrede (parâmetro de ordem) em $T = 0$ dos estados AF e CAF como função do parâmetro de frustração α no modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnético anisotrópico na rede quadrada ($\lambda = 0$) obtido via Teoria de Ondas de Spin Linear para valores crescentes da anisotropia Δ indicados na figura.

5.2 apresentamos o comportamento dos parâmetros de ordem das fases AF e CAF como função do parâmetro de frustração α na rede quadrada ($\lambda = 0$) para diversos valores de anisotropia Δ . Para um pequeno valor da anisotropia ($\Delta > \Delta_c \simeq 0.05$), a fase PQ é destruída e ocorre uma transição de primeira ordem direta entre as fases AF e CAF. Note que no caso de EFT, o estado PQ somente é destruído no limite extremo de $\Delta = 1$, enquanto que ondas de spins apenas um pequeno valor de Δ é suficiente para que a fase PQ desapareça. À medida que Δ cresce, as flutuações quânticas diminuem gradativamente que é manifestada pelo crescimento gradual dos parâmetros de ordem.

Na figura 5.3 apresentamos o diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ do estado fundamental no limite isotrópico ($\Delta = 0$). Três fases distintas estão presentes: a colinear antiferromagnética (CAF), antiferromagnética (AF) e paramagnética quântica (PQ). As transições de fase são de primeira ordem entre as fases CAF e AF ($\lambda \geq 0.20; \alpha = 0.5$)

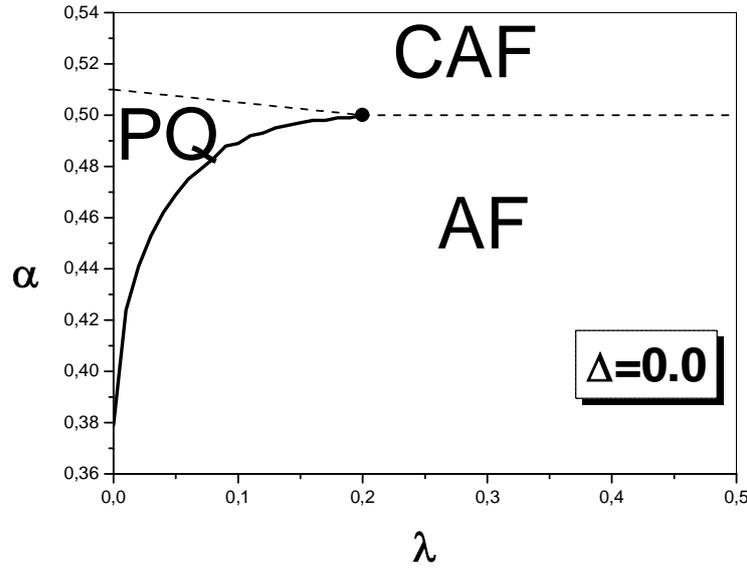


Figura 5.3: Diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ do estado fundamental do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via Teoria de Ondas de Spin Linear. A linha cheia corresponde à transição de 2ª ordem e as tracejadas as transições de 1ª ordem e o ponto em negrito é o ponto crítico terminal quântico. Os símbolos AF, CAF e PQ denotam os estados antiferromagnético, colinear antiferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente.

e entre a fase CAF e PQ e de segunda entre AF e PQ. Em duas dimensões ($\lambda = 0$) a fase PQ se estende, na região de valores de $0.38 < \alpha < 0.509$ e tem essa região cada vez mais estreitada a medida que a interação entre planos é aumentada, desaparecendo completamente quando $\lambda = 0.20$ ($\alpha = 0.5$), aproximadamente.

Na figura 5.4 apresentamos o diagrama de fases no plano $\Delta - \alpha$ do estado fundamental ($T = 0$) em duas dimensões. Três fases distintas estão presentes: AF, CAF e a desordenada PQ. A transição entre as fases $AF \rightleftharpoons PQ$ é de segunda ordem, enquanto que as demais, $CAF \rightleftharpoons AF$ e $CAF \rightleftharpoons PQ$ são de primeira ordem. A igualdade das energias das fases AF (Eq. 4.18) e CAF (Eq. 4.29) indicam que $\alpha = 0.5$, independentemente do valor associado a λ . Com isto construímos a linha de transição $AF \rightleftharpoons CAF$. As linhas de

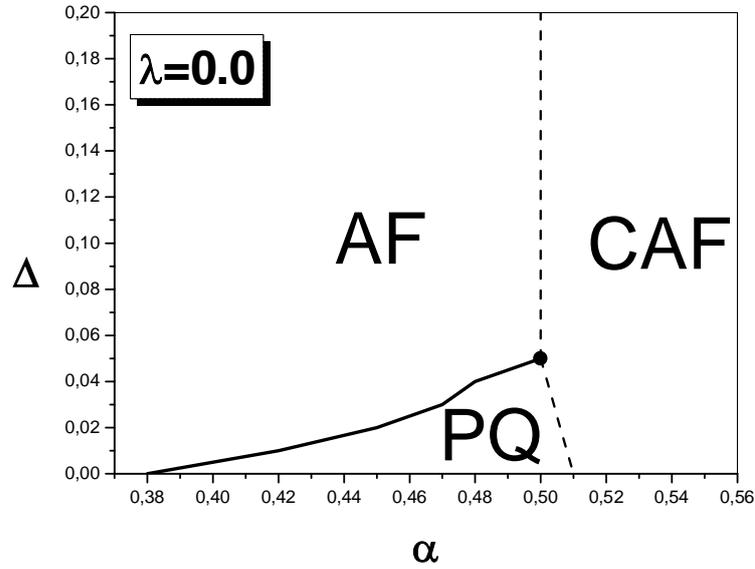


Figura 5.4: Diagrama de fases no plano $\Delta - \alpha$ do estado fundamental do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnético anisotrópico na rede quadrada ($\lambda = 0$) obtido via Teoria de Ondas de Spin Linear para interação de primeiros vizinhos antiferromagnética ($J_1 > 0$). A linha cheia corresponde a transição de 2ª ordem e as tracejadas as transições de 1ª ordem e o ponto em negrito é o ponto crítico terminal quântico. Os símbolos AF, CAF e PQ denotam os estados antiferromagnético, colinear antiferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente.

transição $AF \rightleftharpoons PQ$ e $CAF \rightleftharpoons PQ$, foram construídas mediante análise do comportamento dos respectivos parâmetros de ordem (ver figura 5.2). Para $\Delta > 0.05$ o estado PQ é destruído e temos uma direta transição de primeira ordem entre as fases AF e CAF.

Vamos a seguir investigar as propriedades termodinâmicas em $T = 0$, em particular os parâmetros de ordem, para o modelo frustrado ferromagnético. Contrário ao caso AF, o sistema ferromagnético tem sido muito pouco explorado na literatura. A priori, as flutuações quânticas são menos acentuadas no modelo frustrado ferromagnético e devemos esperar, assim como observamos os resultados EFT, uma redução da região desordenada.

Na figura 5.5 apresentamos o comportamento da magnetização espontânea do estado fundamental ($T = 0$) nos estados F e CF, no limite isotrópico ($\Delta = 0$). As curvas são

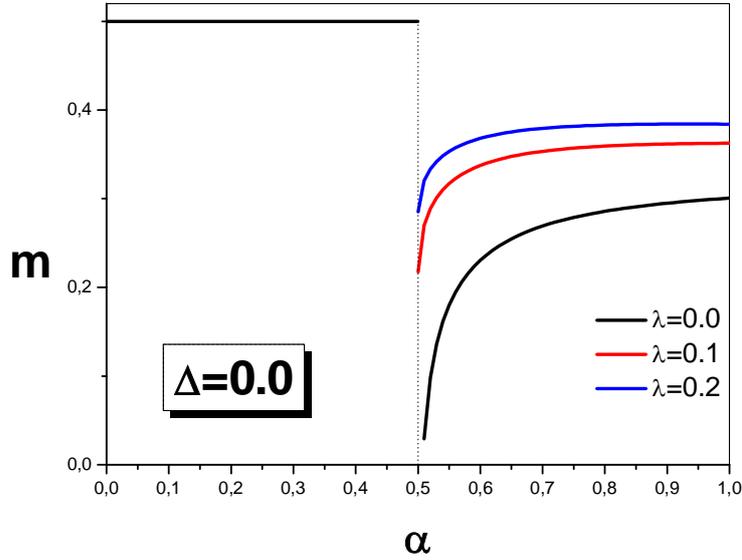


Figura 5.5: Comportamento da magnetização de subrede (parâmetro de ordem) em $T = 0$ dos estados F e CF como função do parâmetro de frustração α no modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg ferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via Teoria de Ondas de Spin Linear em ordem crescente de λ indicado na figura.

construídas numericamente com o uso das Eqs.(5.81) e de (5.78), (5.79) e (5.80) no caso F e das Eq.(5.69) com os coeficientes dados pelas Eqs.(5.39) e (5.40) para a fase CF. Para todos os valores de λ escolhidos, as curvas de magnetização da fase ferromagnética caem sobre si mesmas com o valor $m_F = 0.5$ para todo α no intervalo $[0, \frac{1}{2}]$ indicando ausência de flutuação quântica. Essas flutuações são bastante evidentes na fase CF, com $m_{CF} < 0.5$. À medida que o acoplamento entre planos fica cada vez mais forte a magnetização m_{CF} aumenta para um mesmo α fixo, indicando a maior estabilidade da ordem CF com o crescimento do parâmetro λ .

A partir da análise dos resultados do comportamento dos parâmetros de ordem m_F e m_{CF} , construímos na figura 5.6 o diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ no limite isotrópico ($\Delta = 0$). Todas as transições de fase são de primeira ordem com as linhas interceptando-se no ponto triplo quântico ($\lambda_t = 0.01$, $\alpha_t = 1/2$).

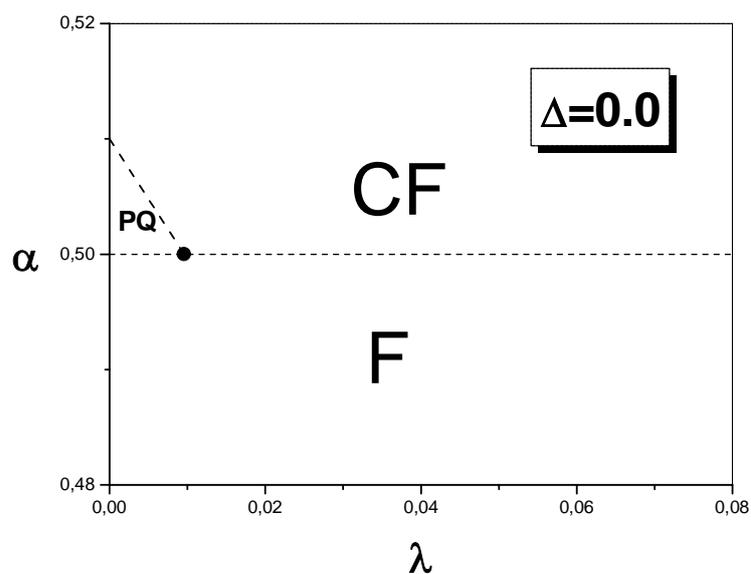


Figura 5.6: Diagrama de fases no plano $\alpha - \lambda$ do estado fundamental do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg ferromagnético isotrópico ($\Delta = 0$) obtido via Teoria de Ondas de Spin Linear para a interação de primeiros vizinhos ferromagnética. As linhas tracejadas correspondem às transições de 1ª ordem e o ponto em negrito é o ponto triplo quântico. Os símbolos F, CF e PQ denotam os estados ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente.

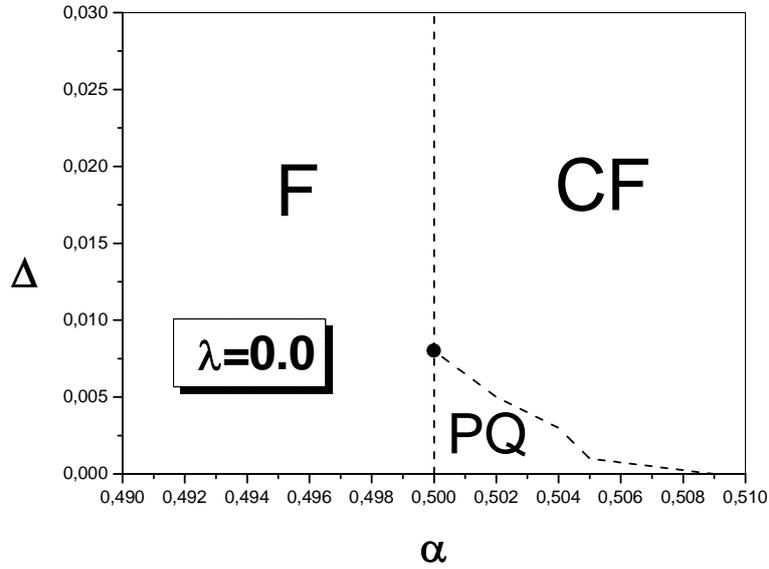


Figura 5.7: Diagrama de fases no plano $\Delta - \alpha$ do estado fundamental do modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg ferromagnético anisotrópico na rede quadrada ($\lambda = 0$) obtido via Teoria de Ondas de Spin Linear. As linhas tracejadas correspondem às transições de 1ª ordem e o ponto em negrito é o ponto triplo quântico. Os símbolos F, CF e PQ denotam os estados ferromagnético, colinear ferromagnético e paramagnético quântico, respectivamente.

Finalmente na figura 5.7 mostramos o diagrama de fases no plano $\Delta - \alpha$ no limite da rede quadrada ($\lambda = 0$). Todas as linhas de transição são de primeira ordem, também interceptando-se no ponto triplo ($\Delta_t = 0.05$, $\alpha_t = 1/2$). Note que para $\Delta > \Delta_t$ a fase PQ é destruída e uma transição direta entre as fases F e CF ocorre no ponto $\alpha_t = 1/2$ independentemente do valor da anisotropia.

Referências

- [1] P. Chandra e B. Doucot, *Phys. Rev. B* **38**, 9335 (1988).
- [2] L. B. Ioff e A. I. Larkin, *Mod. Phys. B.* **2**, 203 (1988).
- [3] H. J. Schulz, T. A. L. Ziman e D. Poiblanç, *J. Phys. I France* **6**, 675 (1996).
- [4] H. J. Schulz, T. A. L. Ziman e D. Poiblanç, *Europhys. Lett.* **18**, 355 (1992).
- [5] J. Richter, N. B. Ivanov e K. Retzlaff, *Europhys. Lett.* **25**, 545 (1994).
- [6] N. B. Ivanov e J. Richter, *J. Phys. Cond. Matter* **6**, 3785 (1994).
- [7] R. R. P. Sing, Zheng Weihong, C. J. Hamer e J. Oitmaa, *Phys. Rev. B* **60**, 7278 (1999).
- [8] L. Spanu e A. Parola, *Phys. Rev. B* **73**, 94427 (2006).
- [9] V. Lante e A. Parola, *Phys. Rev. B* **73**, 94427 (2006).
- [10] R. Darradi, J. Richter e D. J. J. Farnell, *Phys. Rev. B* **72**, 104425 (2005).
- [11] J. Sirker, Zheng Weihong, O. O. Sushkov e J. Oitamaa, *Phys. Rev. B* **73**, 184420 (2006).
- [12] P. Sindzingre, *Phys. Rev. B* **69**, 94418 (2004).
- [13] R. F. Bishop, P. H. Y. Li, R. Darradi, J. Schulenburg e J. Richter, *Phys. Rev. B* **78**, 054412 (2008).

- [14] R. Darradi, J. Richter, J. Schulenburg, R. F. Bishop e P. H. Y. Li, *J. Phys.: Conference Series* **145**, 012049 (2009).
- [15] R. Darradi, O. Derzhko, R. Zinke, J. Schulenburg, S. E. Kruger e J. Richter, *Phys. Rev. B* **78**, 214415 (2008).
- [16] L. Isaev, G. Ortiz e J. Dukelky, *Phys. Rev. B.* **79**, 024409 (2009).
- [17] J. Roberto Viana e J. Ricardo de Sousa, *Phys. Rev. B.* **75**, 052403 (2007).
- [18] J. Roberto Viana, M. Continentino e J. Ricardo de Sousa, *Phys. Rev. B.* **77**, 172412 (2008).
- [19] W. A. S. Nunes, J. Roberto Viana, J. Ricardo de Sousa e J. Richter, *J. Phys. Cond. Matter* **22**, 146004 (2010).
- [20] K. Majumdar e T. Datta, *J. Phys. Cond. Matter* **21**, 406004 (2009), *ibid J. Stat. Phys.* **139**, 714 (2010).
- [21] S. Schmalhub, R. Darradi, J. Richter e D. Ihle, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 1572011 (2006).
- [22] J. Richter , R. Darradi, J. Schulenburg, D. J. J. Farnell e H. Rosner, *Phys. Rev. B* **81**, 174429 (2010).
- [23] P. Carretta, R. Melzi, N. Papinutto e P. Millet, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 04701 (2002); H. Rosner, et al., *Phys. Rev. Lett.* **88**, 186405 (2002); R. Melzi, et al, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1318 (2000).
- [24] A. A. Tsirlin, et al. *Phys. Rev. B* **77**, 092402 (2008); K. Oka, et al. *Inorg. Chem.* **47**, 7355 (2008).
- [25] E. E. Kaul, et al., *J. Magn. Magn. Matter* **272-276**, 992 (2009).

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas Futuras

O principal objetivo desse trabalho foi o estudo das transições de fases quânticas em modelos com interações competitivas (modelo $J_1 - J_2$) através dos formalismos da Teoria de Campo Efetivo (EFT) e ondas de spins. Embora este modelo tenha sido bastante estudado na literatura a pelo menos duas décadas pelas mais diversas técnicas, vários pontos na construção do diagrama de fases permanecem obscuros, necessitando serem entendidos. Técnicas mais sofisticadas como a Função de Green (F.G.), expansão em série e simulações de Monte Carlo apresentam dificuldades na identificação do tipo de transição, enquanto que, a EFT proporciona a correta visualização da transição.

A característica fundamental deste modelo é a presença de frustração quando as interações de primeiros vizinhos são ferromagnéticas ($J_1 < 0$) ou antiferromagnéticas ($J_1 > 0$) e a de segundos vizinhos é antiferromagnética. A excentricidade que o modelo exibe, sobretudo para o caso AF, com o surgimento de novos estados magnéticos em baixas dimensões e temperaturas, e, as possíveis conexões com a supercondutividade foi um fator impulsionador para o presente trabalho. Entretanto, o caso F, aparentemente pelo possível menor grau de excentricidade comparativamente ao caso AF, foi muito pouco estudado na literatura e a descoberta de novos compostos de vanádio (descritos teoricamente pelo modelo $J_1 - J_2$) supercondutores com interação de primeiros vizinhos F foi outro ponto de grande interesse na realização do trabalho. Simulando os efeitos da

dimensionalidade e da anisotropia construímos o modelo de Heisenberg anisotrópico com interações competitivas no plano e interação de primeiros vizinhos λJ_1 entre planos (i.e. frustrado somente no plano), numa rede cúbica simples, com limite da rede quadrada para $\lambda = 0$.

Na primeira parte do trabalho, capítulo 3, usamos a Teoria de Campo Efetivo em aglomerados com dois spins (EFT-2) e com quatro spins (EFT-4). De acordo com o tipo de interação de primeiros vizinhos, F ou AF, conseguimos determinar qualitativamente o “correto” diagrama de fases no estado fundamental ($T = 0$) em função dos parâmetros contidos no Hamiltoniano: as anisotropias de exchange (Δ) e espacial (λ), e da frustração $\alpha = J_2/J_1$. Para a interação de primeiros vizinhos AF, os estados presentes no estado fundamental, de acordo com os valores de λ e Δ , foram AF, CAF e PQ, onde o estado colinear antiferromagnético é caracterizado por linhas com mesma orientação dos spins adjacentes a linhas com orientações opostas em todas as direções. As transições de fases determinadas foram de 2^a ordem entre as fases AF e PQ e de 1^a ordem entre as fases PQ e CAF, e entre AF e CAF. Os limites clássicos e quânticos do modelo foram estimados com a determinação dos parâmetros críticos λ_c e Δ_c que simulam, respectivamente, o “crossover” de dimensionalidade (para $\lambda < \lambda_c$ o sistema é caracterizado por presença de flutuações quânticas ($2d$) e para $\lambda > \lambda_c$ ocorrem ausências de flutuações quânticas ($3d$)) e a existência de um novo fenômeno no qual as flutuações quânticas permanecem para $\Delta < \Delta_c$ e que desaparecem, mesmo em $2d$, para $\Delta > \Delta_c$. Para o caso de interação de primeiros vizinhos F, pouquíssimo discutido na literatura, os estados presentes no diagrama são F, CF (planos com mesma orientação dos spins adjacentes a planos com orientações opostas) e uma pequena fase desordenada PQ é prevista, diferindo drasticamente de outras técnicas que não preveem a existência deste estado. Verificamos neste caso que as transições entre as referidas fases são todas de 1^a ordem. Da mesma forma que para o caso com primeira interação AF os parâmetros críticos λ_c e Δ_c foram determinados, sendo a existência do estado PQ muito mais sensível às variações de λ e Δ do que no caso AF.

Em duas dimensões, os estados CAF e CF são equivalentes (linhas alternadas com orientações opostas entre os spins), porém em três dimensões esses estados são completamente diferentes. Isto é, de acordo com os nossos formalismos de EFT-2 e EFT-4, e a partir do modelo de interação entre planos, fomos capazes de concluir, a partir do caso $2d$, como o sistema se estabiliza em $3d$ em cada caso, com interação de primeiros vizinhos F ou AF. No caso AF, o estado tridimensional de menor energia é formado por linhas de spins com mesma orientação adjacentes a linhas com orientação oposta (CAF). Enquanto que, no caso F, o estado de menor energia é formado por planos com mesma orientação dos spins adjacentes a planos com orientação oposta (CF). Isto foi testado construindo os modelos com planos alternados para o caso AF e linhas alternadas para o caso F e fazendo o limite $\lambda = 0$ ($2d$) verificando que nesses casos o estado em duas dimensões não é reproduzido. Além disso, para esses estados no qual o modelo foi baseado, as flutuações quânticas aumentariam com o aumento da anisotropia espacial λ , fato este não esperado fisicamente.

Em temperatura finita investigamos os diagramas de fases T versus α nos dois casos citados anteriormente. No caso antiferromagnético, as fases presentes são AF, P e CAF e verificamos de que maneira a interação entre planos λ interfere no diagrama de fases, onde para $\lambda < \lambda_c$ a fase paramagnética (P) está sempre presente entre as fases AF e CAF para todo intervalo de temperatura ($T > 0 K$), enquanto que para $\lambda > \lambda_c$ e dependendo do valor da temperatura o estado P é intermediário ou não entre os estados AF e CAF, isto é, para $T < T(\lambda)$ existe uma transição direta (1^a ordem) entre os estados AF e CAF e para $T > T(\lambda)$ não existe transição direta. No caso ferromagnético, encontramos transição de 1^a e 2^a ordens entre as fases F e P (com presença de ponto tricrítico) assim como entre as fases P e CF.

Investigamos o modelo $J_1 - J_2$ Heisenberg numa rede cúbica anisotrópica também através da teoria de onda de spins. Os resultados qualitativos dos diagramas de fases no estado fundamental estão de acordo com os resultados encontrados obtidos por EFT. Desta maneira acreditamos que nossos resultados estão fisicamente corretos e que métodos

mais sofisticados deverão reproduzir os diversos diagramas de fases obtidos nesta tese.

Algumas aplicações futuras foram vislumbradas durante a realização deste trabalho, como por exemplo:

- 1) Trabalhar com o modelo incluindo diluição e verificar sua influência na existência da fase PQ, isto é, verificar seus efeitos sobre as flutuações quânticas.
- 2) Estudar o modelo com presença de campo transversal e analisar sua influência nas transições de fases.
- 3) Analisar as propriedades termodinâmicas do modelo com e sem diluição.
- 4) Investigar a fase líquido de spins com spin $S > 1/2$.
- 5) Calcular o gap de energia no modelo $J_1 - J_2$ quântico e conseqüentemente obter o expoente dinâmico z .
- 6) Utilizar outras aproximações para melhoria quantitativa dos resultados.

Apêndice A

Procedimentos Numéricos

Durante a obtenção dos diagramas de fase e na construção do parâmetro de ordem nos modelos estudados nesta tese pela Teoria de Campo Efetivo em aglomerados com 4 spins (EFT-4) diagonalizamos matrizes de ordem $n = 16$. Para isto foi necessário encontrar as raízes do polinômio característico, associado a matriz do Hamiltoniano, de grau 16. Como se sabe a solução algebricamente fechada para determinação das raízes de um polinômio $p(x)$ é dada até o grau 4. Sendo assim, para matrizes de ordens $n \geq 5$ torna-se necessário a utilização de algum método para diminuir o grau do polinômio a cada vez que uma raiz é determinada. A repetição sucessiva do método nos levaria então ao cálculo de todas as raízes escrevendo o polinômio em sua forma fatorada e determinando o conjunto de valores característicos, encontrando a base de autoestados, isto é, diagonalizando o Hamiltoniano.

A.1 Processo de Diagonalização de Matrizes de Ordem 16

Vamos descrever explicitamente a forma utilizada na diagonalização das matrizes, de ordem 16, relativas aos Hamiltonianos dos diversos ordenamentos AF, CAF, CF e F na Teoria de Campo Efetivo (EFT-4). Vamos seguir fazendo o mesmo procedimento real-

izado em aglomerado com N=2 (EFT-2) spins construindo a matriz relativa ao operador Hamiltoniano do aglomerado com N=4 spins. Indicaremos o procedimento realizado diagonalizando o Hamiltoniano reduzido do estado antiferromagnético e para os demais estados o procedimento será análogo.

A.1.1 Construção das Matrizes

A base do espaço produto de quatro spins é formada pelo produto tensorial

$$\{|\phi_1^\pm\rangle \otimes |\phi_2^\pm\rangle \otimes |\phi_3^\pm\rangle \otimes |\phi_4^\pm\rangle \equiv |\pm \pm \pm \pm\rangle\}$$

das bases do espaço relativo a cada spin individual $\{|\phi_i^\pm\rangle = \{|+\rangle_i, |-\rangle_i\}$ $i = 1, 2, 3, 4$ de valor $S = 1/2$. De um modo geral, o ordenamento adequado da base na qual a matriz é construída diminui consideravelmente nosso trabalho de obtenção dos seus autovalores (e autovetores) através da construção de matrizes em blocos. No caso específico de Hamiltonianos que envolvem operadores de spins esses blocos são relativos aos subespaços gerados por configurações de spins com spin total $S^z = \sum_{i=1}^N S_i^z$. Por exemplo, em aglomerados com N=4 spins o spin total das diversas configurações que quatro spins podem assumir são dados pelo seguinte conjunto de valores: -2, 0, -1, +1, +2 com $S_i = 1/2$ e as matrizes em blocos correspondentes terão dimensões 1, 4, 6, 4 e 1, respectivamente. Designaremos por $[B_1^{S=2}]$, $[B_4^{S=1}]$, $[B_6^{S=0}]$, $[B_4^{S=-1}]$ e $[B_1^{S=-2}]$ esses blocos. As bases dos blocos de matrizes com spins totais 2 e -2 são formadas, respectivamente, pelos kets do espaço produto $\{|1\rangle\} = \{|++++\rangle\}$ e $\{|16\rangle\} = \{|----\rangle\}$. Para os blocos maiores as bases

são construídas da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \text{Base de } [B_4^{S=1}] &= \{|2\rangle = |+++ \rangle; |3\rangle = |++- \rangle; |4\rangle = |+ - + \rangle; \\ &|5\rangle = |- + + \rangle\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Base de } [B_6^{S=0}] &= \{|6\rangle = |++-- \rangle; |7\rangle = |+-+- \rangle; |8\rangle = |+-- + \rangle; \\ &|9\rangle = |-++- \rangle; |10\rangle = |-+-+ \rangle; |11\rangle = |--++ \rangle\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Base de } [B_4^{S=-1}] &= \{|12\rangle = |+- -- \rangle; |13\rangle = |-+ -- \rangle; |14\rangle = |--+- \rangle; \\ &|15\rangle = |-- -+ \rangle\}. \end{aligned}$$

Desta maneira cada matriz em bloco será dada por

$$[B_1^{S=2}] = [\langle 1 | \mathcal{H}_4 | 1 \rangle]$$

$$[B_1^{S=-2}] = [\langle 16 | \mathcal{H}_4 | 16 \rangle].$$

$$[B_4^{S=2}] = \begin{bmatrix} \langle 2 | \mathcal{H}_4 | 2 \rangle & \langle 3 | \mathcal{H}_4 | 2 \rangle & \langle 4 | \mathcal{H}_4 | 2 \rangle & \langle 5 | \mathcal{H}_4 | 2 \rangle \\ \langle 2 | \mathcal{H}_4 | 3 \rangle & \langle 3 | \mathcal{H}_4 | 3 \rangle & \langle 4 | \mathcal{H}_4 | 3 \rangle & \langle 5 | \mathcal{H}_4 | 3 \rangle \\ \langle 2 | \mathcal{H}_4 | 4 \rangle & \langle 3 | \mathcal{H}_4 | 4 \rangle & \langle 4 | \mathcal{H}_4 | 4 \rangle & \langle 5 | \mathcal{H}_4 | 4 \rangle \\ \langle 2 | \mathcal{H}_4 | 5 \rangle & \langle 3 | \mathcal{H}_4 | 5 \rangle & \langle 4 | \mathcal{H}_4 | 5 \rangle & \langle 5 | \mathcal{H}_4 | 5 \rangle \end{bmatrix}$$

$$[B_4^{S=0}] = \begin{bmatrix} \langle 6 | \mathcal{H}_4 | 6 \rangle & \langle 7 | \mathcal{H}_4 | 6 \rangle & \langle 8 | \mathcal{H}_4 | 6 \rangle & \langle 9 | \mathcal{H}_4 | 6 \rangle & \langle 10 | \mathcal{H}_4 | 6 \rangle & \langle 11 | \mathcal{H}_4 | 6 \rangle \\ \langle 6 | \mathcal{H}_4 | 7 \rangle & \langle 7 | \mathcal{H}_4 | 7 \rangle & \langle 8 | \mathcal{H}_4 | 7 \rangle & \langle 9 | \mathcal{H}_4 | 7 \rangle & \langle 10 | \mathcal{H}_4 | 7 \rangle & \langle 11 | \mathcal{H}_4 | 7 \rangle \\ \langle 6 | \mathcal{H}_4 | 8 \rangle & \langle 7 | \mathcal{H}_4 | 8 \rangle & \langle 8 | \mathcal{H}_4 | 8 \rangle & \langle 9 | \mathcal{H}_4 | 8 \rangle & \langle 10 | \mathcal{H}_4 | 8 \rangle & \langle 11 | \mathcal{H}_4 | 8 \rangle \\ \langle 6 | \mathcal{H}_4 | 9 \rangle & \langle 7 | \mathcal{H}_4 | 9 \rangle & \langle 8 | \mathcal{H}_4 | 9 \rangle & \langle 9 | \mathcal{H}_4 | 9 \rangle & \langle 10 | \mathcal{H}_4 | 9 \rangle & \langle 11 | \mathcal{H}_4 | 9 \rangle \\ \langle 6 | \mathcal{H}_4 | 10 \rangle & \langle 7 | \mathcal{H}_4 | 10 \rangle & \langle 8 | \mathcal{H}_4 | 10 \rangle & \langle 9 | \mathcal{H}_4 | 10 \rangle & \langle 10 | \mathcal{H}_4 | 10 \rangle & \langle 11 | \mathcal{H}_4 | 10 \rangle \\ \langle 6 | \mathcal{H}_4 | 11 \rangle & \langle 7 | \mathcal{H}_4 | 11 \rangle & \langle 8 | \mathcal{H}_4 | 11 \rangle & \langle 9 | \mathcal{H}_4 | 11 \rangle & \langle 10 | \mathcal{H}_4 | 11 \rangle & \langle 11 | \mathcal{H}_4 | 11 \rangle \end{bmatrix}$$

$$[B_4^{S=-2}] = \begin{bmatrix} \langle 12 | \mathcal{H}_4 | 12 \rangle & \langle 13 | \mathcal{H}_4 | 12 \rangle & \langle 14 | \mathcal{H}_4 | 12 \rangle & \langle 15 | \mathcal{H}_4 | 12 \rangle \\ \langle 12 | \mathcal{H}_4 | 13 \rangle & \langle 13 | \mathcal{H}_4 | 13 \rangle & \langle 14 | \mathcal{H}_4 | 13 \rangle & \langle 15 | \mathcal{H}_4 | 13 \rangle \\ \langle 12 | \mathcal{H}_4 | 14 \rangle & \langle 13 | \mathcal{H}_4 | 14 \rangle & \langle 14 | \mathcal{H}_4 | 14 \rangle & \langle 15 | \mathcal{H}_4 | 14 \rangle \\ \langle 12 | \mathcal{H}_4 | 15 \rangle & \langle 13 | \mathcal{H}_4 | 15 \rangle & \langle 14 | \mathcal{H}_4 | 15 \rangle & \langle 15 | \mathcal{H}_4 | 15 \rangle \end{bmatrix}$$

Para o caso AF, cada um dos elementos de matriz acima (produto escalar) é calculado substituindo \mathcal{H}_4 por $-\beta\mathcal{H}_4^{AF}$ dado na Eq.(3.42), onde $\beta = 1/k_B T$. Para simplificar um pouco mais o desenvolvimento vamos a partir de agora trabalhar com os operadores de Pauli. Desta maneira, usando as expressões

$$\begin{aligned} \sigma_i^x |\pm\rangle_i &= |\mp\rangle_i \\ \sigma_i^y |\pm\rangle_i &= \pm i |\mp\rangle_i \\ \sigma_i^z |\pm\rangle_i &= \pm |\pm\rangle_i \end{aligned} \tag{A.1}$$

as formas explícitas das matrizes em blocos anteriores são:

$$[B_1^{S=2}] = [K(4 + 2\alpha) + C1 + C2 + C3 + C4]$$

$$[B_1^{S=-2}] = [K(4 + 2\alpha) - C1 - C2 - C3 - C4]$$

$$[B_4^{S=2}] = \begin{bmatrix} b_{11}^{S=2} & W & \alpha W & W \\ W & b_{22}^{S=2} & W & \alpha W \\ \alpha W & W & b_{33}^{S=2} & W \\ W & \alpha W & W & b_{44}^{S=2} \end{bmatrix}$$

onde

$$b_{11}^{S=2} = C1 + C2 + C3 - C4$$

$$b_{11}^{S=2} = C1 + C2 - C3 + C4$$

$$b_{11}^{S=2} = C1 - C2 + C3 + C4$$

$$b_{11}^{S=2} = -C1 + C2 + C3 + C4$$

$$[B_4^{S=-2}] = \begin{bmatrix} b_{11}^{S=-2} & W & \alpha W & W \\ W & b_{22}^{S=-2} & W & \alpha W \\ \alpha W & W & b_{33}^{S=-2} & W \\ W & \alpha W & W & b_{44}^{S=-2} \end{bmatrix}$$

$$b_{11}^{S=-2} = C1 - C2 - C3 - C4$$

$$b_{22}^{S=-2} = -C1 + C2 - C3 - C4$$

$$b_{33}^{S=-2} = -C1 - C2 + C3 - C4$$

$$b_{44}^{S=-2} = -C1 - C2 - C3 + C4$$

$$B_4^{S=0} = \begin{bmatrix} b_{11}^{S=0} & W & \alpha W & \alpha W & W & 0 \\ W & b_{22}^{S=0} & W & W & 0 & W \\ \alpha W & W & b_{33}^{S=0} & 0 & W & \alpha W \\ \alpha W & W & 0 & b_{44}^{S=0} & W & \alpha W \\ W & 0 & W & W & b_{55}^{S=0} & W \\ 0 & W & \alpha W & \alpha W & W & b_{66}^{S=0} \end{bmatrix}$$

onde

$$\begin{aligned}
b_{11}^{S=0} &= -2aK + C1 + C2 - C3 - C4 \\
b_{22}^{S=0} &= -4K + 2aK + C1 - C2 + C3 - C4 \\
b_{33}^{S=0} &= -2aK + C1 - C2 - C3 + C4 \\
b_{44}^{S=0} &= -2aK - C1 + C2 + C3 - C4 \\
b_{55}^{S=0} &= -4K + 2aK - C1 + C2 - C3 + C4 \\
b_{66}^{S=0} &= -2aK - C1 - C2 + C3 + C4
\end{aligned}$$

$W = 2K(1 - \Delta)$, $\alpha = J_2/J_1$ e os termos $C_i (i = 1, 2, 3, 4)$ são dados pelas equações (3.45-3.53).

A.1.2 Diagonalização Numérica

A magnetização de subrede (parâmetro de ordem) de cada uma das fases investigadas em aglomerado com $N=4$ spins é encontrada através da derivada da função de partição $Z_4(\vec{x})$, isto é

$$m_A = \left\langle \frac{\partial \ln Z_4(\vec{x})}{\partial x_1} \right\rangle \quad (\text{A.2})$$

com

$$Z_4(\vec{x}) = \text{Tr}_{\{\sigma\}} e^{-\beta \mathcal{H}_4^{AF}(\vec{x})}, \quad (\text{A.3})$$

onde a representação matricial do operador é $-\beta \mathcal{H}_4^{AF}$ dada por

$$-\beta \mathcal{H}_4^{AF} = \begin{bmatrix} [B_4^{S=2}] & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & [B_4^{S=1}] & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & [B_4^{S=0}] & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & [B_4^{S=-1}] & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & [B_4^{S=-2}] \end{bmatrix}, .$$

onde os blocos são os indicados anteriormente. Queremos diagonalizar a matriz e determinar o seu conjunto de autovalores (espectro) para obtenção da função de partição. Determinamos o espectro através da obtenção do polinômio característico gerado a partir da equação secular

$$\det(-\beta\mathcal{H}_4^{AF} - \lambda_k I) = 0,$$

onde λ_k é o conjunto de autovalores. Escolhemos trabalhar com os métodos de Briot-Ruffini e de Newton-Raphson para calcular o valor polinômio característico $p(\lambda)$ e para a convergência das raízes desejadas, respectivamente.

O método de Briot-Ruffini (também conhecido como método da divisão sintética) é um método iterativo que consiste em escrever um polinômio $p(x)$ de grau n em sua forma fatorada, isto é

$$p(x) = \sum_{i=1}^n (x - \alpha_i), \quad (\text{A.4})$$

onde α_i são as raízes de $p(x)$. Por exemplo, seja $p(x)$ de grau n

$$p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + a_{n-2} x^{n-2} + \dots + a_0. \quad (\text{A.5})$$

Sendo α um número qualquer, podemos escrever $p(x)$ como o produto de um polinômio de grau 1 $(x - \alpha)$ por um polinômio $Q_{n-1}(x)$ de grau $n - 1$ mais o resto $R(x)$, isto é

$$p(x) = (x - \alpha)Q_{n-1}(x) + R(x). \quad (\text{A.6})$$

Derivando $p(x)$ com relação a x encontramos

$$p'(x) = Q_{n-1}(x) + (x - \alpha)Q'_{n-1}(x) + R'(x) \quad (\text{A.7})$$

Se $\alpha = \alpha_1$ é raiz de $p(x)$ então teremos

$$R(x) = 0 \quad (\text{A.8})$$

$$p(x) = (x - \alpha_1)Q_{n-1}(x), \quad Q_{n-1}(x) \neq 0 \quad (\text{A.9})$$

$$p'(\alpha_1) = Q_{n-1}(\alpha_1), \quad (\text{A.10})$$

de modo que, da igualdade dos polinômios $p'(\alpha_1) = Q_{n-1}(\alpha_1)$, os coeficientes de $p'(x)$ e de $Q_{n-1}(x)$ serão os mesmos. E assim, determinando a raiz α_1 determinamos $Q_{n-1}(x)$. Procedendo da mesma maneira para os polinômios $Q_{n-1}(x)$, $Q_{n-2}(x)$, etc encontraremos a forma fatorada (Eq. A3). Desta maneira podemos combinar os métodos de Newton-Raphson e de Briot-Ruffini para encontrarmos todas as raízes do polinômio de grau n . Vamos explicitar o que estamos mencionando, considerando $p(x)$ dado na forma a seguir:

$$p(x) = a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0. \quad (\text{A.11})$$

Os coeficientes b_i do polinômio $Q_2(x)$ são obtidos pelo método de Briot-Ruffini através do seguinte método iterativo

$$b_i = a_i + b_{i+1} \alpha, \quad i = (m-1)(m-2), \dots, 3, 2, 1, 0. \quad (\text{A.12})$$

Desta maneira teremos para o polinômio dado pela Eq.(A.11),

$$b_3 = a_3 \quad (\text{A.13})$$

$$b_2 = a_2 + b_3\alpha = a_2 + a_3\alpha \quad (\text{A.14})$$

$$b_1 = a_1 + a_2\alpha + a_3\alpha^2 \quad (\text{A.15})$$

$$b_0 = a_0 + b_1\alpha \quad (\text{A.16})$$

Da Eq. A12 podemos observar que os coeficientes b_i são os mesmos coeficientes do

polinômio obtido pela derivação de $p(x)|_{x=\alpha}$, isto é

$$p'(\alpha) = b_2\alpha^2 + b_1\alpha + b_0. \quad (\text{A.17})$$

Conhecendo-se $p(x)$ e $p'(x)$, utilizamos o método de Newton-Raphson,

$$x_{n+1} = x_n - \frac{p(x_n)}{p'(x_n)} \quad (\text{A.18})$$

para determinar cada raiz de α_i de $p(x)$. A determinação de uma das raízes para o polinômio $p(x)$, a partir do método iterativo de Briot-Ruffini dado pela Eq.(A.18), deve parar somente quando $p(x_n = \alpha_i) \leq \text{abs}(\epsilon)$, onde ϵ é o zero adotado para a função.

Com a determinação das raízes encontramos numericamente a função de partição $Z_4(\vec{x})$ e o parâmetro de ordem da fase correspondente a diagonalização realizada é encontrado através da derivação numérica

$$\frac{\partial Z_4(x_1, x_2, x_3, x_4)}{\partial x_1} = \frac{1}{2\Delta} [Z_4(x_1 + \Delta, x_2, x_3, x_4) - Z_4(x_1 - \Delta, x_2, x_3, x_4)], \quad (\text{A.19})$$

usando a Eq.(A.3), onde x_1 é algum parâmetro associado à componente de spin S_1^z presente no Hamiltoniano. Para esta derivada numérica temos verificado um problema relativo ao valor de Δ , que não pode ser grande e nem muito pequeno, pois em ambos os casos a derivada diverge, normalmente em todos os modelos e para várias funções verificadas o melhor valor a ser usado é $\Delta = 10^{-3}$. Mesmo assim, em alguns modelos estudados esta proposta de derivada não foi adequada, quando comparada com a solução exata. Desta forma foi necessário usar outra aproximação numérica dada no caso por ponto não centralizado, cuja a expressão é dada por:

$$\frac{\partial Z_4(x_1, x_2, x_3, x_4)}{\partial x_1} = \frac{1}{\Delta} \left(h - \frac{h^2}{2} + \frac{h^3}{2} - \dots \right), \quad (\text{A.20})$$

onde

$$h = Z_4(x_1 + \Delta, x_2, x_3, x_4) - Z_4(x_1 - \Delta, x_2, x_3, x_4) \quad (\text{A.21})$$