



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA - CCEN
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

WELLINGTON MOREIRA DA SILVA

**DIAGRAMA DE FASES TEMPERATURA - CAMPO
MAGNÉTICO DE CADEIAS QUÂNTICAS
FERRIMAGNÉTICAS**

Recife

2015

WELLINGTON MOREIRA DA SILVA

DIAGRAMA DE FASES TEMPERATURA - CAMPO MAGNÉTICO
DE CADEIAS QUÂNTICAS FERRIMAGNÉTICAS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco como parte dos requisitos para obtenção do título de **Mestre em Física**.

Orientador:

Prof. Dr. Renê Rodrigues Montenegro Filho

Recife

2015

Catálogo na fonte
Bibliotecária Joana D'Arc Leão Salvador CRB4-532

S586d Silva, Wellington Moreira da.
 Diagrama de fases temperatura-campo magnético de cadeias quânticas
 ferrimagnéticas / Wellington Moreira da Silva. – Recife: O Autor, 2015.
 87 f.: fig.

 Orientador: Renê Rodrigues Montenegro Filho.
 Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco.
 CCEN. Física, 2015.
 Inclui referências.

 1. Física da matéria condensada. 2. Heisenberg - modelos. 3. Ondas
 de Spin. I. Montenegro Filho, Renê Rodrigues (Orientador). II. Título.

 530.41 CDD (22. ed.) UFPE-FQ 2015-10

WELLINGTON MOREIRA DA SILVA

**DIAGRAMA DE FASES TEMPERATURA - CAMPO MAGNÉTICO
DE CADEIAS QUÂNTICAS FERRIMAGNÉTICAS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Aprovada em: 11/03/2015.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Renê Rodrigues Montenegro Filho
Orientador
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Maurício Domingues Coutinho Filho
Examinador Interno
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura
Examinador Externo
Universidade Federal de Alagoas

*Dedico esta dissertação à minha falecida
vozinha, Edilene Bispo, que nunca cessou
de orar por mim e por todos os nossos
familiares.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente ao meu Senhor Jesus, pois sem Ele nada do que foi feito se fez, por que Dele, por Ele e para Ele são todas as coisas.

À minha linda esposa que sofreu muito com a distância, mas os poucos momentos juntos e suas orações foram fundamentais na minha vida.

Aos meus pais por todo o esforço e sacrifício feito para que não só eu, mas todos os meus irmãos pudessem estudar.

À todos os meus familiares pela enorme paciência nas minhas ausências.

Aos meus amigos, que muito me ajudaram, desde a graduação, com excelentes discussões em física (diversas vezes ríspidas) ou com palavras de ânimo, destacadamente: Aldo Mendonça, Harrison Douglas, Júlio César e Roque Luiz.

Aos estudiosos colegas de sala: Emerson Freitas, Felipe Octavio, Tony Monte e Wellington Pedro.

Aos colegas do ciclo profissional do bacharelado em física, a saber: Fernando Benevides, Fillipe Cesar, Paulo Cavalcanti, Gabriel Dias, Pedro Henrique, Ricardo Batista e Yuri Barros.

Aos colegas de estudos do Exame Geral de Doutorado: Alyson José, Mário Rocha, Raoni Moreira e Wendson Antônio.

Aos colegas do LFTC que sempre me ajudaram quando precisei, em especial Fábio Ribeiro, Hugo e Leonardo.

Aos professores e funcionários do departamento, que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho, em particular, cito os professores Clécio Clemente, Leonardo Cabral e Maurício Coutinho, que foram muito importantes na minha vida acadêmica e científica.

E, claro, ao professor Renê Montenegro, que por todos esses anos, com empenho, dedicação, paciência e várias discussões em física me ajudou a superar muitas das minhas limitações, e isso foi imprescindível para minha formação e para este produto final.

À Facepe, pelo apoio financeiro desde o início da graduação.

Porque sem fé é impossível agradar a
Deus
(Hebreus 11.6)

*Fazer pesquisa é como estar numa
floresta, onde a bússola é nossa formação
(Fábio Gomes Ribeiro)*

RESUMO

O trabalho consiste no estudo de cadeias quânticas ferrimagnéticas associadas a compostos ferrimagnéticos quase-unidimensionais de spins mistos $s - S$, com $s = 1/2$ e $S = 1$. Estudamos as fases induzidas pela aplicação de um campo magnético, B , e efeitos de temperatura, T ; em particular as excitações de baixa energia e as curvas de magnetização em função de B . A modelagem teórica é realizada através do hamiltoniano de Heisenberg com acoplamentos de *superexchange* antiferromagnéticos, J , entre sítios vizinhos e uniformes ao longo da cadeia. O estado fundamental e as excitações de baixa energia de sistemas finitos são obtidos através do método de ondas de spin não interagente (SW, do inglês Spin Wave) e interagente (ISW, do inglês Interacting Spin Wave), além do método de Lanczos de diagonalização exata; enquanto que as propriedades termodinâmicas são obtidas pelo Método de Lanczos de Temperatura Finita (FTLM, do inglês Finite Temperature Lanczos Method) e analiticamente pela teoria ISW com a restrição de Takahashi adaptada para ferrimagnetos. Discutimos um modelo analítico efetivo para estudar o efeito de B nas propriedades térmicas da cadeia, além de analisar seu limite de validade comparando seus resultados com aqueles obtidos por FTLM. Esboçamos o diagrama de fases $T - B$ do sistema, identificando os pontos crítico-quânticos em $T = 0$ e as linhas de crossover em temperatura finita, em particular aquelas que limitam a fase Líquido de Luttinger do diagrama.

Palavras-chave: Cadeias ferrimagnéticas. Modelo de Heisenberg. Ondas de spin. Diagrama de fases.

ABSTRACT

The work consists in the study of the spin $1/2 - 1$ ferrimagnetic chains which are associated with quasi-one-dimensional ferrimagnetic compounds. We study the phases induced by a magnetic field, B , and the effect of temperature, T ; in particular the magnetization curves as a function of B . The theoretical modeling is performed through the Heisenberg Hamiltonian with antiferromagnetic superexchange couplings, J , between neighboring sites and uniform along the chain. The ground state and the low energy excitations of finite systems are calculated through non interaction Spin Wave (SW) and Interacting Spin Wave (ISW) methods, beyond the Lanczos exact diagonalization method, while the thermodynamic properties are obtained through the Finite Temperature Lanczos Method (FTLM) and analytically by ISW theory with the Takahashi restriction adapted for ferrimagnets. We discuss an analytical effective model to study the effect of B in the thermical properties of the chain, beyond to analyse the limit of validity comparing their results with those obtained by FTLM. We sketch the phase diagram $T - B$ of the system, identifying the quantum critical points in $T = 0$ and the crossover lines in finite temperature, in particular those that limit the phase Luttinger liquid of the diagram.

Keywords: Ferrimagnetic chains. Heisenberg model. Spin wave. Phase diagrams.

Sumário

1	Introdução	12
2	O Modelo de Heisenberg	23
2.1	Origens e Hamiltoniano	24
2.2	Observáveis e Simetrias do Modelo	25
2.3	Estado Fundamental	26
3	Ondas de Spin	28
3.1	Ferromagneto	29
3.2	Antiferromagneto	37
4	O Método de Lanczos de Temperatura Finita	44
4.1	Algoritmo de Lanczos e matriz hamiltoniana	44
4.2	Expansão em alta temperatura	46
4.3	Amostragem aleatória	49
4.4	Implementação	50
5	Ferrimagnetos unidimensionais de spins mistos com campo magnético	52
5.1	Ondas de Spin em Ferrimagnetos	53
5.1.1	Efeitos Térmicos em Campo Nulo ($B = 0$)	60
5.1.2	Efeitos do Campo Magnético ($B > 0$)	65
6	Diagrama de Fases T - B	70
7	Conclusões e Perspectivas	81
	Referências	83

Capítulo 1

Introdução

O estudo de sistemas de elétrons fortemente correlacionados confinados em estruturas de baixa dimensionalidade tem sido alvo constante de pesquisas da comunidade científica nas últimas décadas, principalmente no que diz respeito ao estudo de sólidos contendo compostos de metais de transição. Um dos sistemas mais estudados são os supercondutores de alta temperatura crítica: em baixa temperatura, à medida que estes são dopados, passam de uma fase isolante com ordem antiferromagnética para uma fase supercondutora. Em particular, acredita-se que o estado supercondutor esteja intimamente relacionado a planos de óxido de cobre, CuO_2 , encontrados em muitos desses materiais.

Tornou-se possível sintetizar uma grande variedade de compostos quase unidimensionais com propriedades ferrimagnéticas. O conceito de ferrimagnetismo [22, 56] foi inicialmente proposto por Néel para explicar o fato de que alguns materiais exibem magnetização espontânea não nula abaixo de uma temperatura (T) crítica (T_c) decorrente de um alinhamento não-paralelo dos momentos magnéticos locais. Na figura 1.1(a) representamos uma ordem ferrimagnética, que é um caso intermediário entre

uma ordem ferromagnética, figura 1.1(b), e uma ordem antiferromagnética, figura 1.1(c). Ferrimagnetos são materiais magnéticos que exibem um momento líquido fer-

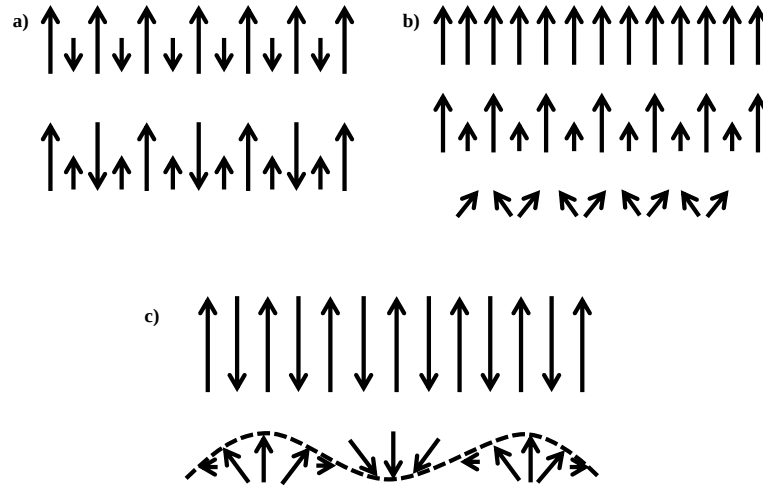


Figura 1.1: Ilustração de arranjos colineares e não-colineares possíveis de ordenamentos (a) ferrimagnéticos, (b) ferromagnéticos e (c) antiferromagnéticos.

romagnético, como resultado de subredes magnéticas com diferentes íons magnéticos e/ou número de sítios magnéticos diferentes. A maioria desses materiais são magnetos moleculares bimetalicos contendo dois íons de metais de transição diferentes por célula unitária, que são distribuídos alternadamente em uma cadeia. Sistemas ferrimagnéticos tipicamente apresentam *cadeias bipartidas* [4] (uma cadeia que pode ser dividida em duas subredes interpenetráveis, onde todos os vizinhos mais próximos de um íon de uma subrede reside na outra subrede, e vice-versa), e exibem ferromagnetismo não saturado devido predominantemente a acopamentos antiferromagnéticos entre suas subredes; expondo, portanto, ambas as ordens ferromagnética e antiferromagnética de longo alcance. Observa-se experimentalmente [54], que a curva do produto da suscetibilidade com a temperatura (χT) *versus* T para compostos dessa

natureza apresenta um mínimo em $T = T_{min}$, o qual é exemplificado na figura 1.2(a) com a curva do composto PNNBNO [21]. Diminuindo a temperatura a partir de T_{min} , a curva χT exibe um crescimento acentuado, figura 1.2(b), antes do estabelecimento de uma ordem magnética tridimensional em baixíssimas temperaturas (tipicamente $T < 3K$), cuja assinatura é um pico- λ na curva do calor específico, figura 1.2(c). Em baixa temperatura, o calor específico e a suscetibilidade magnética multiplicada pela temperatura se comportam como $T^{1/2}$ e T^{-1} (comportamento assintótico de um ferromagneto unidimensional), respectivamente, enquanto que em temperaturas intermediárias, o calor específico exibe um pico tipo Schottky.

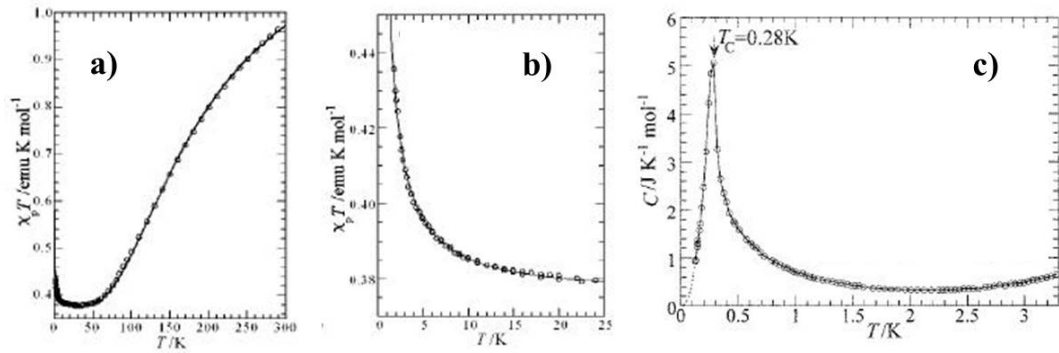


Figura 1.2: (a) Visão geral da curva do produto da suscetibilidade (χ) pela temperatura (T) em função de T e (b) seu comportamento em baixas temperaturas para o composto orgânico ferrimagnético PNNBNO. (c) Calor específico em função da temperatura para o composto orgânico ferrimagnético PNNBNO. (Figuras retiradas da referência [21])

Compostos ferrimagnéticos podem ser classificados em duas categorias [10, 15]. Na primeira delas, os spins dos sítios são os mesmos em ambas sub-redes, todavia a topologia da célula unitária induz um estado fundamental com magnetização não nula. Em particular, mencionamos cadeias do tipo AB_2 e ABC , figura 1.3, as quais apresentam acoplamentos antiferromagnéticos homogêneos e uma célula unitária constituída de três centros magnéticos. Na segunda categoria, centro da nossa pesquisa, o número de

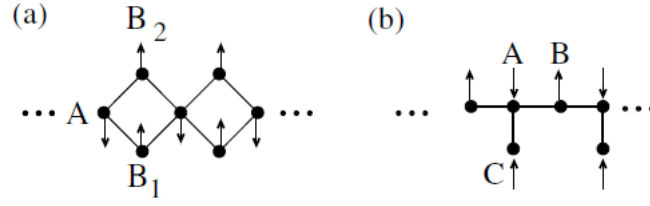


Figura 1.3: Ilustração das cadeias (a) AB_2 e (b) ABC . Os círculos representam centros magnéticos de spin $1/2$, enquanto que as linhas ilustram os acoplamentos de superexchange antiferromagnéticos. (Figura retirada da referência [15])

sítios magnéticos é o mesmo nas duas sub-redes e o momento magnético resultante é devido a spins de magnitudes distintas em sub-redes diferentes (cadeia linear de spins mistos $s - S$), como, por exemplo, as cadeias ferrimagnéticas bimetalicas compostas de íons (Ni, Cu) e (Mn, Cu), figuras 1.4 e 1.5, respectivamente.

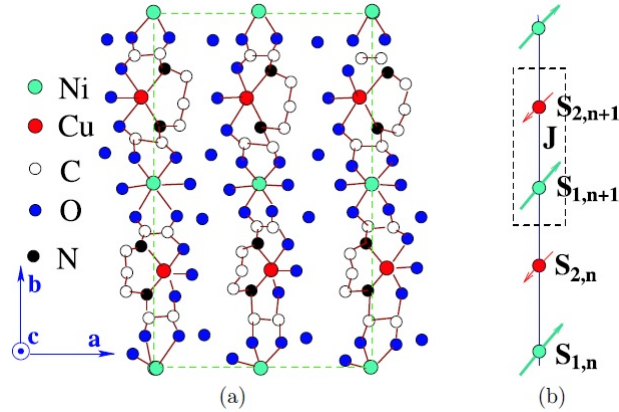


Figura 1.4: (a) Estrutura do composto bimetalico quase-1D $NiCu(pba)(H_2O)_3 \cdot 2H_2O$ com sítios de spins alternados $S_1 = S_{Ni} = 1$ e $S_2 = S_{Cu} = 1/2$ ao longo do eixo b . Os átomos de hidrogênio estão omitidos para uma maior clareza. (b) Estado de Néel clássico do modelo de Heisenberg que descreve o composto ferrimagnético. (Figura retirada da referência [22])

Em geral, para descrever cadeias bipartidas ferrimagnéticas usa-se o modelo quântico de Heisenberg com acoplamentos antiferromagnéticos ou o modelo de Hubbard com um elétron por sítio. No modelo de Heisenberg, os spins encontram-se localizados nos

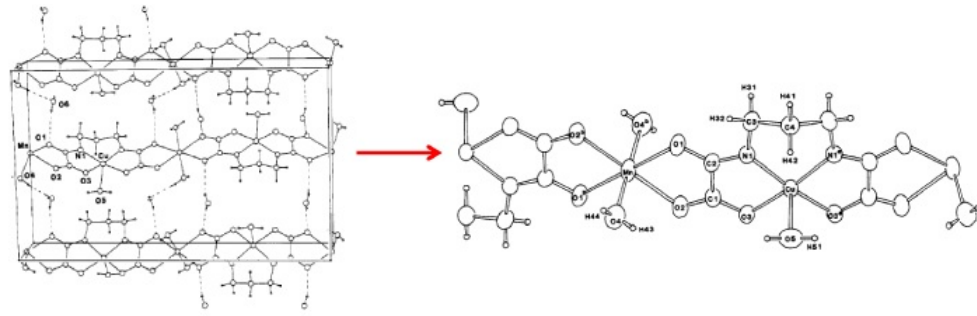


Figura 1.5: Estrutura do composto bimetalico quase-1D $\text{MnCu}(\text{S}_2\text{C}_2\text{O}_2)_2 \cdot 7.5\text{H}_2\text{O}$, retirada da referência [54].

sítios da rede enquanto que no modelo de Hubbard a itinerância eletrônica é permitida, entretanto para 1 elétron por sítio o sistema é isolante para repulsão coulombiana intrasítio $U \neq 0$.

Para estudar esses modelos, são utilizadas técnicas analíticas [12, 16], tais como: teorias de campo médio, métodos de teoria quântica de campos, métodos de ondas de spin; e técnicas numéricas [23, 28]: métodos de Diagonalização Exata, Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (DMRG, do inglês Density Method Renormalization Group) e métodos de Monte Carlo.

Em particular, o modelo de Hubbard para cadeias bipartidas do tipo AB_2 foi analisado através dos métodos numéricos de Monte Carlo Quântico, Diagonalização Exata e aproximação de Hartree-Fock; em particular, foi mostrado [26] que essas cadeias apresentam ordenamento ferrimagnético no limite de semipreenchimento da banda de condução. Utilizando métodos de Teoria de Campos e GR (do inglês, Renormalization Group) [38, 39, 40] o modelo de Heisenberg quântico para cadeias bipartidas foi mapeado no modelo σ não linear quântico não relativístico, sendo verificado que no regime de baixas temperaturas tais cadeias apresentam propriedades críticas similares às encontradas no modelo de Heisenberg quântico para ferromagnetos unidimensio-

nais.

Recentemente as propriedades termodinâmicas e excitações de onda de spin do estado fundamental de cadeias bipartidas do tipo da figura 1.4 com $S = S_1 = 5/2$ e $s = S_2 = 1/2$, foram investigadas através de métodos numéricos [53]. Resultados para a suscetibilidade magnética, magnetização e calor específico foram obtidos através do método de Lanczos de temperatura finita (FTLM, do inglês Finite Temperature Lanczos Method) [23], fazendo comparações com resultados teóricos da aproximação semiclássica [50] e da expansão da suscetibilidade em baixas temperaturas derivada da teoria de ondas de spin modificada de Takahashi [60]. O diagrama de fases temperatura T *versus* campo magnético B foi estudado em detalhe e várias fases quânticas em baixas temperaturas foram identificadas: a fase líquido de Luttinger (LL), o platô ferrimagnético (LM) e a fase totalmente polarizada (FP), além dos respectivos pontos críticos quânticos e linhas de crossover. Na figura 1.6, apresentamos dados experimentais para a suscetibilidade magnética do composto CuMnDTO [54] e resultados numéricos calculados com o uso do FTLM, com $J/k_B = 44.8\text{K}$ e $g = 1.90$, além de resultados da aproximação semiclássica, com $J/k_B = 59.47\text{K}$ e $g = 1.9$, para a cadeia linear de spins mistos $1/2 - 5/2$ [53]; observamos uma boa concordância entre os dados experimentais e os resultados numéricos.

Na figura 1.7 exibimos as excitações de baixa energia, em unidades do campo magnético obtidos através da diagonalização exata, da cadeia $1/2 - 5/2$, além do resultado da teoria de ondas de spin não interagente (SW, do inglês Spin Wave) [6, 37]. Observa-se uma excelente concordância resultado numérico e a teoria SW para o ramo ferromagnético (excitações que baixam o spin total em uma unidade), enquanto que para o ramo antiferromagnético (excitações que aumentam o spin total

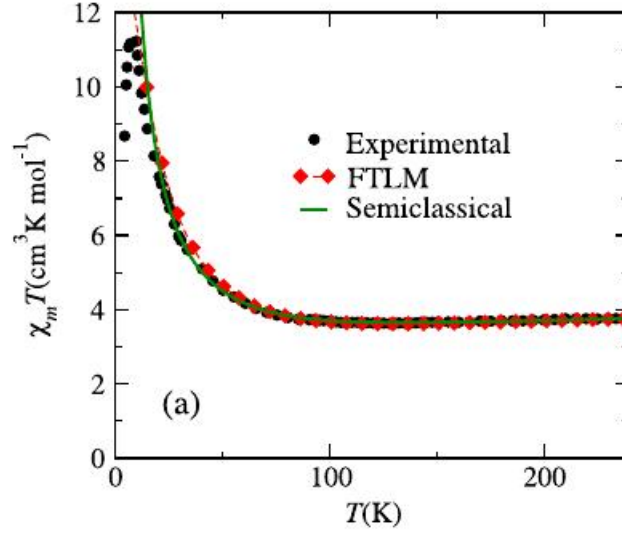


Figura 1.6: Suscetibilidade molar χ_m vezes a temperatura T da cadeia linear de spins mistos $1/2 - 5/2$ como função de T . (Figura retirada da referência [53])

em uma unidade) o valor do gap $\Delta = 4J$ se afasta do valor obtido ($\Delta = 4.9046J$) pela diagonalização exata. Esta discrepância entre o valor do gap obtido através da onda de spin e o resultado exato é comum para cadeias com s e S quaisquer [58, 60], uma vez que a teoria SW não é capaz de obter resultados quantitativamente corretos, pois um estado antiferromagnético ou ferrimagnético apresenta flutuações quânticas que não são levadas em consideração pelo método de ondas de spin livres.

Por outro lado, o método de onda de spin interagente [31, 57, 60] (ISW, do inglês Interacting Spin Wave), que leva em consideração as interações entre as ondas de spin, se mostra muito melhor quantitativamente do que a onda de spin livre. Como exemplo, exibimos na figura 1.8 as excitações de baixa energia para cadeia linear de spins mistos $S = 1$ e $s = 1/2$; o valor do gap do modo antiferromagnético é melhorado ($\Delta = J$ através do SW e $\Delta = 1.676J$ através do ISW), muito mais próximo do valor exato $\Delta = 1.759J$ [29, 58].

O gap não nulo implica em um platô na curva da magnetização em função do

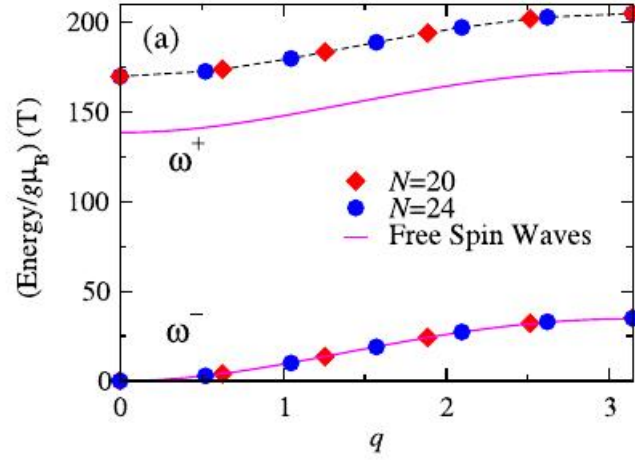


Figura 1.7: Resultados da Diagonalização Exata usando $g = 10$, da cadeia ferromagnética $1/2 - 5/2$ para os valores indicados de N sítios. As linhas cheias são resultados da teoria SW. (Figura retirada da referência [53])

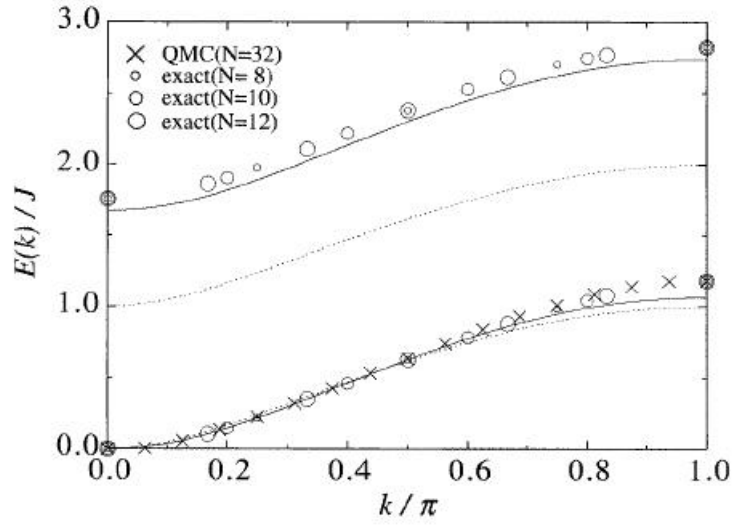


Figura 1.8: Modos de mais baixa energia da cadeia $1/2 - 1$. Os resultados da onda de spin linear (linhas pontilhadas) e interagente (linhas cheias), é comparado com cálculos numéricos. (Figura retirada da referência [60])

campo magnético. Pode-se mostrar [35] que platôs em curvas de magnetização *versus* B são encontrados para valores de m que satisfazem o critério $S - m = \text{inteiro}$, onde S é o spin total máximo da célula; na figura 1.9 apresentamos a curva de

magnetizaçãoo para a cadeia $1/2 - 5/2$ calculada através de diagonalização exata [53]. Em campo nulo a ordem do estado fundamental é ferrimagnética com excitações de baixa energia ferromagnéticas sem gap e antiferromagnéticas com gap, enquanto que para campo não-nulo o modo ferromagnético adquire um gap; na medida que o campo aumenta, o gap do modo antiferromagnético diminui, e no ponto crítico $B = B_{c,AF}$ este gap se torna nulo, a magnetização começa a aumentar e o sistema sofre uma transição de fase quântica para uma fase sem gap que se encontra na classe de universalidade dos líquidos de Luttinger (LL) [7, 18, 44]. Nesta fase as correlações transversais decaem com lei de potência, ou seja, o estado é crítico. A fase LL termina no ponto crítico $B = B_{c,FP}$, neste valor de campo o sistema se torna totalmente polarizado e apresenta excitações de baixa energia ferromagnéticas. Uma

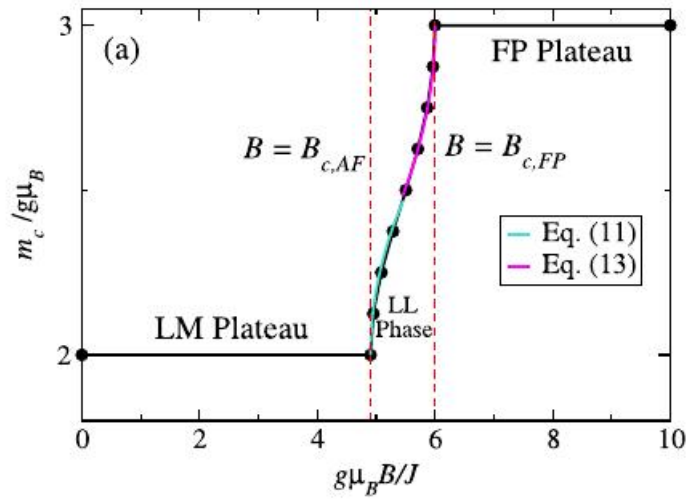


Figura 1.9: Resultados do FTLM para a cadeia linear de spins mistos $1/2 - 5/2$. Magnetização do estado fundamental por célula unitária em função do campo para $N = 16$ sítios. (Figura retirada da referência [53])

transição de fase quântica [45, 46, 47, 48] acontece em temperatura nula quando um parâmetro (pressão externa, campo magnético, etc.) é variado, acarretando em um fortalecimento das flutuações quânticas. Apesar da transição ocorrer em temperatura

nula, ela tem repercussões no comportamento de baixa temperatura do sistema. Na figura 1.10, apresentamos resultados para o calor específico/ T para a cadeia $1/2-5/2$, incluindo o comportamento assintótico das linhas de crossover do domo da fase LL e das fases com gap: FP e LM. Em particular, com $B \rightarrow B_{c,AF}$ e $B \rightarrow B_{c,FP}$ as linhas de crossover seguem as funções universais $a|B - B_{c,AF}|$ e $a|B - B_{c,FP}|$, respectivamente, onde $a = 0,76238$ [27].

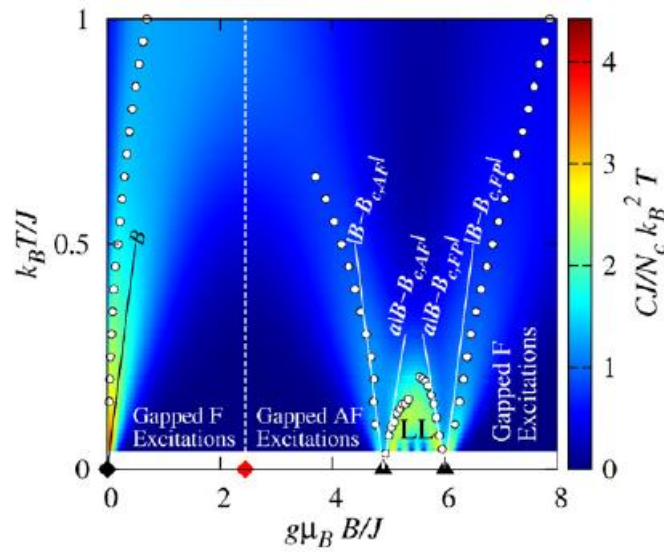


Figura 1.10: Diagrama de fases em baixa temperatura da cadeia linear de spins mistos $1/2 - 5/2$; o contorno do gráfico indica C/T . (Figura retirada da referência [53])

Motivados pelos resultados discutidos acima [53, 57, 60], temos como objetivo nesta dissertação estudar as transições de fase quânticas sofridas por materiais ferrimagnéticos quando submetidos a um campo magnético externo, em particular a região de baixas temperaturas do diagrama de fases do sistema. Estudamos o modelo de Heisenberg quântico com acopamentos antiferromagnéticos através do método de ondas de spin interagentes com a restrição de Takahashi adaptada a ferrimagnetos [57, 59, 60] e das técnicas de Lanczos de diagonalização exata e de temperatura finita

para a cadeia $1/2 - 1$.

No capítulo 2 discutiremos o modelo de rede de interesse, o modelo de Heisenberg quântico: sua origem, simetrias e estado fundamental. No capítulo 3 o método de ondas de spin não interagentes para ferromagnetos e antiferromagnetos de Heisenberg são discutidos; neste as principais técnicas analíticas que serão aplicadas para obter alguns resultados desta dissertação são empregadas. Abordaremos no capítulo 4 as técnicas numéricas de diagonalização exata (Algoritmo de Lanczos) e o método de Lanczos de temperatura finita (FTLM). No capítulo 5 aplicaremos o método de ondas de spin não interagente e interagente a fim de obter resultados para a energia do estado fundamental e as relações de dispersão para a cadeia $1/2 - 1$, além de discutir a metodologia analítica utilizada no cálculo das propriedades termodinâmicas. Finalmente, no capítulo 6 apresentaremos e discutiremos os resultados obtidos através dos métodos de ondas de spin, de diagonalização exata e do FTLM.

Capítulo 2

O Modelo de Heisenberg

De maneira simples, podemos caracterizar o magnetismo de materiais magnéticos em três classes com respostas magnéticas distintas: diamagnetismo, paramagnetismo e magnetismo coletivo (ferromagnetismo, antiferromagnetismo e ferrimagnetismo) [4, 17]. O magnetismo coletivo é um resultado de uma interação de troca entre os dipolos magnéticos permanentes, ou seja, é um fenômeno cooperativo de natureza eminentemente quântica, uma vez que a interação de troca é um efeito que não tem análogo clássico e é a base para a compreensão do magnetismo. A complexidade intrínseca do tema pode ser evidenciada pelo fato do magnetismo do mais comum dos materiais (o ferro) não ser ainda completamente compreendido [34, 41, 42, 43], pois este e outros metais de transição possuem um caráter metálico, que tem a banda d parcialmente preenchida. Em contraste com os ferromagnetos isolantes, o momento magnético em metais de transição não é um múltiplo inteiro do magneton de Bohr μ_B . O mais conhecido modelo para descrever o magnetismo itinerante de metais de transição é o modelo de Hubbard, enquanto que o modelo de Heisenberg é amplamente utilizado para modelagem de sistemas magnéticos isolantes.

2.1 Origens e Hamiltoniano

O modelo de rede que iremos discutir é o modelo de Heisenberg, que pode ser derivado do modelo de Hubbard, que por sua vez é caracterizado pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{Hub} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (2.1)$$

onde $c_{j\sigma}^\dagger (c_{i\sigma})$ é o operador de criação (destruição) para um elétron de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$. O termo t é responsável pela itinerância eletrônica (hopping), $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ é o operador número de elétrons de spin σ no sítio i , e U quantifica a repulsão coulombiana local. Cada sítio do sistema pode ser encontrado em quatro estados, a saber: vazio, um elétron com spin up ou down e dois elétrons de spins opostos. A repulsão coulombiana tende a localizar os elétrons do sistema enquanto que o termo de hopping faz com que os elétrons se espalhem por toda a rede. Desta forma, os dois termos do modelo de Hubbard são competitivos e podem produzir uma transição metal-isolante pela variação de seus parâmetros, o que fisicamente é observado ao se variar, por exemplo, a pressão externa no material. No limite de acoplamento forte $U \gg t$, a dupla ocupação é desprezível, sendo assim podemos considerar modelos efetivos, em particular o modelo $t - J$, para o qual a probabilidade de se encontrar sítios duplamente ocupados é nula. O hamiltoniano do modelo $t - J$ é dado por

$$\mathcal{H}_{t-J} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \left(\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + c.c. \right) + J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right), \quad (2.2)$$

onde

$$\vec{S}_i = \sum_{\alpha\beta} c_{i\alpha}^\dagger \frac{1}{2} \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{i\beta}$$

é o operador de spin do elétron no sítio i , com $\vec{\sigma}$ sendo as matrizes de Pauli e $J = 4t^2/U$; enquanto que o operador $\tilde{c}_{j\sigma}^\dagger = c_{j\sigma}^\dagger (1 - n_{j,-\sigma})$ exclui estados com sítios

duplamente ocupados. Finalmente, fazendo $n_i = 1$ para todos os sítios, de modo que o hopping se torna impossível no modelo $t - J$, assim o hamiltoniano final será o de Heisenberg antiferromagnético, dado por

$$\mathcal{H}_{Heis} = J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.3)$$

onde J é a interação de supertroca (superexchange) entre os spins dos elétrons nos sítios i e j [4, 15, 17, 28].

2.2 Observáveis e Simetrias do Modelo

Levando em consideração as relações canônicas de comutação e as definições

$$S_i^x = \frac{1}{2} (S_i^+ + S_i^-) \quad (2.4)$$

e

$$S_i^y = \frac{1}{2i} (S_i^+ - S_i^-), \quad (2.5)$$

o hamiltoniano 2.3 pode ser escrito da seguinte forma:

$$\mathcal{H}_{Heis} = J \sum_{\langle ij \rangle} \left[S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right]. \quad (2.6)$$

Em geral queremos diagonalizar este hamiltoniano e obter conclusões sobre o limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, onde N é o número de spins do sistema. Para uma cadeia linear de N spins $1/2$, o espaço de Hilbert do sistema tem dimensão $N_{st} = 2^N$, uma vez que neste modelo de rede a probabilidade de dupla ocupação é nula e temos apenas duas possibilidades por sítio da rede (up ou down), sendo assim, como a matriz que representa este hamiltoniano é da ordem $N_{st} \times N_{st}$, a tarefa não é fácil. Entretanto, existem simetrias satisfeitas pelo hamiltoniano que podemos utilizar para

seccionar o espaço de Hilbert e diagonalizar a matriz hamiltoniana nestes subespaços. O hamiltoniano de Heisenberg apresenta as seguintes simetrias: conservação do spin total

$$S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2$$

e conservação das componentes

$$S^x = \sum_i S_i^x, \quad S^y = \sum_i S_i^y \quad \text{e} \quad S^z = \sum_i S_i^z,$$

ou seja, $[\mathcal{H}_{Heis}, S^2] = 0$, $[\mathcal{H}_{Heis}, S^x] = 0$, $[\mathcal{H}_{Heis}, S^y] = 0$ e $[\mathcal{H}_{Heis}, S^z] = 0$.

Entretanto, as componentes não comutam entre si, sendo assim, devemos escolher apenas uma delas, que comumente escolhe-se S^z . Portanto, o conjunto de observáveis que comutam para o modelo de Heisenberg é $\{\mathcal{H}_{Heis}, S^2, S^z\}$. Desta forma, os autovalores E , $S(S+1)$ e $m = -S, \dots, S$ dos operadores $\mathcal{H}_{Heis}$, S^2 e S^z , respectivamente, são simultaneamente bons números quânticos. Além dessas simetrias, como o termo de acoplamento J é invariante sob translações da rede o hamiltoniano 2.3 apresenta simetria de translação, o que nos permite construir uma base rotulada pelo autovalor do operador de translação, o vetor de onda $\vec{k}$. Com esta simetria, as dimensões dos blocos a serem diagonalizados são reduzidas por um fator de N_c , onde N_c é o número de células unitárias do sistema [4, 28].

2.3 Estado Fundamental

De acordo com o teorema de Lieb e Mattis [25], o estado fundamental do modelo de Heisenberg com interações de superexchange antiferromagnéticas (AHM) em uma rede bipartida é

$$S = |S_A - S_B|, \tag{2.7}$$

onde

$$S_A = \sum_{i \in A} s_i \text{ e } S_B = \sum_{i \in B} s_i, \quad (2.8)$$

s_i é o spin do sítio i e A, B denotam as subredes distintas.

No caso de cadeias bipartidas de spin $1/2$ o spin total do estado fundamental será

$$S = \frac{|N_A - N_B|}{2},$$

onde N_A é o número de sítios da sub-rede A e N_B é o número de sítios da sub-rede B . Cadeias unidimensionais com spins alternados distintos, s_A e s_B , terão o estado fundamental com spin total

$$S = \frac{N|s_A - s_B|}{2}. \quad (2.9)$$

Capítulo 3

Ondas de Spin

Em 1930 Felix Bloch mostrou (originalmente para ferromagnetos), a partir um estado ordenado, que as excitações de baixa energia, ou excitações elementares, de sistemas de spins acoplados ferromagneticamente se comportam como ondas, chamadas de ondas de spin. A energia dessas ondas são quantizadas e à partícula correspondente damos o nome de *mágnon*. As ondas de spin são encontradas para diversos tipos de ordenamentos de spin, como por exemplo, os ordenamentos ferromagnético, antiferromagnético e ferrimagnético [3, 24, 37, 57]. Faremos aqui uma breve discussão sobre os *mágnons* em ferromagnetos e antiferromagnetos de Heisenberg, com a finalidade de obtermos uma maior familiaridade com técnicas analíticas necessárias para abordarmos os *mágnons* de interesse: os *mágnons* em ferrimagnetos.

3.1 Ferromagneto

O hamiltoniano de interesse é dado por

$$\mathcal{H} = J \sum_{j, \vec{\delta}} \vec{S}_{j+\vec{\delta}} \cdot \vec{S}_j - 2\mu_0 H_0 \sum_j S_j^z \quad (3.1)$$

e leva em consideração apenas as contribuições da interação de troca entre primeiros vizinhos e o termo de Zeemann. O termo $J < 0$ (ferromagnético) é a integral de troca, $\mu_0 = \frac{g}{2}\mu_B$ é o momento magnético, com g sendo o fator giromagnético; os vetores $\vec{\delta}$ conectam os íons j aos vizinhos mais próximos em uma rede de Bravais e $\vec{S}_j$ é o operador momento angular do íon no sítio j . As constantes de movimento do sistema são:

$$S^2 = \left(\sum_j \vec{S}_j \right)^2 \quad e \quad S_z = \sum_j S_j^z,$$

onde o estado fundamental $|0\rangle$ de um sistema de N íons idênticos de spins S é um estado completamente ordenado e é dado por $|0\rangle = \otimes_j |S_j\rangle$, com $|S_j\rangle$ representando um estado de componente z máximo:

$$S^2|0\rangle = NS(NS+1)|0\rangle \quad e \quad S_z|0\rangle = NS|0\rangle.$$

- Transformação de Holstein-Primakoff

Queremos escrever o hamiltoniano do sistema em termos de operadores independentes. Os operadores que fazem a transformação são os operadores bosônicos de criação e destruição $a_j^\dagger, a_j$ definidos por:

$$S_j^+ = S_j^x + iS_j^y = (2S)^{1/2} \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S} \right)^{1/2} a_j \quad (3.2)$$

e

$$S_j^- = S_j^x - iS_j^y = (2S)^{1/2}a_j^\dagger \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2}, \quad (3.3)$$

com $[a_j, a_l^\dagger] = \delta_{jl}$ e S^+ , S^- satisfazendo as relações corretas de comutação,

$$[S_i^+, S_j^-] = 2\delta_{ij}S_j^z \quad \text{e} \quad [S_i^z, S_j^\pm] = \pm\delta_{ij}S_j^\pm.$$

Das expressões 3.2 e 3.3, podemos encontrar uma relação para S_j^z , uma vez que

$$(S_j^z)^2 = S^2 - (S_j^x)^2 - (S_j^y)^2,$$

e com o uso de 2.4, 2.5, obtemos

$$(S_j^z)^2 = S(S+1) - \frac{1}{2}(S_j^+ S_j^- + S_j^- S_j^+) \quad , \text{ portanto:}$$

$$S_j^+ S_j^- = 2S \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} a_j a_j^\dagger \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} \quad \text{e} \quad S_j^- S_j^+ = (2S) a_j^\dagger \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} a_j.$$

Então,

$$(S_j^z)^2 = S(S+1) - S \left[\left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} a_j a_j^\dagger \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} + a_j^\dagger \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right) a_j \right],$$

e da relação de comutação podemos escrever $a_j^\dagger a_j = a_j a_j^\dagger - 1$, logo:

$$\begin{aligned} (S_j^z)^2 &= S(S+1) - S \left[a_j^\dagger a_j \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right) + \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} + a_j^\dagger \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right) a_j \right] \Rightarrow \\ \Rightarrow (S_j^z)^2 &= S(S+1) - S \left[a_j^\dagger a_j \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right) + \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right) + a_j^\dagger a_j - \frac{a_j^\dagger}{2S} (a_j a_j^\dagger - 1) a_j \right] \Rightarrow \\ &\Rightarrow (S_j^z)^2 = S(S+1) - 2S a_j^\dagger a_j \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right) - S \Rightarrow \\ &\Rightarrow (S_j^z)^2 = S^2 - 2S a_j^\dagger a_j + (a_j^\dagger a_j)^2. \end{aligned}$$

Sendo assim,

$$(S_j^z)^2 = (S - a_j^\dagger a_j)^2, \quad \text{portanto:}$$

$$S_j^z = S - a_j^\dagger a_j. \quad (3.4)$$

Vamos agora escrever as variáveis atômicas $a_j^\dagger, a_j$ em termos das variáveis de mágnon $b_{\vec{k}}^\dagger, b_{\vec{k}}$, definidas por:

$$b_{\vec{k}}^\dagger = N^{-1/2} \sum_j e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} a_j^\dagger \quad \text{e} \quad b_{\vec{k}} = N^{-1/2} \sum_j e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} a_j,$$

com $\vec{r}_j$ sendo o vetor posição do j -ésimo íon. A inversa é dada por:

$$a_j^\dagger = N^{-1/2} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} b_{\vec{k}}^\dagger \quad \text{e} \quad a_j = N^{-1/2} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} b_{\vec{k}}. \quad (3.5)$$

Essas variáveis satisfazem as seguintes relações de comutação:

$$\begin{aligned} [b_{\vec{k}}, b_{\vec{k}'}^\dagger] &= N^{-1} \sum_{j,l} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} a_j e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_l} a_l^\dagger - N^{-1} \sum_{j,l} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_l} a_l^\dagger e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} a_j = \\ &= N^{-1} \sum_{j,l} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_l} (a_j a_l^\dagger - a_l^\dagger a_j) = N^{-1} \sum_{j,l} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_l} [a_j, a_l^\dagger] \Rightarrow \\ &\Rightarrow [b_{\vec{k}}, b_{\vec{k}'}^\dagger] = N^{-1} \sum_j e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}_j} = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}. \end{aligned}$$

Assim,

$$[b_{\vec{k}}, b_{\vec{k}'}^\dagger] = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \quad (3.6)$$

além de

$$[b_{\vec{k}}, b_{\vec{k}'}] = [b_{\vec{k}}^\dagger, b_{\vec{k}'}^\dagger] = 0.$$

Os operadores $b_{\vec{k}}^\dagger$ e $b_{\vec{k}}$, criam e destroem, respectivamente, um mágnon de vetor de onda $\vec{k}$ no estado fundamental. Temos que expressar, então, as equações 3.2, 3.3 e 3.4 em termos destas variáveis de ondas de spin. Estamos interessados em estados de baixa energia do sistema, ou seja, assumindo $S \gg 1$, devemos ter

$$\left\langle \frac{a_j^\dagger a_j}{S} \right\rangle = \left\langle \frac{n_j}{S} \right\rangle \ll 1,$$

logo podemos escrever

$$\left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} \simeq 1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{4S}. \quad (3.7)$$

Desta forma, das equações 3.5 e 3.7, temos:

$$\begin{aligned} S_j^+ &\simeq (2S)^{1/2} \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{4S} \right) a_j = (2S)^{1/2} \left(a_j - \frac{a_j^\dagger a_j^2}{4S} \right) \Rightarrow \\ &\Rightarrow S_j^+ \simeq \left(\frac{2S}{N} \right)^{1/2} \left[\sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} b_{\vec{k}} - (4SN)^{-1} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}''} e^{i(\vec{k} - \vec{k}' - \vec{k}'') \cdot \vec{r}_j} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'} b_{\vec{k}''} \right]. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Analogamente,

$$S_j^- \simeq \left(\frac{2S}{N} \right)^{1/2} \left[\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} b_{\vec{k}}^\dagger - (4SN)^{-1} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}''} e^{i(\vec{k} + \vec{k}' - \vec{k}'') \cdot \vec{r}_j} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'}^\dagger b_{\vec{k}''} \right]. \quad (3.9)$$

Ainda

$$S_j^z = S - a_j^\dagger a_j = S - \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}_j} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'},$$

sendo assim, como

$$S_z = \sum_j S_j^z,$$

temos que

$$S_z = NS - \frac{1}{N} \sum_{j, \vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}_j} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'}.$$

Entretanto,

$$\frac{1}{N} \sum_j e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}_j} = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'},$$

então

$$S_z = NS - \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'},$$

portanto:

$$S_z = NS - \sum_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}}, \quad (3.10)$$

que é um resultado exato.

- Hamiltoniano em variáveis de onda de spin

O hamiltoniano 3.1, em analogia com a relação 2.6, pode ser escrito como

$$\mathcal{H} = J \sum_{j, \vec{\delta}} S_j^z S_{j+\vec{\delta}}^z + \frac{J}{2} \sum_{j, \vec{\delta}} \left(S_j^+ S_{j+\vec{\delta}}^- + S_j^- S_{j+\vec{\delta}}^+ \right) - 2\mu_0 H_0 \sum_j S_j^z,$$

então, usando as transformações em variáveis de ondas de spin das equações 3.8, 3.9 e 3.10, escrevemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & J \sum_{j, \vec{\delta}} \left[S - \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}_j} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'} \right] \left[S - \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot (\vec{r}_j + \vec{\delta})} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'} \right] + \\ & + \frac{JS}{N} \sum_{j, \vec{\delta}} \left[\sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} b_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{r}_j + \vec{\delta})} b_{\vec{k}'}^\dagger + \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} b_{\vec{k}}^\dagger \sum_{\vec{k}'} e^{-i\vec{k}' \cdot (\vec{r}_j + \vec{\delta})} b_{\vec{k}'} \right] - 2\mu_0 H_0 \left(NS - \sum_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} \right). \end{aligned}$$

Assim, se há z vizinhos mais próximos ao íon j da rede,

$$\sum_{j, \vec{\sigma}} \rightarrow Nz \quad \text{e} \quad \sum_j \rightarrow N,$$

logo:

$$\mathcal{H} = JNzS^2 - 2\mu_0 H_0 NS + \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1, \quad (3.11)$$

onde,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 = & -\frac{JS}{N} \sum_{j, \vec{\delta}, \vec{k}, \vec{k}'} \left[e^{-i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}_j} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{\delta}} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'} + e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}_j} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{\delta}} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'} - e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}_j} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'} + \right. \\ & \left. - e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot (\vec{r}_j + \vec{\delta})} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'} \right] + \frac{2\mu_0 H_0}{N} \sum_{j, \vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}_j} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'} . \end{aligned}$$

Portanto, somando sobre j e definindo

$$\gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\vec{\delta}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}}, \quad (3.12)$$

com z primeiros vizinhos, temos que

$$\mathcal{H}_0 = -JzS \sum_{\vec{k}} \left[\gamma_{\vec{k}} b_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger + \gamma_{-\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} - 2b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} \right] + 2\mu_0 H_0 \sum_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}},$$

desta forma, se há um centro de simetria ($\gamma_{\vec{k}} = \gamma_{-\vec{k}}$), podemos escrever da equação 3.6:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\vec{k}} \left[2JzS(1 - \gamma_{\vec{k}}) + 2\mu_0 H_0 \right] b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} - 2JzS \sum_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}}.$$

Entretanto,

$$\sum_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{\delta}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}} = \frac{1}{z} \sum_{\vec{\delta}} \left[e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{\delta}} + e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{\delta}} + \dots \right] = 0,$$

portanto

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\vec{k}} \left[2JzS(1 - \gamma_{\vec{k}}) + 2\mu_0 H_0 \right] b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}}. \quad (3.13)$$

Note que o termo $\mathcal{H}_1$ da expressão 3.11 foi desprezado, uma vez que o mesmo contém termos de ordem superior, $\mathcal{O}(S^0)$, dos operadores de mágnon e estamos interessados em excitações de mais baixa energia.

Finalmente podemos escrever $\mathcal{H}_0$ como:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\vec{k}} \hat{n}_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}}, \quad (3.14)$$

onde

$$\hat{n}_{\vec{k}} = b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} \quad e \quad \omega_{\vec{k}} = 2JzS(\gamma_{\vec{k}} - 1) + 2\mu_0 H_0.$$

Em uma dimensão, sendo a o parâmetro de rede, temos

$$\gamma_{\vec{k}} \equiv \gamma_k = \frac{1}{2} (e^{ika} + e^{-ika}) = \cos ka \quad , \text{ assim:}$$

$$\omega_{\vec{k}} \equiv \omega_k = -4JS(1 - \cos ka) + 2\mu_0 H_0.$$

A campo nulo a relação de dispersão é dada por

$$\omega_k = -4JS(1 - \cos ka), \quad (3.15)$$

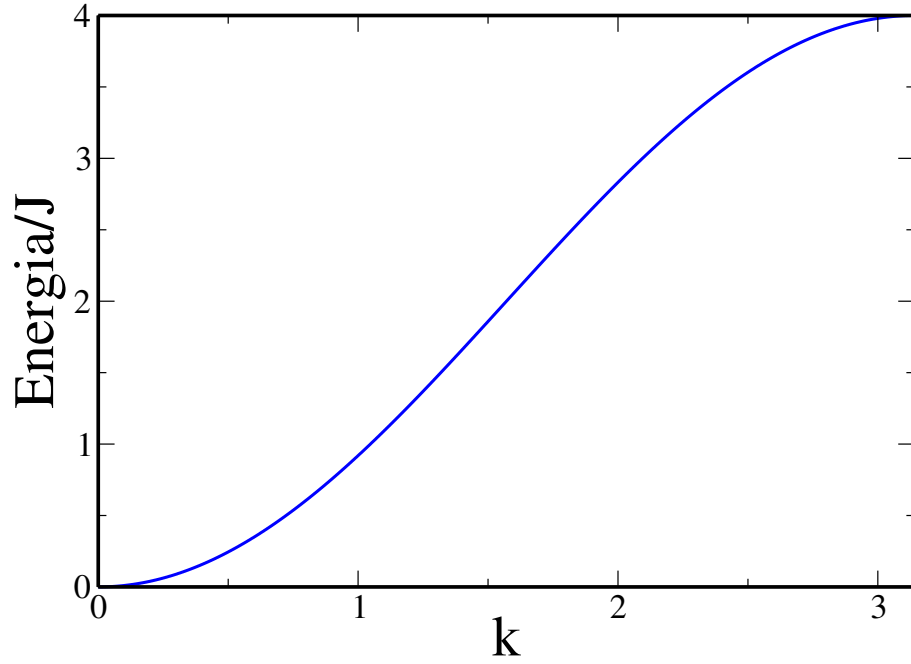


Figura 3.1: Relação de dispersão de mágnons ferromagnéticos a campo nulo pelo método de ondas de spin.

ou seja, este modo (acústico) não apresenta gap, e está representado na figura 3.1. Na figura 3.2, apresentamos resultados experimentais da relação de dispersão dos mágnons ópticos e acústicos na magnetita [24]. Assumindo $ka \ll 1$, temos que

$$\omega_k = -2JSa^2k^2 = Dk^2, \quad (3.16)$$

onde $D = -2JSa^2$ é a dureza do material. A energia interna de um gás de mágnons em equilíbrio térmico à temperatura T é dada por

$$E = \sum_k \omega_k \langle n_k \rangle_T = \sum_k \omega_k \frac{1}{e^{\beta\omega_k} - 1}, \text{ logo}$$

$$\sum_k \rightarrow \frac{1}{2\pi} \int dk \Rightarrow E = \frac{D}{2\pi} \int \frac{k^2}{e^{\beta Dk^2} - 1} dk,$$

ou, com $x = \beta Dk^2$,

$$E = \frac{(k_B T)^{3/2}}{4\pi D^{1/2}} \int_0^{x_m} \frac{x^{1/2}}{e^x - 1} dx.$$

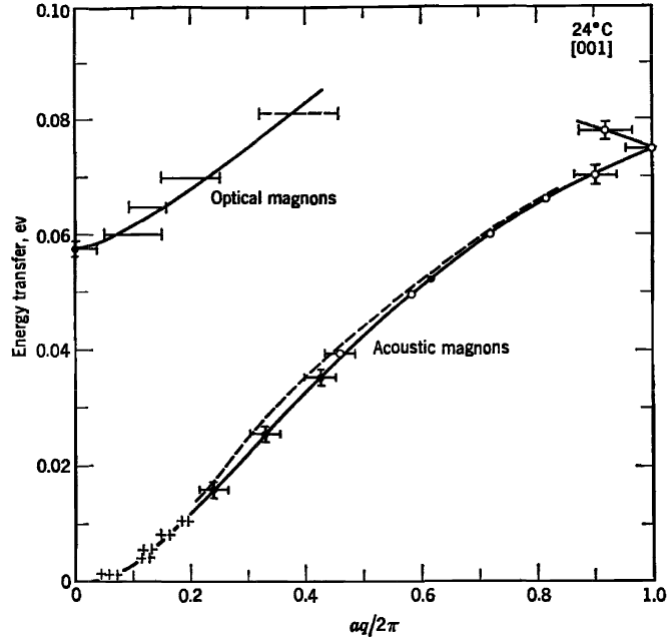


Figura 3.2: Relação de dispersão dos mágnons ópticos e acústicos na magnetita, determinados pelo espalhamento inelástico de neutrons, retirado da referência [24].

Como estamos interessados na região $k_B T \ll \omega_{max}$, com $\omega_{max} = Dk_{max}^2$, podemos escrever

$$E = \frac{(k_B T)^{3/2}}{4\pi D^{1/2}} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{e^x - 1} dx \quad , \text{ onde}$$

$$\int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{e^x - 1} dx = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \zeta\left(\frac{3}{2}\right),$$

onde $\Gamma(x)$ é a função gama, e $\zeta(x)$ é a função zeta de Riemann. Desta forma, como $\Gamma(\frac{3}{2}) = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}$ e $\zeta(\frac{3}{2}) = 2,61238$, obtemos:

$$E \simeq \frac{0,37}{D^{1/2}} (k_B T)^{3/2} \quad , \text{ assim } C = \frac{dE}{dT} \Rightarrow C \simeq 0,55 k_B \left(\frac{k_B T}{D} \right)^{1/2},$$

conforme indica a figura 3.3.

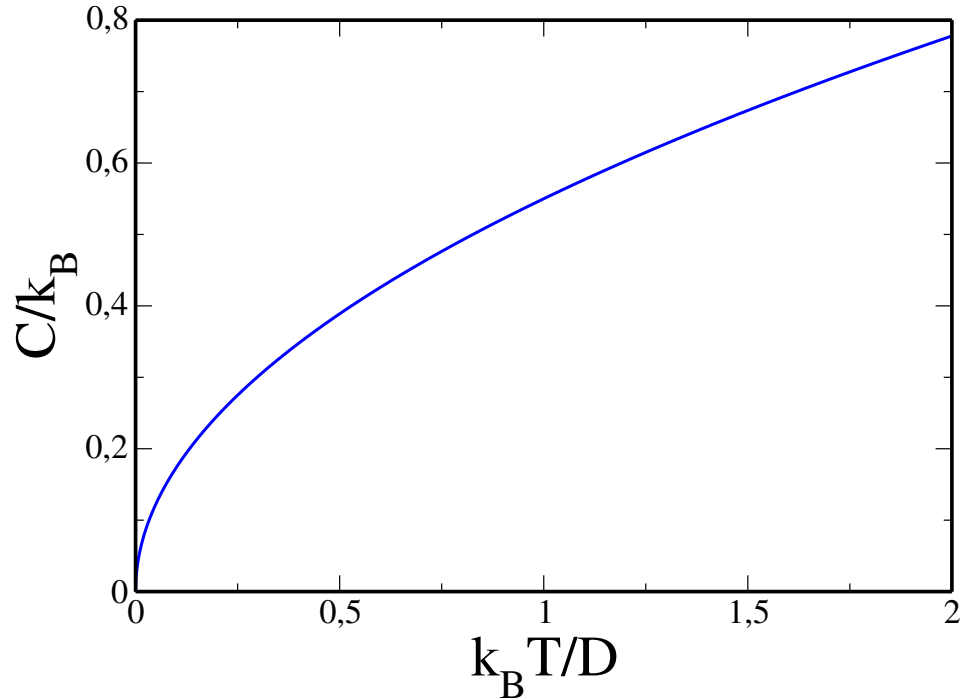


Figura 3.3: Calor específico dos mágnons ferromagnéticos em uma dimensão.

3.2 Antiferromagneto

Neste caso vamos considerar o hamiltoniano

$$\mathcal{H} = J \sum_{j,\vec{\delta}} \vec{S}_{j+\vec{\delta}} \vec{S}_j - g\mu_B \bar{H} \sum_j S_{aj}^z + g\mu_B \bar{H} \sum_j S_{bj}^z, \quad (3.17)$$

onde $J > 0$ para um antiferromagneto. Uma vez que a rede é bipartida, a configuração de spin do estado fundamental do antiferromagneto de Heisenberg é uma configuração onde todos os spins vizinhos são antiparalelos, conhecido como estado Néel. O parâmetro $\bar{H}$ é um campo magnético fictício que aproxima o efeito de anisotropia do material, com a propriedade de tender a alinhar os spins da subrede a na direção $+z$ e os spins da subrede b na direção $-z$, para μ_B positivo.

- Transformação de Holstein-Primakoff

Para o caso em questão definimos:

$$S_{aj}^+ = (2S)^{1/2} \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} a_j; \quad S_{aj}^- = (2S)^{1/2} a_j^\dagger \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2}, \quad (3.18)$$

e

$$S_{bl}^+ = (2S)^{1/2} \left(1 - \frac{b_l^\dagger b_l}{2S}\right)^{1/2} b_l; \quad S_{bl}^- = (2S)^{1/2} b_l^\dagger \left(1 - \frac{b_l^\dagger b_l}{2S}\right)^{1/2}, \quad (3.19)$$

onde $b_l^\dagger$, b_l são os operadores de criação e destruição do l -ésimo íon na subrede b .

Temos também que

$$S_{aj}^z = S - a_j^\dagger a_j \quad \text{e} \quad -S_{bl}^z = S - b_l^\dagger b_l, \quad (3.20)$$

onde usamos a outra escolha de sinal permitida pela equação 3.1.

Vamos introduzir agora as variáveis de ondas de spin

$$b_k^\dagger = N^{-1/2} \sum_j e^{-ikj} a_j^\dagger; \quad b_k = N^{-1/2} \sum_j e^{ikj} a_j,$$

e

$$a_j^\dagger = N^{-1/2} \sum_k e^{ikj} b_k^\dagger; \quad a_j = N^{-1/2} \sum_k e^{-ikj} b_k.$$

De forma análoga à seção 3.1, temos que

$$\begin{aligned} \left[c_{\vec{k}}^\dagger, c_{\vec{k}'} \right] &= \left[d_{\vec{k}}^\dagger, d_{\vec{k}'} \right] = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}; \\ \left[c_{\vec{k}}, c_{\vec{k}'}^\dagger \right] &= \left[d_{\vec{k}}, d_{\vec{k}'}^\dagger \right] = \left[c_{\vec{k}}^\dagger, c_{\vec{k}'}^\dagger \right] = \left[d_{\vec{k}}^\dagger, d_{\vec{k}'}^\dagger \right] = 0. \end{aligned}$$

Ainda, como estamos interessados em excitações de mais baixa energia do sistema, com $S \gg 1$ e $s \gg 1$, teremos

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{a_j^\dagger a_j}{S} \right\rangle &\ll 1 \quad \text{e} \quad \left\langle \frac{b_l^\dagger b_l}{S} \right\rangle \ll 1, \text{ então} \\ \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} &\simeq 1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{4S} \quad \text{e} \quad \left(1 - \frac{b_l^\dagger b_l}{2S}\right)^{1/2} \simeq 1 - \frac{b_l^\dagger b_l}{4S}, \end{aligned}$$

portanto:

$$S_{aj}^+ \simeq \left(\frac{2S}{N}\right)^{1/2} \left[\sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} c_{\vec{k}} + \dots \right]; \quad (3.21)$$

$$S_{aj}^- \simeq \left(\frac{2S}{N}\right)^{1/2} \left[\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} c_{\vec{k}}^\dagger + \dots \right]; \quad (3.22)$$

$$S_{bj}^+ \simeq \left(\frac{2S}{N}\right)^{1/2} \left[\sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_l} d_{\vec{k}} + \dots \right]; \quad (3.23)$$

$$S_{bj}^- \simeq \left(\frac{2S}{N}\right)^{1/2} \left[\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_l} d_{\vec{k}}^\dagger + \dots \right]; \quad (3.24)$$

$$S_z^a = \sum_j S_{aj}^z = NS - \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}}; \quad (3.25)$$

$$S_z^b = \sum_l S_{bl}^z = NS - \sum_{\vec{k}} d_{\vec{k}}^\dagger d_{\vec{k}}. \quad (3.26)$$

- Hamiltoniano em variáveis de ondas de spin

O hamiltoniano 3.17 em variáveis de mágnons pode ser escrito, se há z vizinhos mais próximos

$$\mathcal{H} = -2JNzS^2 - 4\mu_0\bar{H}NS + \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1, \quad \text{onde}$$

o termo bilinear $\mathcal{H}_0$ é dado por

$$\mathcal{H}_0 = 2JzS \sum_{\vec{k}} \left[\gamma_{\vec{k}} \left(c_{\vec{k}}^\dagger d_{\vec{k}}^\dagger + c_{\vec{k}} d_{\vec{k}} \right) + \left(c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}} + d_{\vec{k}}^\dagger d_{\vec{k}} \right) \right] + 2\mu_0\bar{H} \sum_{\vec{k}} \left(c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}} + d_{\vec{k}}^\dagger d_{\vec{k}} \right),$$

$$\text{com } \gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\vec{\delta}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}} = \gamma_{-\vec{k}},$$

assumindo que há um centro de simetria.

Note que $\mathcal{H}_0$ ainda não é diagonal. Então, para diagonalizar este hamiltoniano vamos fazer a transformação de Bogoliubov, definida por:

$$\alpha_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} c_{\vec{k}} - v_{\vec{k}} d_{\vec{k}}^\dagger \quad ; \quad \alpha_{\vec{k}}^\dagger = u_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger - v_{\vec{k}} d_{\vec{k}}$$

$$\beta_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} d_{\vec{k}} - v_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^{\dagger} \quad ; \quad \beta_{\vec{k}}^{\dagger} = u_{\vec{k}} d_{\vec{k}}^{\dagger} - v_{\vec{k}} c_{\vec{k}},$$

cuja inversa é

$$c_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} \beta_{\vec{k}}^{\dagger} \quad ; \quad c_{\vec{k}}^{\dagger} = u_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^{\dagger} + v_{\vec{k}} \beta_{\vec{k}} \quad (3.27)$$

$$d_{\vec{k}} = v_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^{\dagger} + u_{\vec{k}} \beta_{\vec{k}} \quad ; \quad d_{\vec{k}}^{\dagger} = v_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}} + u_{\vec{k}} \beta_{\vec{k}}^{\dagger}, \quad (3.28)$$

onde

$$u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 = 1.$$

Portanto, a transformação de Bogoliubov pode ser parametrizada como

$$u_{\vec{k}} = \cosh \theta_{\vec{k}} \quad \text{e} \quad v_{\vec{k}} = \sinh \theta_{\vec{k}}. \quad (3.29)$$

Agora, vamos escrever o hamiltoniano em termos das novas variáveis. Para tornar o cálculo muito mais simples utilizaremos a notação matricial. Para tal, note que podemos escrever

$$\mathcal{H}_0 = \left(2JzS + 2\mu_0 \bar{H} \right) \sum_{\vec{k}} \left(c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}} + d_{\vec{k}}^{\dagger} d_{\vec{k}} \right) + 2JzS \sum_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}} \left(c_{\vec{k}}^{\dagger} d_{\vec{k}}^{\dagger} + c_{\vec{k}} d_{\vec{k}} \right),$$

assim, definindo $\epsilon \equiv 2JzS + 2\mu_0 \bar{H}$ e $\lambda_{\vec{k}} \equiv 2JzS \gamma_{\vec{k}}$, temos:

$$\mathcal{H}_0 = \epsilon \sum_{\vec{k}} \left(c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}} + d_{\vec{k}}^{\dagger} d_{\vec{k}} \right) + \sum_{\vec{k}} \lambda_{\vec{k}} \left(c_{\vec{k}}^{\dagger} d_{\vec{k}}^{\dagger} + c_{\vec{k}} d_{\vec{k}} \right) - N\epsilon,$$

portanto

$$N\epsilon + \mathcal{H}_0 \equiv \bar{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\vec{k}} \begin{pmatrix} c_{\vec{k}}^{\dagger} & d_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon & \lambda_{\vec{k}} \\ \lambda_{\vec{k}} & \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\vec{k}} \\ d_{\vec{k}}^{\dagger} \end{pmatrix},$$

e das equações 3.27 e 3.28

$$\begin{pmatrix} c_{\vec{k}} \\ d_{\vec{k}}^{\dagger} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} & v_{\vec{k}} \\ v_{\vec{k}} & u_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\vec{k}} \\ \beta_{\vec{k}}^{\dagger} \end{pmatrix}. \quad (3.30)$$

Desta forma, fazendo a transformação 3.30, teremos:

$$\bar{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\vec{k}} \begin{pmatrix} \alpha_{\vec{k}}^{\dagger} & \beta_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} & v_{\vec{k}} \\ v_{\vec{k}} & u_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon & \lambda_{\vec{k}} \\ \lambda_{\vec{k}} & \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} & v_{\vec{k}} \\ v_{\vec{k}} & u_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\vec{k}} \\ \beta_{\vec{k}}^{\dagger} \end{pmatrix}, \quad \text{com}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{T}_{\vec{k}} &\equiv \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} & v_{\vec{k}} \\ v_{\vec{k}} & u_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon & \lambda_{\vec{k}} \\ \lambda_{\vec{k}} & \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} & v_{\vec{k}} \\ v_{\vec{k}} & u_{\vec{k}} \end{pmatrix} \Rightarrow \\ \Rightarrow \mathcal{T}_{\vec{k}} &= \begin{pmatrix} \epsilon[u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2] + 2\lambda_{\vec{k}}u_{\vec{k}}v_{\vec{k}} & \lambda_{\vec{k}}[u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2] + 2\epsilon u_{\vec{k}}v_{\vec{k}} \\ \lambda_{\vec{k}}[u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2] + 2\epsilon u_{\vec{k}}v_{\vec{k}} & \epsilon[u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2] + 2\lambda_{\vec{k}}u_{\vec{k}}v_{\vec{k}} \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Da equação 3.29, podemos escrever

$$u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2 = \cosh 2\theta_{\vec{k}} \quad \text{e} \quad 2u_{\vec{k}}v_{\vec{k}} = \sinh 2\theta_{\vec{k}}.$$

Então, ajustando $\tanh 2\theta_{\vec{k}} = -\frac{\lambda_{\vec{k}}}{\epsilon} \Rightarrow \cosh 2\theta_{\vec{k}} = \frac{\epsilon}{\omega_{\vec{k}}} \quad \text{e} \quad \sinh 2\theta_{\vec{k}} = -\frac{\lambda_{\vec{k}}}{\omega_{\vec{k}}}$, onde

$$\omega_{\vec{k}} = \sqrt{\epsilon^2 - \lambda_{\vec{k}}^2}.$$

Assim,

$$\begin{aligned}\mathcal{T}_{\vec{k}} &= \begin{pmatrix} \omega_{\vec{k}} & 0 \\ 0 & \omega_{\vec{k}} \end{pmatrix}, \text{ portanto:} \\ \bar{\mathcal{H}}_0 &= \sum_{\vec{k}} \begin{pmatrix} \alpha_{\vec{k}}^\dagger & \beta_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_{\vec{k}} & 0 \\ 0 & \omega_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\vec{k}} \\ \beta_{\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix}, \text{ ou seja,} \\ \bar{\mathcal{H}}_0 &= \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} [\alpha_{\vec{k}}^\dagger \alpha_{\vec{k}} + \beta_{\vec{k}}^\dagger \beta_{\vec{k}} + 1], \text{ desta forma} \\ \mathcal{H}_0 &= -2NJzS - 2N\mu_0\bar{H} + \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} [\alpha_{\vec{k}}^\dagger \alpha_{\vec{k}} + \beta_{\vec{k}}^\dagger \beta_{\vec{k}} + 1],\end{aligned}$$

onde

$$\omega_{\vec{k}}^2 = \left(2JzS + 2\mu_0\bar{H}\right)^2 - 4J^2z^2S^2\gamma_{\vec{k}}^2, \quad (3.31)$$

Que é a relação de dispersão para mágnons antiferromagnéticos.

Em uma dimensão sabemos que $\gamma_{\vec{k}} = \gamma_k = \cos(ka)$ e fazendo $\bar{H} = 0$ podemos escrever

$$\omega_k^2 = 4^2J^22^2S^2 - 4J^22^2S^2\cos^2 k,$$

ou seja, para $S = 1/2$

$$\omega_k = 2J|\sin k|, \quad (3.32)$$

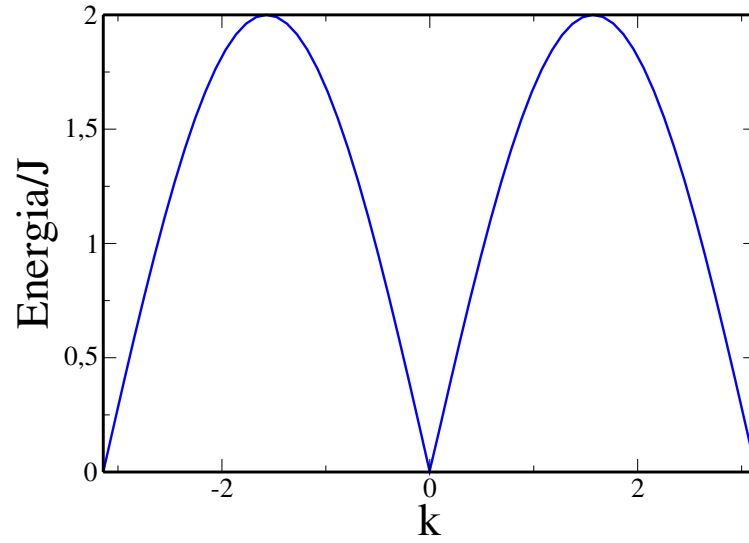


Figura 3.4: Relação de dispersão em um antiferromagneto unidimensional com $S = 1/2$ obtido pelo método ondas de spin.

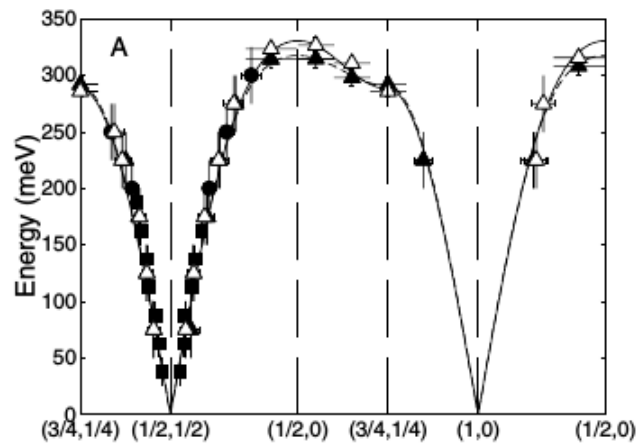


Figura 3.5: Relação de dispersão obtida experimentalmente do composto LaCuO_4 , um antiferromagneto de spin $S = 1/2$. Figura retirada da referência [8].

veja a figura 3.4 em comparação com o resultado experimental 3.5. No limite de longos comprimentos de onda podemos escrever que $ka \ll 1$, então

$$\omega_k = 2Jak, \quad (3.33)$$

ou seja, diferentemente do ferromagneto, as excitações elementares das ondas de spin de um antiferromagneto unidimensional exibe uma relação de dispersão linear no limite de $k \rightarrow 0$.

Capítulo 4

O Método de Lanczos de Temperatura Finita

Neste capítulo discutiremos um método numérico que resulta da combinação do método de Lanczos de diagonalização exata (ED, do inglês, Exact Diagonalization) [28] com a amostragem aleatória, chamado “Método de Lanczos de temperatura finita” (FTLM, do inglês, Finite Temperature Lanczos Method) [23, 36]. O FTLM foi desenvolvido para o estudo de sistemas quânticos em $T > 0$ e foi utilizado para obter parte dos resultados desta dissertação. Através deste método numérico podemos calcular propriedades em $T > 0$ com eficiência e recursos computacionais comparáveis aos cálculos do estado fundamental empregando ED.

4.1 Algoritmo de Lanczos e matriz hamiltoniana

O método computacional mais simples para estudar modelos de sistemas de elétrons fortemente correlacionados é o método de diagonalização exata. Entretanto, nesses modelos a dimensão do espaço de Hilbert cresce exponencialmente com o tamanho

do sistema. No modelo de Heisenberg de spin $1/2$, por exemplo, cada spin pode ser encontrado em dois estados, $\uparrow$ ou $\downarrow$, portanto o número de estados da base do espaço de Hilbert em um sistema com N sítios é $N_{st} = 2^N$. O hamiltoniano de sistemas quânticos é representado por matrizes $N_{st} \times N_{st}$, que torna-se muito grande para pequenos valores de N . Encontrar autovalores e autovetores de tais matrizes não é possível com um algoritmo padrão. Em vez disso, para um N moderado, deve-se recorrer a algoritmos mais especializados, entre os quais o algoritmo de Lanczos de diagonalização exata é apropriado para determinarmos os estados de mais baixa energia do sistema. Através do método de Lanczos, uma base especial é construída, nela o hamiltoniano tem uma representação tridiagonal; o estado fundamental e excitações podem ser encontrados facilmente usando bibliotecas padrão.

A base de Lanczos é construída iterativamente a partir de um vetor aleatório normalizado $|\phi_0\rangle$ no espaço de Hilbert do sistema de interesse. Aplica-se $\mathcal{H}$ a $|\phi_0\rangle$ e o vetor resultante é decomposto em uma componente paralela a $|\phi_0\rangle$ e uma componente $|\phi_1\rangle$ ortogonal a ela, ou seja:

$$\mathcal{H}|\phi_0\rangle = a_0|\phi_0\rangle + b_1|\phi_1\rangle. \quad (4.1)$$

Como $\mathcal{H}$ é hermitiano, $a_0 = \langle\phi_0|\mathcal{H}|\phi_0\rangle$ é real, enquanto que a fase de $|\phi_1\rangle$ pode ser escolhida tal que $b_1 = \langle\phi_1|\mathcal{H}|\phi_0\rangle$ também seja real. No próximo passo $\mathcal{H}$ é aplicado a $|\phi_1\rangle$,

$$\mathcal{H}|\phi_1\rangle = b_1'|\phi_0\rangle + a_1|\phi_1\rangle + b_2|\phi_2\rangle, \quad (4.2)$$

onde $|\phi_2\rangle$ é ortogonal a $|\phi_0\rangle$ e $|\phi_1\rangle$, sendo assim: $b_1' = \langle\phi_0|\mathcal{H}|\phi_1\rangle$, $a_1 = \langle\phi_1|\mathcal{H}|\phi_1\rangle$ e $b_2 = \langle\phi_2|\mathcal{H}|\phi_1\rangle$. Procedendo com a iteração obtém-se em i passos

$$\mathcal{H}|\phi_i\rangle = b_i|\phi_{i-1}\rangle + a_i|\phi_i\rangle + b_{i+1}|\phi_{i+1}\rangle, \quad (4.3)$$

uma vez que $b'_1 = b_1$. Desta forma, parando a iteração em $i = M$ e fazendo $b_{M+1} = 0$, o hamiltoniano pode ser representado na base das funções ortogonais de Lanczos $|\phi_i\rangle$ como uma matriz tridiagonal de elementos diagonais a_i com $i = 0 \dots M$, e os fora da diagonal b_i com $i = 1 \dots M$, ou seja,

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & 0 & \dots \\ b_1 & a_1 & b_2 & 0 & \dots \\ 0 & b_2 & a_2 & b_3 & \dots \\ 0 & 0 & b_3 & a_3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

Essa matriz é facilmente diagonalizada usando rotinas numéricas padrão para obter os autovalores aproximados ϵ_j e os correspondentes autovetores ortonormais $|\psi_j\rangle$,

$$|\psi_j\rangle = \sum_{i=0}^M f_{ji} |\phi_i\rangle, \quad j = 0 \dots M, \quad \text{onde} \quad (4.5)$$

$$\langle \psi_i | \mathcal{H} | \psi_j \rangle = \epsilon_j \delta_{ij}, \quad i, j = 0 \dots M. \quad (4.6)$$

O grande mérito desta técnica numérica é que a energia do estado fundamental converge com precisão de máquina para um pequeno número (~ 100) de estados da base de Lanczos, independentemente da dimensão do espaço de Hilbert do sistema em análise.

4.2 Expansão em alta temperatura

O método de Lanczos para $T > 0$ pode ser justificado para alta temperatura. A técnica é baseada na aplicação da iteração de Lanczos combinada com a redução do traço termodinâmico através da amostragem aleatória.

Primeiro considere o valor esperado do operador A no ensemble canônico

$$\langle A \rangle = \sum_{n=1}^{N_{st}} \langle n | e^{-\beta \mathcal{H}} A | n \rangle / \sum_{n=1}^{N_{st}} \langle n | e^{-\beta \mathcal{H}} | n \rangle, \quad (4.7)$$

onde $\beta = 1/k_B T$. Um cálculo direto de $\langle A \rangle$ requer o conhecimento de todos os autoestados $|\Psi_n\rangle$ e energias correspondentes E_n , obtidas pela diagonalização de $\mathcal{H}$,

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{n=1}^{N_{st}} e^{-\beta E_n} \langle \Psi_n | A | \Psi_n \rangle}{\sum_{n=1}^{N_{st}} e^{-\beta E_n}}, \quad (4.8)$$

acessível computacionalmente apenas para $N_{st} \sim 10000$. Em vez disso, vamos realizar a expansão em alta temperatura (HTE, do inglês High-Temperature Expansion) da exponencial $e^{-\beta \mathcal{H}}$:

$$\langle A \rangle = Z^{-1} \sum_{n=1}^{N_{st}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^k}{k!} \langle n | \mathcal{H}^k A | n \rangle, \quad (4.9)$$

$$Z = \sum_{n=1}^{N_{st}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^k}{k!} \langle n | \mathcal{H}^k | n \rangle. \quad (4.10)$$

Para calcular os termos $\langle n | \mathcal{H}^k A | n \rangle$ da expansão considere o elemento de matriz $W_{kl} = \langle n | \mathcal{H}^k B \mathcal{H}^l A | n \rangle$, onde $|n\rangle$ é um vetor aleatório normalizado, e A, B são operadores gerais e k, l finitos. Vamos expressar este elemento em termos dos autovetores e autovalores de Lanczos. Para isso vamos realizar dois procedimentos de Lanczos com $M = \max(k, l)$ passos. Primeiramente iniciamos com o vetor $|\phi_0\rangle = |n\rangle$, produzindo o subespaço $L_M = \{|\phi_j\rangle, j = 0 \dots M\}$ juntamente com os autovetores $|\psi_j\rangle$ e autovalores ϵ_j . O segundo procedimento é iniciado com o vetor normalizado

$$|\phi'_0\rangle = A|\phi_0\rangle / \sqrt{\langle \phi_0 | A^\dagger A | \phi_0 \rangle}, \quad (4.11)$$

resultando no subespaço $L'_M = \{|\phi'_j\rangle, j = 0 \dots M\}$ com autovetores $|\psi'_j\rangle$ e autovalores ϵ'_j . Podemos definir os projetores

$$P_m = \sum_{i=0}^m |\phi_i\rangle \langle \phi_i|, \quad P'_m = \sum_{i=0}^m |\phi'_i\rangle \langle \phi'_i|, \quad (4.12)$$

que para $m = M$ podem ser escritos como

$$P_M = \sum_{i=0}^M |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \quad P'_M = \sum_{i=0}^M |\psi'_i\rangle \langle \psi'_i|. \quad (4.13)$$

Levando em conta as definições 4.12, 4.13 podemos mostrar que

$$\mathcal{H}P_m = P_{m+1}\mathcal{H}P_m = P_M\mathcal{H}P_m, \quad m < M. \quad (4.14)$$

Adicionado o fato que $|n\rangle = |\phi_0\rangle = P_0|\phi_0\rangle$ e $A|n\rangle \propto |\phi'_0\rangle = P'_0|\phi'_0\rangle$ e aplicando várias vezes a equação 4.14 encontramos

$$W_{kl} = \langle \phi_0 | P_0 \mathcal{H} P_1 \mathcal{H} \dots \mathcal{H} P_k B P'_l \mathcal{H} \dots P'_1 \mathcal{H} P'_0 A | \phi_0 \rangle. \quad (4.15)$$

Usando novamente a equação 4.14 e as identidades $P_0|\phi_0\rangle = P_M|\phi_0\rangle$, $P'_0 A|\phi_0\rangle = P'_M A|\phi_0\rangle$ podemos reescrever o elemento de matriz como

$$W_{kl} = \langle \phi_0 | P_M \mathcal{H} P_M \mathcal{H} \dots \mathcal{H} P_M B P'_M \mathcal{H} \dots P'_M \mathcal{H} P'_M A | \phi_0 \rangle. \quad (4.16)$$

Portanto, usando as expressões 4.13 e 4.6 para os elementos de matriz, obtemos

$$\begin{aligned} W_{kl} &= \sum_{i_0=0}^M \dots \sum_{i_k=0}^M \sum_{j_0=0}^M \dots \sum_{j_l=0}^M \langle \phi_0 | \psi_{i_0} \rangle \langle \psi_{i_0} | \mathcal{H} | \psi_{i_1} \rangle \dots \langle \psi_{i_{k-1}} | \mathcal{H} | \psi_{i_k} \rangle \\ &\quad \times \langle \psi_{i_k} | B | \psi'_{j_l} \rangle \langle \psi'_{j_l} | \mathcal{H} | \psi'_{j_{l-1}} \rangle \dots \langle \psi'_{j_1} | \mathcal{H} | \psi'_{j_0} \rangle \langle \psi'_{j_0} | A | \psi_{j_0} \rangle = \\ &= \sum_{i=0}^M \sum_{j=0}^M \langle \phi_0 | \psi_i \rangle \langle \psi_i | B | \psi'_j \rangle \langle \psi'_j | A | \phi_0 \rangle (\epsilon_i)^k (\epsilon'_j)^l. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Desta forma, com $m \geq k$ e com $|\phi_0^n\rangle = |n\rangle$ obtemos os elementos de matriz desejados fazendo $l = 0$ e $B = 1$ na equação 4.17

$$\langle n | \mathcal{H}^k A | n \rangle = \sum_{i=0}^M \langle n | \psi_i^n \rangle \langle \psi_i^n | A | n \rangle (\epsilon_i^n)^k. \quad (4.18)$$

Numa base restrita $k \leq M$, podemos inserir a expressão 4.18 nas equações 4.9 e 4.10 assumindo $k > M$. Portanto, podemos expressar o resultado final como

$$\langle A \rangle \approx Z^{-1} \sum_{n=1}^{N_{st}} \sum_{i=0}^M e^{-\beta \epsilon_i^n} \langle n | \psi_i^n \rangle \langle \psi_i^n | A | n \rangle, \quad (4.19)$$

$$\langle Z \rangle \approx \sum_{n=1}^{N_{st}} \sum_{i=0}^M e^{-\beta \epsilon_i^n} \langle n | \psi_i^n \rangle \langle \psi_i^n | n \rangle, \quad (4.20)$$

onde o erro da aproximação é da ordem de β^{M+1} . Vale salientar que $\beta \ll 1$, uma vez que a expansão é realizada em alta temperatura.

4.3 Amostragem aleatória

O cálculo das quantidades 4.19 e 4.20 envolve somas sobre o conjunto completo de N_{st} estados $|n\rangle$, que não é viável na prática. Para obter um método útil, deve ser feita mais uma aproximação substituindo a soma total por uma soma parcial sobre um conjunto muito menor de estados aleatórios. É uma aproximação difícil de justificar rigorosamente, entretanto podemos estimar os erros envolvidos.

Vamos considerar o valor esperado $\langle A \rangle$ em $T > 0$, definido pela equação 4.7. Em vez de avaliar toda a soma da expressão 4.7 primeiramente calcularemos apenas um elemento com respeito a um estado aleatório $|r\rangle$, que é uma combinação linear dos estados base

$$|r\rangle = \sum_{n=1}^{N_{st}} \alpha_{rn} |n\rangle, \quad (4.21)$$

ou seja, α_{rn} é aleatoriamente distribuído. Vamos discutir então a quantidade

$$\begin{aligned} \bar{A}_r &= \langle r | e^{-\beta \mathcal{H}} A | r \rangle / \langle r | e^{-\beta \mathcal{H}} | r \rangle = \\ &= \sum_{n,m=1}^{N_{st}} \alpha_{rn}^* \alpha_{rm} \langle n | e^{-\beta \mathcal{H}} A | m \rangle / \sum_{n,m=1}^{N_{st}} \alpha_{rn}^* \alpha_{rm} \langle n | e^{-\beta \mathcal{H}} | m \rangle. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Assumindo que $[\mathcal{H}, A] = 0$ e que os estados $|n\rangle$ sejam autoestados de $\mathcal{H}$, temos

$$\bar{A}_r = \sum_{n=1}^{N_{st}} |\alpha_{rn}|^2 Z_n A_n / \sum_{n=1}^{N_{st}} |\alpha_{rn}|^2 Z_n, \quad \text{onde} \quad (4.23)$$

$Z_n = \langle n | e^{-\beta \mathcal{H}} | n \rangle$ e $Z_n A_n = \langle n | e^{-\beta \mathcal{H}} A | n \rangle$. Podemos escrever $|\alpha_{rn}|^2 = 1/N_{st} + \delta_{rn}$, onde os desvios δ_{rn} não são correlacionados com os elementos de matriz Z_n e $Z_n A_n$.

Vemos que $\bar{A}_r$ está próximo de $\langle A \rangle$, o desvio estatístico está relacionado ao número de termos $\bar{Z}$ na soma termodinâmica, isto é

$$\bar{A}_r = \langle A \rangle + \mathcal{O}\left(1/\sqrt{\bar{Z}}\right), \quad \bar{Z} = e^{\beta E_0} \sum_n Z_n. \quad (4.24)$$

Note que para $T \rightarrow \infty$ temos $\bar{Z} \rightarrow N_{st}$ e, portanto, uma estimativa próxima da média 4.24 pode ser obtida a partir de um único estado aleatório. Por outro lado, em temperatura finita o erro estatístico cresce com a diminuição de $\bar{Z}$. Ainda, em $T = 0$ e para um estado fundamental não degenerado obtemos da expressão 4.23 novamente o resultado correto.

No FTLM substituímos a soma total na equação 4.7 por uma restrita a vários vetores aleatórios $|r\rangle$, $r = 1 \dots R$,

$$\bar{A} = \sum_{r=1}^R \langle r | e^{-\beta \mathcal{H}} A | r \rangle \Big/ \sum_{r=1}^R \langle r | e^{-\beta \mathcal{H}} | r \rangle. \quad (4.25)$$

Desta forma, das equações 4.23 e 4.24 o erro estatístico é reduzido,

$$\bar{A} = \langle A \rangle + \mathcal{O}\left(1/\sqrt{R\bar{Z}}\right). \quad (4.26)$$

4.4 Implementação

Agora vamos discutir a implementação prática do FTLM. Juntando os resultados das seções 4.2 e 4.3 podemos expressar a média do operador A como

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &\approx \frac{N_{st}}{ZR} \sum_{r=1}^R \sum_{j=1}^M e^{-\beta \epsilon_j^r} \langle r | \psi_j^r \rangle \langle \psi_j^r | A | r \rangle, \\ Z &\approx \frac{N_{st}}{ZR} \sum_{r=1}^R \sum_{j=1}^M e^{-\beta \epsilon_j^r} |\langle r | \psi_j^r \rangle|^2. \end{aligned} \quad (4.27)$$

A amostragem é sobre os R estados aleatórios $|r\rangle = |\phi_0^r\rangle$, que servem como estados iniciais para os M passos do procedimento de Lanczos, resultando em M autovalores aproximados ϵ_j^r com autovetores correspondentes $|\psi_j^r\rangle$.

É preciso determinar os elementos de matriz $\langle \psi_j^r | A | r \rangle$, ou seja, precisamos guardar todas as componentes de $|\psi_j^r\rangle$. Entretanto, o cálculo é significativamente simplificado

se o observável desejado comuta com o hamiltoniano do sistema. Desta forma,

$$\langle A \rangle \approx \frac{N_{st}}{ZR} \sum_{r=1}^R \sum_{j=1}^M e^{-\beta \epsilon_j^r} |\langle r | \psi_j^r \rangle|^2 A_j^r. \quad (4.28)$$

Neste caso, o cálculo dos autoestados não é necessário uma vez que a componente $\langle r | \psi_j^r \rangle = v_{j0}^r$, equação 4.5, é obtida diretamente dos autovetores da matriz tridiagonal.

Observe que já no método de Lanczos usual a utilização de simetrias do modelo é crucial para a diagonalização do hamiltoniano, pois podemos de reduzir as exigências de armazenamento e de processamento computacional. Isso se torna mais importante no FTLM onde a carga computacional é aumentada devido à amostragem aleatória, e ao cálculo dos elementos de matriz. Para $T > 0$, em geral, todos os setores de simetrias devem ser levados em consideração e eles podem ter dimensão significativamente diferentes. As equações 4.27 e 4.28 devem ser generalizadas para permitir a variação do número de amostras em cada setor, de modo que os setores que contenham mais estados sejam contemplados com um número maior de estados aleatórios. Se o setor de simetria s contém N_{st}^s estados de base e R_s amostragens são realizadas, então o somatório do cálculo das médias é modificado por

$$\frac{N_{st}}{R} \sum_{r=1}^R \longrightarrow \sum_s \frac{N_{st}^s}{R_s} \sum_{r=1}^{R_s}. \quad (4.29)$$

Usualmente escolhe-se $R_s \propto N_{st}^s$.

Vale ressaltar que todos resultados que serão obtidos nesta dissertação através desse método numérico será realizado utilizando os seguintes parâmetros: $N = 20$, $M = 50$ e $N_{amostras} = 50000$.

Capítulo 5

Ferrimagnetos unidimensionais de spins mistos com campo magnético

Cadeias de spins alternados possuem excitações elementares de aspecto dual. No caso do acoplamento antiferromagnético, o modo acústico reduz a magnetização do estado fundamental, ou seja, são de natureza ferromagnética, enquanto que o modo ótico aumenta a magnetização do estado fundamental, sendo, de natureza antiferromagnética [61].

Abordaremos aqui o método de ondas de spin interagentes em ferrimagnetos de Heisenberg com acoplamentos antiferromagnéticos na cadeia de spins mistos $s - S$, em particular para $s = 1/2$ e $S = 1$. A termodinâmica desse sistema será estudada através de uma restrição na magnetização proposta por Takahashi [52] e utilizada por Yamamoto [57, 59, 60] para estudar o comportamento em baixa temperatura de ferrimagnetos de spins mistos. Além de discutir um modelo analítico efetivo para estudar o comportamento do sistema de interesse na presença de um campo magnético.

5.1 Ondas de Spin em Ferrimagnetos

Consideramos o hamiltoniano para uma cadeia linear com spins mistos S e s em sítios alternados, na presença de um campo magnético uniforme na direção z , dado por

$$\mathcal{H} = J \sum_{j=1}^N \left(\vec{S}_j \cdot \vec{s}_j + \vec{s}_j \cdot \vec{S}_{j+1} \right) - g\mu_B H \sum_{j=1}^N (S_j^z + s_j^z), \quad (5.1)$$

onde o número total de células unitárias é N e H é o campo magnético aplicado. Vamos calcular [37, 57], as principais correções do vácuo, representado na figura 5.1,

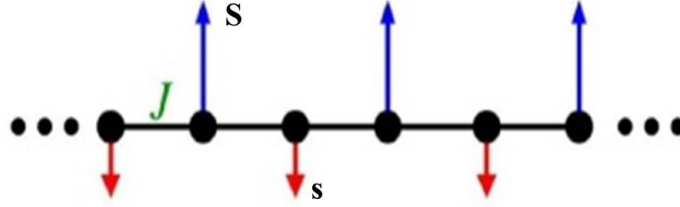


Figura 5.1: Representação esquemática do arranjo de spins com componentes s e S , na direção z , em uma cadeia com interações discutidas pelo hamiltoniano na equação 5.1.

onde as componente z dos spins são respectivamente S e $-s$. A transformação de Holstein-Primakoff é dada por:

$$S_j^z = S - a_j^\dagger a_j; \quad S_j^+ = (2S)^{1/2} \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S} \right)^{1/2} a_j; \quad S_j^- = (2S)^{1/2} a_j^\dagger \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S} \right)^{1/2} \quad (5.2)$$

e

$$s_j^z = -s + b_j^\dagger b_j; \quad s_j^+ = (2s)^{1/2} b_j^\dagger \left(1 - \frac{b_j^\dagger b_j}{2s} \right)^{1/2}; \quad s_j^- = (2s)^{1/2} \left(1 - \frac{b_j^\dagger b_j}{2s} \right)^{1/2} b_j \quad (5.3)$$

Desta forma, podemos escrever o hamiltoniano em termos dos operadores bosônicos

$a_j^\dagger$, a_j , $b_j^\dagger$ e b_j :

$$\mathcal{H} = J \sum_j \left[S_j^z s_j^z + \frac{1}{2} (S_j^+ s_j^- + S_j^- s_j^+) + s_j^z S_{j+1}^z + \frac{1}{2} (s_j^+ S_{j+1}^- + s_j^- S_{j+1}^+) \right] - B \sum_j (S_j^z + s_j^z),$$

onde $B = g\mu_B H$. Sendo assim, analogamente às seções 3.1 e 3.2, teremos

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} = & J \sum_j \left\{ \left(S - a_j^\dagger a_j \right) \left(-s + b_j^\dagger b_j \right) + \sqrt{sS} \left[\left(a_j - \frac{a_j^\dagger a_j^2}{4S} \right) \left(b_j - \frac{b_j^\dagger b_j^2}{4s} \right) + \right. \right. \\
& + \left. \left(a_j^\dagger - \frac{a_j^{\dagger 2} a_j}{4S} \right) \left(b_j^\dagger - \frac{b_j^{\dagger 2} b_j}{4s} \right) \right] + \sqrt{sS} \left[\left(b_j^\dagger - \frac{b_j^{\dagger 2} b_j}{4s} \right) \left(a_{j+1}^\dagger - \frac{(a_{j+1}^\dagger)^2 a_{j+1}}{4S} \right) + \right. \\
& + \left. \left. \left(b_j - \frac{b_j^\dagger b_j^2}{4s} \right) \left(a_{j+1} - \frac{a_{j+1}^\dagger a_{j+1}^2}{4S} \right) \right] + \left(-s + b_j^\dagger b_j \right) \left(S - a_{j+1}^\dagger a_{j+1} \right) \right\} + \\
& - B \sum_j \left(S - s + b_j^\dagger b_j - a_j^\dagger a_j \right), \tag{5.4}
\end{aligned}$$

portanto, podemos escrever que

$$\mathcal{H} = E_{class} + \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \mathcal{O}(S^{-1}), \quad \text{onde} \tag{5.5}$$

$$E_{class} = -2JNsS - B(S - s)N, \text{ e}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_0 = & J \sum_j \left\{ s \left(a_j^\dagger a_j + a_{j+1}^\dagger a_{j+1} \right) + \sqrt{sS} \left[\left(a_j + a_{j+1} \right) b_j + \left(a_j^\dagger + a_{j+1}^\dagger \right) b_j^\dagger + \right. \right. \\
& + \left. \left. 2S b_j^\dagger b_j \right] + B \sum_j \left(a_j^\dagger a_j - b_j^\dagger b_j \right) \right\}.
\end{aligned}$$

Fazendo a transformada de Fourier (parâmetro de rede $a = 1$),

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp[-ik(j - 1/4)] a_k \quad \text{e} \quad b_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp[ik(j + 1/4)] b_k, \tag{5.6}$$

obtemos a seguinte expressão:

$$\mathcal{H}_0 = 2J \sum_k \left[s a_k^\dagger a_k + S b_k^\dagger b_k + \sqrt{sS} \cos\left(\frac{k}{2}\right) \left(a_k b_k + a_k^\dagger b_k^\dagger \right) \right] + B \sum_k \left(a_k^\dagger a_k - b_k^\dagger b_k \right). \tag{5.7}$$

Para diagonalizar a expressão 5.7, considere a transformação de Bogoliubov definida por

$$a_k = \cosh \theta_k \alpha_k - \sinh \theta_k \beta_k^\dagger \quad \text{e} \quad b_k = \cosh \theta_k \beta_k - \sinh \theta_k \alpha_k^\dagger, \tag{5.8}$$

com

$$\tan 2\theta_k = 2 \frac{\sqrt{sS}}{s+S} \cos\left(\frac{k}{2}\right). \quad (5.9)$$

Substituindo 5.8 em 5.7, obtemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 = 2J \sum_k \bigg\{ & \left[s \cosh^2 \theta_k + S \sinh^2 \theta_k - 2\sqrt{sS} \cos\left(\frac{k}{2}\right) \sinh \theta_k \cosh \theta_k \right] \alpha_k^\dagger \alpha_k + \left[S \cosh^2 \theta_k + \right. \\ & + s \sinh^2 \theta_k - 2\sqrt{sS} \cos\left(\frac{k}{2}\right) \sinh \theta_k \cosh \theta_k \big] \beta_k^\dagger \beta_k - 2\sqrt{sS} \cos\left(\frac{k}{2}\right) \sinh \theta_k \cosh \theta_k + \\ & + (s+S) \sinh^2 \theta_k + \left[\sqrt{sS} \cos\left(\frac{k}{2}\right) (\sinh^2 \theta_k + \cosh^2 \theta_k) - (s+S) \sinh \theta_k \cosh \theta_k \right] \alpha_k \beta_k + \\ & \left. + \left[\sqrt{sS} \cos\left(\frac{k}{2}\right) (\sinh^2 \theta_k + \cosh^2 \theta_k) - (s+S) \sinh \theta_k \cosh \theta_k \right] \alpha_k^\dagger \beta_k^\dagger \right\} + B \sum_k (\alpha_k^\dagger \alpha_k - \beta_k^\dagger \beta_k), \end{aligned}$$

sendo assim, da equação 5.9 em analogia à página 41, podemos escrever

$$\mathcal{H}_0 = \sum_k \left[\omega_k^- \alpha_k^\dagger \alpha_k + \omega_k^+ \beta_k^\dagger \beta_k + \epsilon_{0k} \right], \quad (5.10)$$

onde

$$\omega_k^- = -J(S-s) + B + J\omega_k \quad (5.11)$$

$$\omega_k^+ = J(S-s) - B + J\omega_k \quad (5.12)$$

são as energias dos modos de ondas de spin e $\epsilon_{0k} = -J(S+s) + J\omega_k$ é a energia de ponto zero, com

$$\omega_k = \sqrt{(S-s)^2 + 4sS \sin^2\left(\frac{k}{2}\right)}. \quad (5.13)$$

A soma em k da energia de ponto zero ϵ_{0k} na expressão 5.10 é a correção em ordem $\mathcal{O}(S^1)$ da energia do estado fundamental (E_g), a saber

$$E_0 = \sum_k \epsilon_{0k} \rightarrow E_0 = J \sum_k \left[\omega_k - (S+s) \right], \quad (5.14)$$

que no limite termodinâmico, para $S = 1$ e $s = 1/2$, é dada por $-0.437J$. Sendo assim, a campo nulo, a teoria de ondas de spin não interagente nos dá o valor $E_g =$

$E_{class} + E_0 \simeq -1.437J$, para a energia do estado fundamental, onde o valor exato é $-1.454J$ [58, 60].

A campo nulo o modo de mais baixa energia (ω_k^-) mostra uma relação de dispersão quadrática para pequenos valores de k , que é consistente com o comportamento inicial $T^{1/2}$ do calor específico de um ferromagneto unidimensional. Por outro lado, o gap do ramo antiferromagnético, para $S = 1$ e $s = 1/2$, é exatamente J :

$$\Delta_{sS} = \left[\omega_k^+(k=0) - \omega_k^-(k=0) \right] = 2J(S-s) \rightarrow \Delta = J, \quad (5.15)$$

que está consideravelmente distante da estimativa numérica de $1.759J$ [29, 58, 60].

Na figura 5.2 representamos graficamente as relações de dispersão dos modos ferro-

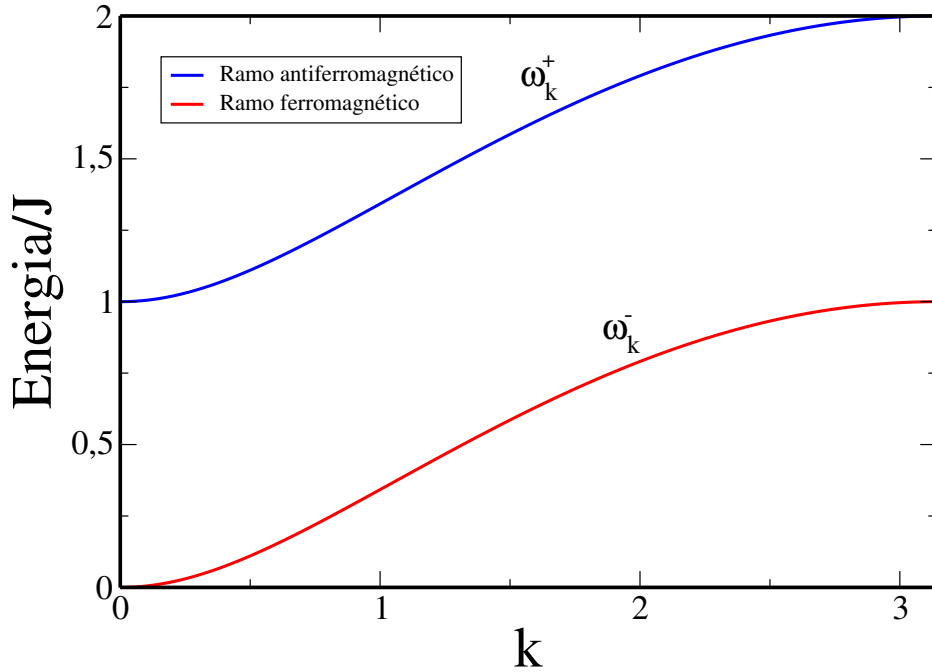


Figura 5.2: Os dois ramos de ondas de spin, ω_k^+ (Antiferromagnético) e ω_k^- (Ferromagnético), em unidades de J , para um sistema de spins alternados com $s = 1/2$ e $S = 1$.

magnético (sem gap) e antiferromagnético (com gap) pelo método de ondas de spin não interagentes sem campo magnético.

Agora vamos considerar as contribuições relevantes de $\mathcal{H}_1$ às relações de dispersão, bem como à energia do estado fundamental. Da equação 5.4, temos que

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 = & -J \sum_j \left\{ \frac{1}{4} \left[\sqrt{\frac{S}{s}} (a_j + a_{j+1}) b_j^\dagger b_j^2 + \sqrt{\frac{s}{S}} a_j^\dagger a_j^2 (b_j + b_{j-1}) + \sqrt{\frac{S}{s}} (a_j^\dagger + a_{j+1}^\dagger) \times \right. \right. \\ & \times \left. \left. b_j^{\dagger 2} b_j + \sqrt{\frac{s}{S}} a_j^\dagger a_j (b_j^\dagger + b_{j-1}^\dagger) \right] + (a_j^\dagger a_j + a_{j+1}^\dagger a_{j+1}) b_j^\dagger b_j \right\}. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Entretanto, empregando o teorema de Wick, podemos escrever $\mathcal{H}_1$ como

$$\mathcal{H}_1 = E_1 - J \sum_k \left(\delta\omega_k^- \alpha_k^\dagger \alpha_k + \delta\omega_k^+ \beta_k^\dagger \beta_k \right) + \mathcal{H}_{irrel} + \mathcal{H}_{quart}, \quad (5.17)$$

onde $\mathcal{H}_{irrel}$ contém termos irrelevantes do tipo $\alpha_k \beta_k$ e $\mathcal{H}_{quart}$ contém termos residuais de interações de dois corpos; ambos iremos desprezar [57, 60]. Os termos E_1 e $\delta\omega_k^\pm$, são, respectivamente, as correções em ordem $\mathcal{O}(S^0)$ da energia do estado fundamental e das relações de dispersão.

Fazendo a transformada de fourier, equação 5.6, da expressão 5.16, temos

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 = & \frac{-J}{N} \sum_k \sum_k \left\{ 2a_k^\dagger a_k b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2} \left[\sqrt{\frac{S}{s}} \cos(k/2) a_k b_k^\dagger b_k^2 + \sqrt{\frac{s}{S}} \cos(k/2) a_k^\dagger a_k^2 b_k + \right. \right. \\ & + \left. \left. \sqrt{\frac{S}{s}} \cos(k/2) a_k^\dagger b_k^{\dagger 2} b_k + \sqrt{\frac{s}{S}} \cos(k/2) a_k^{\dagger 2} a_k b_k^\dagger \right] \right\}, \text{ entretanto,} \end{aligned}$$

da transformação de Bogoliubov, equação 5.8, podemos escrever $\mathcal{H}_1$ da forma 5.17, tal que

$$\begin{aligned} \delta\omega_k^- = & \frac{2}{N} \sum_k \sinh^2 \theta_k \left(\cosh^2 \theta_k + \sinh^2 \theta_k \right) - \frac{2}{N\sqrt{sS}} \sum_k \sinh^3 \theta_k \cosh \theta_k (S+s) \cos(k/2) + \\ & - \frac{1}{N\sqrt{sS}} \sum_k \sinh \theta_k \cosh \theta_k \cos(k/2) \left(S \sinh^2 \theta_k + s \cosh^2 \theta_k - \frac{2\sqrt{sS}}{\cos(k/2)} \sinh \theta_k \cosh \theta_k \right) \end{aligned} \quad (5.18)$$

e

$$\begin{aligned} \delta\omega_k^+ &= \frac{2}{N} \sum_k \sinh^2 \theta_k \left(\cosh^2 \theta_k + \sinh^2 \theta_k \right) - \frac{2}{N\sqrt{sS}} \sum_k \sinh^3 \theta_k \cosh \theta_k (S+s) \cos(k/2) + \\ &- \frac{1}{N\sqrt{sS}} \sum_k \sinh \theta_k \cosh \theta_k \cos(k/2) \left(S \cosh^2 \theta_k + s \sinh^2 \theta_k - \frac{2\sqrt{sS}}{\cos(k/2)} \sinh \theta_k \cosh \theta_k \right). \end{aligned} \quad (5.19)$$

Definindo as quantidades

$$\Gamma_1 = \frac{1}{N} \sum_k \sinh^2 \theta_k \quad \text{e} \quad \Gamma_2 = \frac{1}{N} \sum_k \cos(k/2) \sinh \theta_k \cosh \theta_k, \quad (5.20)$$

que no limite termodinâmico, com $S = 1$ e $s = 1/2$, são respectivamente, 0.304887 e 0.337779, podemos reescrever as expressões 5.18 e 5.19, como

$$\begin{aligned} \delta\omega_k^- &= 2\Gamma_1 \left[\cosh^2 \theta_k + \sinh^2 \theta_k - \sinh \theta_k \cosh \theta_k \frac{(S+s)}{\sqrt{sS}} \cos(k/2) \right] + \\ &- \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \left(S \sinh^2 \theta_k + s \cosh^2 \theta_k - \frac{\sqrt{2sS}}{\cos(k/2)} \sinh \theta_k \cosh \theta_k \right) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \delta\omega_k^+ &= 2\Gamma_1 \left[\cosh^2 \theta_k + \sinh^2 \theta_k - \sinh \theta_k \cosh \theta_k \frac{(S+s)}{\sqrt{sS}} \cos(k/2) \right] + \\ &- \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \left(S \cosh^2 \theta_k + s \sinh^2 \theta_k - \frac{\sqrt{2sS}}{\cos(k/2)} \sinh \theta_k \cosh \theta_k \right). \end{aligned}$$

Desta forma, utilizando a equação 5.9 obtemos:

$$\delta\omega_k^- = 2\Gamma_1 \frac{(S+s)}{\omega_k} \sin^2(k/2) - \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \left\{ \frac{1}{\omega_k} [(S-s)^2] - (S-s) \right\}; \quad (5.21)$$

$$\delta\omega_k^+ = 2\Gamma_1 \frac{(S+s)}{\omega_k} \sin^2(k/2) - \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \left\{ \frac{1}{\omega_k} [(S-s)^2] + (S-s) \right\}. \quad (5.22)$$

A fim de manter o ramo da excitação ferromagnética sem gap, podemos escrever

$$\begin{aligned} \delta\omega_k^- &= 2\Gamma_1 \frac{(S+s)}{\omega_k} \sin^2(k/2) - \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \left\{ \frac{1}{\omega_k} [(S-s)^2 + 4sS \sin^2(k/2)] - (S-s) \right\} + \\ &+ 4\Gamma_2 \sqrt{sS} \frac{\sin^2(k/2)}{\omega_k} = 2\Gamma_1 \frac{(S+s)}{\omega_k} \sin^2(k/2) - \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} [\omega_k - (S-s)] + \\ &+ 4\Gamma_2 \sqrt{sS} \frac{\sin^2(k/2)}{\omega_k} \end{aligned} \quad (5.23)$$

e

$$\begin{aligned}
\delta\omega_k^+ &= 2\Gamma_1 \frac{(S+s)}{\omega_k} \sin^2(k/2) - \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \left\{ \frac{1}{\omega_k} \left[(S-s)^2 + 4sS \sin^2(k/2) \right] + (S-s) \right\} + \\
&+ 4\Gamma_2 \sqrt{sS} \frac{\sin^2(k/2)}{\omega_k} = 2\Gamma_1 \frac{(S+s)}{\omega_k} \sin^2(k/2) - \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \left[\omega_k + (S-s) \right] + \\
&+ 4\Gamma_2 \sqrt{sS} \frac{\sin^2(k/2)}{\omega_k}.
\end{aligned} \tag{5.24}$$

Levamos o último termo das equações 5.23 e 5.24 à correção E_1 da energia do estado fundamental, sendo assim, as correções dos modos ferromagnético e antiferromagnético são, respectivamente,

$$\delta\omega_k^- = 2\Gamma_1 \frac{(S+s)}{\omega_k} \sin^2(k/2) - \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \left[\omega_k - (S-s) \right]; \tag{5.25}$$

$$\delta\omega_k^+ = 2\Gamma_1 \frac{(S+s)}{\omega_k} \sin^2(k/2) - \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \left[\omega_k + (S-s) \right]. \tag{5.26}$$

Portanto, a correção E_1 será:

$$\begin{aligned}
E_1 &= -\frac{2J}{N} \sum_k \sum_k \left\{ \sinh^4 \theta_k + \sqrt{S/s} \frac{\cos(k/2)}{4} \left[-3 \sinh^3 \theta_k \cosh \theta_k - \cosh^3 \theta_k \sinh \theta_k + \right. \right. \\
&+ \left. \sinh \theta_k \cosh \theta_k \right] + \sqrt{s/S} \frac{\cos(k/2)}{4} \left[-3 \sinh^3 \theta_k \cosh \theta_k - \cosh^3 \theta_k \sinh \theta_k + \right. \\
&+ \left. \sinh \theta_k \cosh \theta_k \right] \left. \right\} - 2J\Gamma_2 \sqrt{sS} \sum_k \frac{\sin^2(k/2)}{\omega_k},
\end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned}
E_1 &= -\frac{2J}{N} \sum_k \sum_k \left[\sinh^4 \theta_k - \left(\sqrt{S/s} + \sqrt{s/S} \right) \cos(k/2) \cosh \theta_k \sinh^3 \theta_k \right] + \\
&- 2J\Gamma_2 \sqrt{sS} \sum_k \frac{\cos^2(k/2)}{\omega_k} = -2JN \left[\Gamma_1^2 - \left(\sqrt{S/s} + \sqrt{s/S} \right) \Gamma_1 \Gamma_2 \right] - 2JN\Gamma_2^2,
\end{aligned}$$

sendo assim, finalmente teremos

$$E_1 = -2JN \left[\Gamma_1^2 + \Gamma_2^2 - \left(\sqrt{S/s} + \sqrt{s/S} \right) \Gamma_1 \Gamma_2 \right], \tag{5.27}$$

que no limite termodinâmico é dada por $E_1 = -0.022J$ [57, 60].

Até $\mathcal{O}(S^0)$ podemos escrever o hamiltoniano do sistema como

$$\mathcal{H} \simeq E_g + \sum_k (\tilde{\omega}_k^- \alpha_k^\dagger \alpha_k + \tilde{\omega}_k^+ \beta_k^\dagger \beta_k), \quad (5.28)$$

onde

$$\tilde{\omega}_k^\pm = \omega_k^\pm - J\delta\omega_k^\pm \quad (5.29)$$

$$E_g = E_{class} + E_0 + E_1. \quad (5.30)$$

Na figura 5.3 apresentamos os ramos ferromagnético e antiferromagnético corrigidos, equação 5.29, como função de k para $(S, s) = (1, 1/2)$, a campo nulo, além daqueles obtidos na aproximação de ondas de spin não interagentes. Encontramos que o modo antiferromagnético é corrigido de forma relevante. Entretanto, a largura de banda dos dois ramos, que são exatamente o mesmo dentro da teoria de ondas de spin não interagentes, agora são distintos, devido às interações. O gap $\Delta_{sS} = J$ é substituído por $\Delta_{sS} = (1 - 2\Gamma_2)J \simeq 1.676J$, que é muito mais próximo do valor exato $1.759J$ [29, 57, 58]. A energia do estado fundamental E_g é refinada: $E_{class} + E_0 \simeq -1.437J$, enquanto que $E_{class} + E_0 + E_1 \simeq -1.459J$, onde o valor exato é $-1.454J$.

5.1.1 Efeitos Térmicos em Campo Nulo ($B = 0$)

Na teoria de ondas de spin convencional o número de bósons diverge em campo nulo. Para suprir essa divergência, Takahashi [51, 52] considerou uma restrição nas funções de distribuição bosônicas em magnetização nula e obteve uma excelente descrição da termodinâmica em baixa temperatura para ferromagnetos de Heisenberg unidimensionais. Iremos discutir o esquema de Yamamoto *et al* [57, 59, 60] que utili-

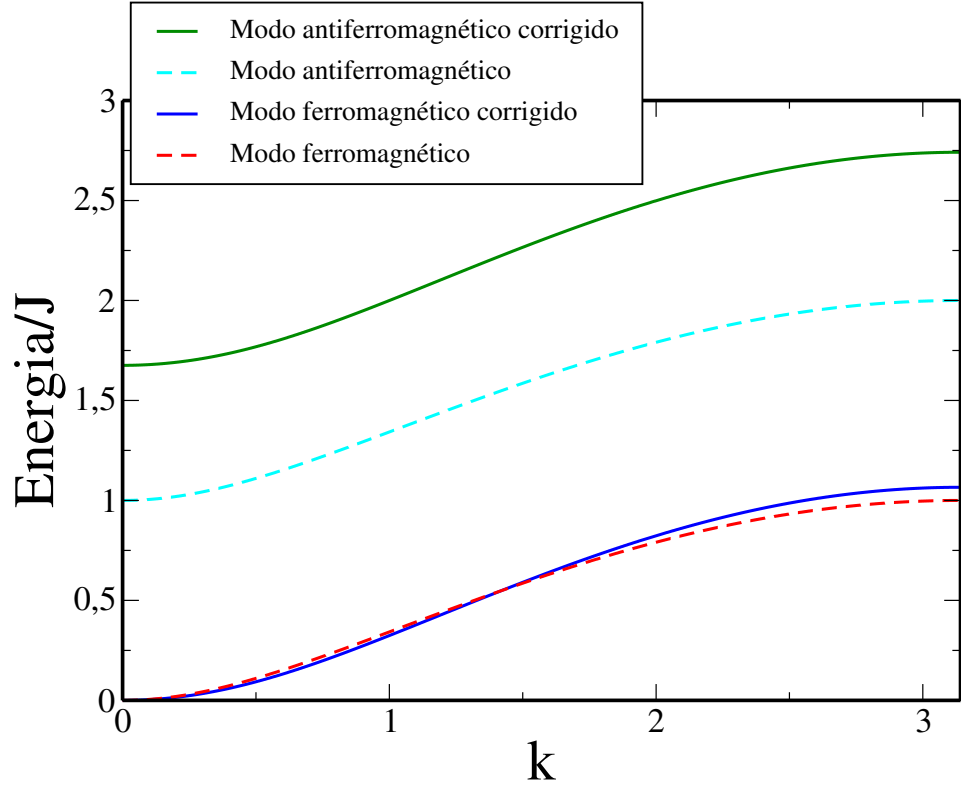


Figura 5.3: Relações de dispersão dos estados de menores energias. Uma comparação entre a teoria ondas de spin não interagente com o cálculo corrigido levando em consideração as interações entre as ondas de spin.

zou a teoria de ondas de spin modificada de Takahashi para estudar o comportamento térmico de ferrimagnetos em baixa temperatura.

Em temperaturas finitas, substituímos $\alpha_k^\dagger \alpha_k$ e $\beta_k^\dagger \beta_k$ do Hamiltoniano de ondas de spin 5.28 por $\tilde{n}_k^- = \langle \alpha_k^\dagger \alpha_k \rangle$ e $\tilde{n}_k^+ = \langle \beta_k^\dagger \beta_k \rangle$, respectivamente, onde

$$\tilde{n}_k^\pm \equiv \sum_{n^-, n^+} n^\pm P_k(n^-, n^+) \quad (5.31)$$

com $P_k(n^-, n^+)$ sendo a probabilidade das ondas de spin, n^- (ferromagnéticas) e n^+ (antiferromagnéticas) aparecerem no estado de momento k e satisfazendo

$$\sum_{n^-, n^+} P_k(n^-, n^+) = 1 \quad (5.32)$$

para todos os valores de k . Assim, podemos reescrever o Hamiltoniano de ondas de spin da forma

$$\mathcal{H} = E_g + \sum_k (\tilde{n}_k^- \tilde{\omega}_k^- + \tilde{n}_k^+ \tilde{\omega}_k^+).$$

A conexão com a termodinâmica é realizada através da energia livre $F = U - TS$, onde a energia interna e a entropia são dadas, respectivamente, por

$$U = -\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta} \quad \text{e} \quad S = -k_B \sum_k \sum_{n^-, n^+} P_k(n^-, n^+) \ln P_k(n^-, n^+),$$

com $\mathcal{Z}$ sendo a função de partição canônica, dada por

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{k, n^-, n^+\}} \exp \left[-\beta \mathcal{H}\{k, n^-, n^+\} \right].$$

Sendo assim, como

$$\begin{aligned} U &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \left\{ -\beta E_g + \ln \left(\sum_{k, n^-, n^+} \exp \left[-\beta \sum_k (\tilde{n}_k^- \tilde{\omega}_k^- + \tilde{n}_k^+ \tilde{\omega}_k^+) \right] \right) \right\} = \\ &= E_g + \sum_k (\tilde{n}_k^- \tilde{\omega}_k^- + \tilde{n}_k^+ \tilde{\omega}_k^+) \Rightarrow \\ &\Rightarrow U = E_g + \sum_k (\tilde{n}_k^- \tilde{\omega}_k^- + \tilde{n}_k^+ \tilde{\omega}_k^+), \end{aligned} \quad (5.33)$$

podemos escrever a energia livre a campo nulo, usando a entropia S e a expressão 5.33 para a energia interna, da forma

$$F = E_g + \sum_k (\tilde{n}_k^- \tilde{\omega}_k^- + \tilde{n}_k^+ \tilde{\omega}_k^+) + k_B T \sum_k \sum_{n^-, n^+} P_k(n^-, n^+) \ln P_k(n^-, n^+). \quad (5.34)$$

Vamos agora realizar a minimização da energia livre com respeito a $P_k(n^-, n^+)$ sob uma restrição particular como também a restrição trivial da equação 5.32. A restrição particular introduzida por Takahashi [51, 52] é que a magnetização a campo nulo é zero. Esta restrição funciona muito bem, especialmente para ferromagnetos,

onde serve para controlar o número de bósons de Holstein-Primakoff. Aplicando a mesma restrição neste modelo:

$$M = \langle S^z + s^z \rangle = 0, \quad (5.35)$$

sendo assim,

$$\begin{aligned} M &= \langle NS - \sum_j a_j^\dagger a_j - Ns + \sum_j b_j^\dagger b_j \rangle = N(S - s) - \langle \sum_j a_j^\dagger a_j \rangle + \langle \sum_j b_j^\dagger b_j \rangle = \\ &= N(S - s) - \sum_k \tilde{n}_k^- + \sum_k \tilde{n}_k^+ = N(S - s) - \sum_k \sum_{\sigma=\pm} \sigma \tilde{n}_k^{-\sigma} = 0, \end{aligned}$$

portanto podemos escrever a restrição da forma

$$\sum_k \sum_{\sigma=\pm} \sigma \tilde{n}_k^{-\sigma} = N(S - s). \quad (5.36)$$

Desta maneira, iremos minimizar a energia livre pelo método dos multiplicadores de Lagrange usando as restrições, 5.36 e 5.32. Então, introduziremos $N + 1$ multiplicadores de Lagrange μ_k 's e μ e minimizaremos a quantidade $\bar{F}$, dada por

$$\bar{F} = F - \sum_k \mu_k \sum_{n^-, n^+} P_k(n^-, n^+) - \mu \sum_k \sum_{\sigma=\pm} \sigma \tilde{n}_k^{-\sigma}. \quad (5.37)$$

Logo, de $\partial \bar{F} / \partial P_{k'}(n^-, n^+) = 0$, temos:

$$\frac{\partial F}{\partial P_{k'}} - \sum_k \mu_k \sum_{n^-, n^+} \frac{\partial P_k}{\partial P_{k'}} - \mu \sum_k \sum_{\sigma=\pm} \sigma \frac{\partial \tilde{n}_k^{-\sigma}}{\partial P_{k'}} = 0,$$

onde

$$\frac{\partial F}{\partial P_{k'}} = \sum_k \left(\frac{\partial \tilde{n}_k^-}{\partial P_{k'}} \tilde{\omega}_k^- + \frac{\partial \tilde{n}_k^+}{\partial P_{k'}} \tilde{\omega}_k^+ \right) + k_B T \sum_k \sum_{n^-, n^+} \left[\ln P_k + 1 \right],$$

logo

$$\sum_k \sum_{n^-, n^+} \left[(n^- \tilde{\omega}_k^- + n^+ \tilde{\omega}_k^+) + k_B T (\ln P_k + 1) - \mu_k - \mu (n^- - n^+) \right] = 0,$$

portanto podemos escrever

$$P_k = \exp(\beta\mu_k - 1) \exp\left[-\beta n^-(\tilde{\omega}_k^- - \mu)\right] \exp\left[-\beta n^+(\tilde{\omega}_k^+ + \mu)\right]. \quad (5.38)$$

Entretanto, da equação 5.32

$$\begin{aligned} \sum_{n^-, n^+} \exp(\beta\mu_k - 1) \exp\left[-\beta n^-(\tilde{\omega}_k^- - \mu)\right] \exp\left[-\beta n^+(\tilde{\omega}_k^+ + \mu)\right] &= 1 \Rightarrow \\ \Rightarrow \exp(\beta\mu_k - 1) \sum_{n^-} \exp\left[-\beta n^-(\tilde{\omega}_k^- - \mu)\right] \sum_{n^+} \exp\left[-\beta n^+(\tilde{\omega}_k^+ + \mu)\right] &= 1 \Rightarrow \\ \Rightarrow \exp(\beta\mu_k - 1) \times \frac{1}{1 - \exp\left[-\beta(\tilde{\omega}_k^- - \mu)\right]} \times \frac{1}{1 - \exp\left[-\beta(\tilde{\omega}_k^+ + \mu)\right]} &= 1, \end{aligned}$$

desta forma

$$\exp(\beta\mu_k - 1) = \left(1 - \exp\left[-\beta(\tilde{\omega}_k^- - \mu)\right]\right) \left(1 - \exp\left[-\beta(\tilde{\omega}_k^+ + \mu)\right]\right),$$

logo

$$\begin{aligned} P_k &= \left(1 - \exp\left[-\beta(\tilde{\omega}_k^- - \mu)\right]\right) \left(1 - \exp\left[-\beta(\tilde{\omega}_k^+ + \mu)\right]\right) \times \\ &\quad \times \exp\left[-\beta n^-(\tilde{\omega}_k^- - \mu)\right] \exp\left[-\beta n^+(\tilde{\omega}_k^+ + \mu)\right]. \quad (5.39) \end{aligned}$$

Assim, usando as equações 5.34 e 5.39, podemos escrever a energia livre como:

$$\begin{aligned} F &= E_g + \sum_k (\tilde{n}_k^- \tilde{\omega}_k^- + \tilde{n}_k^+ \tilde{\omega}_k^+) + k_B T \sum_k \sum_{n^-, n^+} P_k \ln \left\{ \left(1 - \exp\left[-\beta(\tilde{\omega}_k^- - \mu)\right]\right) \times \right. \\ &\quad \times \left. \left(1 - \exp\left[-\beta(\tilde{\omega}_k^+ + \mu)\right]\right) \exp\left[-\beta n^-(\tilde{\omega}_k^- - \mu)\right] \exp\left[-\beta n^+(\tilde{\omega}_k^+ + \mu)\right] \right\} = \\ &= E_g + \sum_k (\tilde{n}_k^- \tilde{\omega}_k^- + \tilde{n}_k^+ \tilde{\omega}_k^+) + k_B T \sum_k \sum_{n^-, n^+} P_k [-\beta(\tilde{\omega}_k^- - \mu) - \beta(\tilde{\omega}_k^+ + \mu)] + \\ &\quad + k_B T \sum_k \sum_{n^-, n^+} \left\{ \left(1 - \exp\left[-\beta(\tilde{\omega}_k^- - \mu)\right]\right) \left(1 - \exp\left[-\beta(\tilde{\omega}_k^+ + \mu)\right]\right) \times \right. \\ &\quad \times \exp\left[-\beta n^-(\tilde{\omega}_k^- - \mu)\right] \exp\left[-\beta n^+(\tilde{\omega}_k^+ + \mu)\right] \ln \left[\left(1 - \exp\left[-\beta(\tilde{\omega}_k^- - \mu)\right]\right) \times \right. \\ &\quad \times \left. \left. \left(1 - \exp\left[-\beta(\tilde{\omega}_k^+ + \mu)\right]\right) \right] \right\}, \end{aligned}$$

então

$$F = E_g + \mu \sum_k (\tilde{n}_k^- + \tilde{n}_k^+) + k_B T \sum_k \ln \left\{ \left(1 - \exp \left[-\beta (\tilde{\omega}_k^- - \mu) \right] \right) \left(1 - \exp \left[-\beta (\tilde{\omega}_k^+ + \mu) \right] \right) \right\}.$$

Portanto, utilizando a equação 5.36, podemos escrever a expressão para a energia livre do sistema como

$$F = E_g + \mu(S - s)N - k_B T \sum_k \sum_{\sigma=\pm} \ln(1 + \tilde{n}_k^\sigma), \quad (5.40)$$

com

$$\tilde{n}_k^\pm = \frac{1}{\exp \left[\beta (\tilde{\omega}_k^\pm \pm \mu) \right] - 1} \quad (5.41)$$

onde μ é o multiplicador de lagrange (potencial químico) devido à condição 5.36.

Podemos encontrar uma expansão da energia livre em função da temperatura [13, 60] e com isso calcular o calor específico através da relação $C = -T \partial^2 F / \partial T^2$, obtendo

$$\frac{C}{Nk_B} = \frac{3}{4} \left(\frac{S - s}{sS} \right)^{1/2} \frac{\zeta(3/2)}{\sqrt{2\pi}} \tilde{t}^{1/2} + \mathcal{O}(1), \quad (5.42)$$

onde $\zeta(z)$ é a função zeta de Riemann e $\tilde{t} = k_B \tilde{T} / J = k_B T / J \gamma$ com $\gamma = 1 - \Gamma_1(S + s) / sS + \Gamma_2 / sS$. Vemos que ferromagnetos e ferrimagnetos se comportam de maneira similar em baixa temperatura [31, 57, 59, 60, 61].

5.1.2 Efeitos do Campo Magnético ($B > 0$)

Como discutido no capítulo 1, a cadeia de spins mistos ($1/2 - 5/2$) exibe dois platôs na curva de magnetização em função de B , em $T = 0$, figura 1.9. Estes platôs são limitados por dois pontos críticos quânticos ($B = B_{c,AF}$ e $B_{c,FP}$), os quais repercutem [45, 47, 48, 49] nas propriedades físicas do sistema em baixa temperatura. Um comportamento similar é observado para cadeia $(1/2 - 1)$. Nesta seção vamos discutir

a metodologia analítica que utilizamos para obter as propriedades térmicas da cadeia $1/2 - 1$ para $B > 0$.

Campo crítico antiferromagnético ($B_{c,AF}$)

Como discutido, devido à ordem ferrimagnética do estado fundamental, há dois tipos de excitações elementares, ver figura 5.3: mágnons ferromagnéticos (F), que reduzem o spin total do estado fundamental em uma unidade, e mágnons antiferromagnéticos (AF), que aumentam o spin total do estado fundamental em uma unidade. As relações de dispersão dos mágnons, calculadas através da teoria de ondas de spins interagentes são, equação 5.29:

$$\begin{aligned}\tilde{\omega}_k^- &= J\sqrt{1/4 + 2\sin^2(k/2)} - J/2 - 3J\Gamma_1 \frac{\sin^2(k/2)}{\sqrt{1/4 + 2\sin^2(k/2)}} + \\ &+ 2J\Gamma_2 \left[\sqrt{1/4 + 2\sin^2(k/2)} - 1/2 \right] + B;\end{aligned}\quad (5.43)$$

$$\begin{aligned}\tilde{\omega}_k^+ &= J\sqrt{1/4 + 2\sin^2(k/2)} + J/2 - 3J\Gamma_1 \frac{\sin^2(k/2)}{\sqrt{1/4 + 2\sin^2(k/2)}} + \\ &+ 2J\Gamma_2 \left[\sqrt{1/4 + 2\sin^2(k/2)} + 1/2 \right] - B,\end{aligned}\quad (5.44)$$

para $s = 1/2$ e $S = 1$.

Notamos que para $B = 0$ a excitação F ($\tilde{\omega}_k^-$) é sem gap (que é esperado da quebra espontânea da simetria de rotação do estado fundamental) e exibe uma relação de dispersão quadrática para longos comprimentos de onda:

$$\begin{aligned}
\tilde{\omega}_k^-(k \rightarrow 0) &\approx J\sqrt{1/4 + k^2/2} - J/2 - \frac{3J}{4}\Gamma_1 \frac{k^2}{\sqrt{1/4 + k^2/2}} + 2J\Gamma_2 \left[\sqrt{1/4 + k^2/2} - 1/2 \right] \approx \\
&\approx \frac{J}{2}(1 + 2k^2)^{1/2} - \frac{J}{2} - \frac{3J\Gamma_1}{2}(1 + 2k^2)^{-1/2}k^2 + 2J\Gamma_2 \left[\frac{1}{2}(1 + 2k^2)^{1/2} - 1/2 \right] \Rightarrow \\
&\Rightarrow \tilde{\omega}_k^-(k \rightarrow 0) \approx \frac{Jk^2}{2} - \frac{3J\Gamma_1 k^2}{2} + J\Gamma_2 k^2,
\end{aligned}$$

ou seja,

$$\tilde{\omega}_k^-(k \rightarrow 0) \approx \frac{J\gamma}{2}k^2. \quad (5.45)$$

Por outro lado, de maneira análoga, notamos que o modo AF ($\tilde{\omega}_k^+$) exhibe um gap Δ_{sS} :

$$\tilde{\omega}_k^+(k \rightarrow 0) \approx \frac{J\gamma}{2}k^2 + \Delta_{sS}, \quad (5.46)$$

onde $\Delta_{sS} = 1.676J$ e $\gamma = 1 - 3\Gamma_1 + 2\Gamma_2$ para $s = 1/2$ e $S = 1$.

Na presença de um campo magnético B o modo F (equação 5.45) adquire um gap $\Delta_F(B) = B$. Além disso, com o aumento de B , o gap do modo AF (equação 5.46) decresce linearmente com B , $\Delta_{AF}(B) = \Delta_{sS} - B$. Para $B = B_m = \Delta_{sS}/2 = 0.838J$ seu gap é igual ao do modo ferromagnético. Em $B = \Delta_{sS} \equiv B_{c,AF}$ o gap AF se anula. No regime de alta diluição ($B \approx B_{c,AF}$), uma baixa densidade de mágnons é encontrada no sistema [27, 33] e, neste regime, a distribuição térmica efetiva é aquela de um gás de férmions livres ou bósons de núcleo duro (HCB, do inglês Hard-Core Bosons) [11, 20, 30, 32, 55]. Neste limite, os mágnons ocuparão estados de partículas individuais com $k \rightarrow 0$ e a relação de dispersão é dada por:

$$\omega_{AF}^+ = J\frac{\gamma}{2}k^2 - \mu, \quad k \rightarrow 0, \quad (5.47)$$

onde $\mu = B - \Delta_{sS} = B - B_{c,AF}$, com a densidade de mágnons antiferromagnéticos

dada por

$$\tilde{n}_k^+ = \frac{1}{\exp \left[\beta (\varepsilon_k^{AF} - \mu) \right] + 1} \quad (5.48)$$

onde $\varepsilon_k^{AF} = \tilde{\omega}_k^+ + B - B_{c,AF}$ e $\mu(T \rightarrow 0) = B - B_{c,AF}$.

Desta forma, iremos calcular a magnetização do sistema na vizinhança do campo $B_{c,AF}$ utilizando a expressão

$$m = 1/2 - \frac{1}{N} \sum_k \sum_{\sigma=\pm} \sigma \tilde{n}_k^{-\sigma}, \quad (5.49)$$

com $\tilde{n}_k^-$ dado pela equação 5.41, distribuição de Bose com o potencial químico definido pela restrição de Takahashi; e $\tilde{n}_k^+$ sendo dada pela expressão 5.48.

Campo crítico de saturação ($B_{c,FP}$)

Como ilustrado na figura 1.9, para uma cadeia $(1/2 - 5/2)$, quando o campo magnético alcança o valor de saturação $B = B_{c,FP}$ o sistema se torna totalmente polarizado (FP, do inglês Fully Polarized) e apresenta excitações de baixa energia ferromagnéticas. Os modos de ondas de spin do estado FP, ambos abaixando o spin do estado fundamental em uma unidade, podem ser obtidos em analogia à seção 5.1, entretanto partindo de um estado ordenado distinto, a saber: todos os spins pra cima. Assim, na presença de um campo magnético $B > B_{c,FP}$, a relação de dispersão do modo de mais baixa energia pode ser escrita [53, 61]

$$\omega_k^{FP} = -J(S + s) - J\sqrt{(S - s)^2 + 4sS \cos^2 k/2} + B. \quad (5.50)$$

No caso em que $S = 1$ e $s = 1/2$, o gap deste modo é dado por: $\Delta_{FP}(B) = \omega^{FP}(k = 0) = -3J + B$. Este gap se anula no ponto $B = B_{c,FP} = 3J$, que é o valor do

campo crítico de saturação. Ou seja, para o campo crítico $B = B_{c,FP}$ o sistema sofre uma transição de fase quântica. No limite de forte diluição, ou seja, para $B \approx B_{c,FP}$ há uma baixa densidade de mágnons condensados [27, 33], logo de maneira similar ao caso do campo crítico $B_{c,AF}$, a estatística que melhor descreve a distribuição de mágnons no sistema é estatística de Fermi [27], ou seja, a densidade de mágnons pode ser escrita como

$$n_k^{FP} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k^{FP} - \mu)} + 1}, \quad (5.51)$$

onde, em analogia ao caso do campo crítico $B_{c,AF}$, temos: $\mu(T \rightarrow 0) = B_{c,FP} - B$ e $\varepsilon_k^{FP} = \omega_k^{FP} + B_{c,FP} - B$, com o campo magnético atuando como um potencial químico efetivo para as partículas. Desta forma, iremos calcular magnetização do sistema na vizinhança do campo $B_{c,FP}$ utilizando a expressão

$$m = 3/2 - \frac{1}{N} \sum_k n_k^{FP}, \quad (5.52)$$

para $(s, S) = (1/2, 1)$, com n_k^{FP} dado pela equação 5.51.

Com isso, podemos calcular o comportamento da curva de magnetização próximo aos extremos dos platôs da curva de magnetização [1, 2], como mostraremos no capítulo 6.

Capítulo 6

Diagrama de Fases $T - B$

Neste capítulo vamos comparar e analisar os resultados numéricos calculados com o FTLM (capítulo 4), e aproximação de ondas de spins interagentes (ISW, capítulo 5) para a cadeia linear de spins mistos $1/2 - 1$. Vamos estudar em detalhe o comportamento da curva de magnetização em função do campo magnético, os platôs de magnetização e a criticalidade quântica do sistema. Discutiremos os efeitos da temperatura nas propriedades magnéticas da cadeia e finalmente esboçar o diagrama de fases $T - B$ do sistema.

Na figura 6.1 apresentamos a curva de magnetização em função do campo magnético B em $T = 0$, calculada através do método de Lanczos de Diagonalização Exata para $S = 1$ e $s = 1/2$. O gap do modo antiferromagnético é responsável por um platô (onde as correlações são de curto alcance) na curva de magnetização no limite termodinâmico: a magnetização por célula unitária, m , começa a mudar em relação ao valor do estado fundamental, $m = 1/2$, para campos maiores que $B = B_{c,AF} = 1.759$ (que é o valor exato para o gap, página 60); por outro lado, a magnetização de saturação é atingida para o campo $B = B_{c,FP} = 3.000$. Salientamos que, na figura

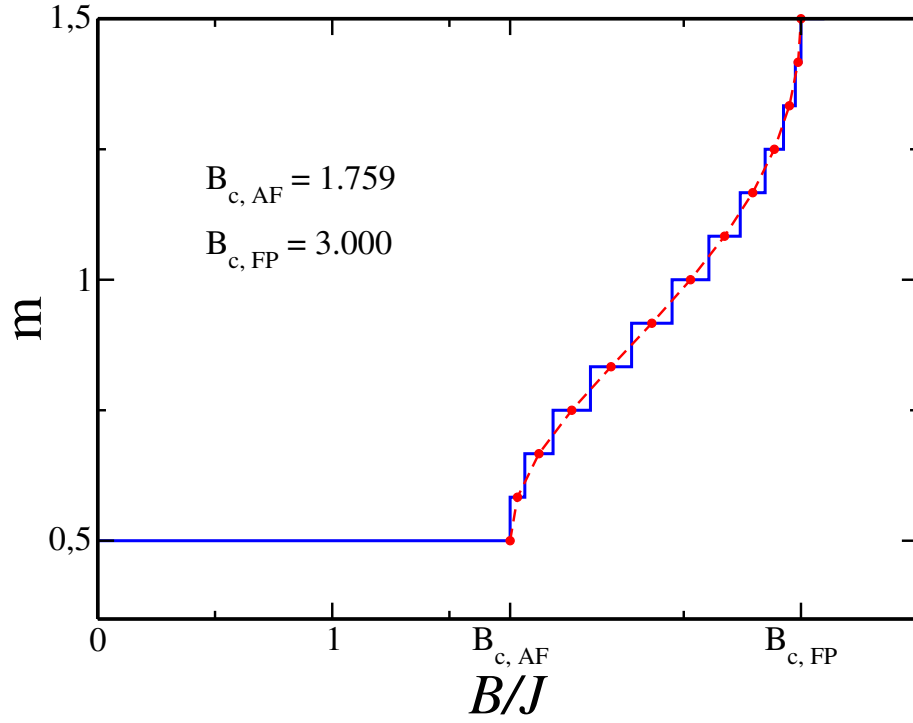


Figura 6.1: Magnetização por célula unitária m em função do campo magnético B para um sistema com $L = 24$ sítios, através do método de Lanczos. Os pontos representados por $(\bullet)$ são os pontos esperados para a curva no limite termodinâmico.

6.1, os degraus na curva de magnetização entre os platôs $m = 1/2$ e $m = 3/2$ são um reflexo do tamanho finito do sistema e as suas larguras tendem a zero no limite termodinâmico, ao contrário do que ocorre com os platôs em $1/2$ e em $3/2$. Uma estimativa para o limite termodinâmico desta curva é obtida através do critério de Bonner e Fisher [5]: a curva neste limite é aproximada pelos pontos médios dos degraus no sistema finito, a menos dos degraus esperados para o limite termodinâmico (no nosso caso, preservamos os degraus em $1/2$ e $3/2$). A figura 6.1 também indica esta estimativa. Observamos que em $B = 0$ há ordem magnética de longo alcance; a simetria de rotação do sistema é espontaneamente quebrada. É possível mostrar que platôs [35] podem ser encontrados, quando não há quebra espontânea da simetria de

translação do estado fundamental, se o critério $S - m = \text{inteiro}$ for satisfeito, onde S é o valor máximo do spin de uma célula unitária. Desta forma, para o nosso sistema os platôs são esperados em $1/2$ e $3/2$, como indicado pelo cálculo numérico.

Na figura 6.2 exibimos a magnetização em função de B para $T = 0$ e $T = 0.1$, calculadas através do FTLM [$N = 20$, $M = 50$ e $N_{amostras} = 50000$]. Observando a

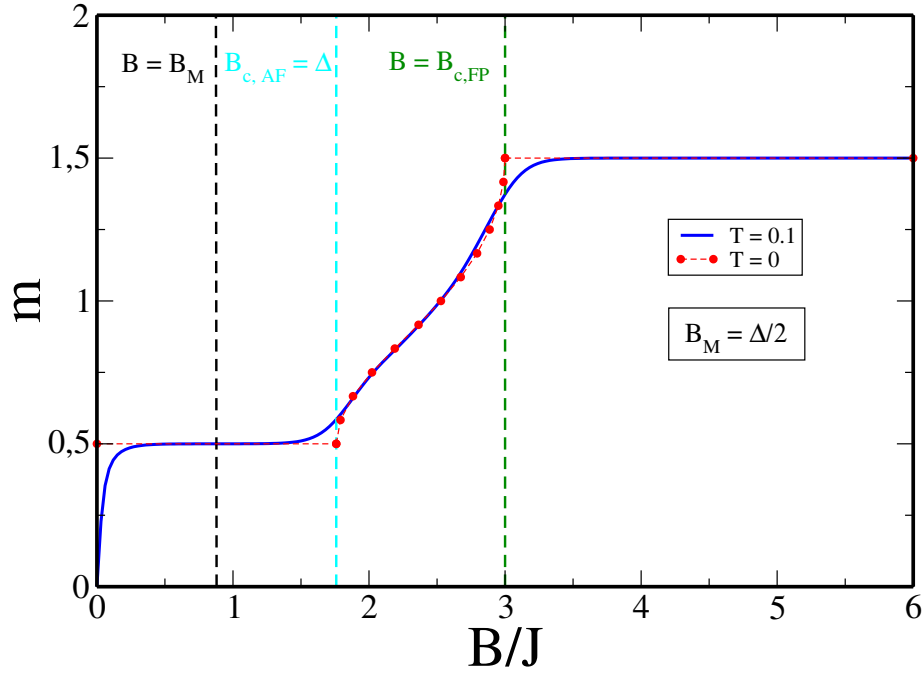


Figura 6.2: Curvas de magnetização em $T = 0.1$ pelo FTLM em comparação com a curva em $T = 0$ pelo critério de Bonner e Fisher, para $S = 1$ e $s = 1/2$.

figura, percebemos que com $T \neq 0 \ll 1$, a curva de magnetização apresenta os mesmos platôs que em $T = 0$, porém devido ao efeito de temperatura, não há ordenamento magnético de longo alcance para $B = 0$. Em relação às excitações da fase FERRI, aumentando o campo magnético B o gap do modo antiferromagnético (AF) decresce linearmente com B , enquanto que o gap do modo ferromagnético (F) cresce, devido ao termo de Zeeman, ver página 67. Para $T > 0$ e $0 < B < \Delta/2 \equiv B_M$, o contato com o banho térmico faz com que os mágnons ferromagnéticos (carregando spin -1)

sejam populados (excitados) e a magnetização seja menor que a magnetização em $T = 0$ ($m = 1/2$). Em $B = B_M$ há um cruzamento dos modos de onda de spin. De maneira análoga, para $B \geq B_M$ os mágnons antiferromagnéticos (carregando spin $+1$) são excitados e a magnetização é maior ($m > 1/2$) que a magnetização em $T = 0$ para o mesmo valor de B . Em $B_{c,AF} = \Delta$ e $T = 0$, o gap do modo antiferromagnético se anula e o sistema sofre uma transição de fase quântica (com a condensação de mágnons AF) para uma fase Líquido de Luttinger (LL) sem gap [18, 44], na qual as correlações transversais são de quase-longo-alcance exibindo um comportamento tipo lei de potência. Para $T > 0$ a fase LL sofre um crossover para um comportamento de temperatura mais alta. A fase LL termina no segundo ponto crítico quântico $B = B_{c,FP}$. Para $B > B_{c,FP}$ o sistema volta a exibir um gap e correlações de curto alcance e se torna totalmente polarizado (FP) em $T = 0$, exibindo excitações de baixa energia ferromagnéticas. Para $T > 0$ e $B > B_{c,FP}$ esses modos (mágnons de spin -1) são populados e a magnetização será menor que $m = 3/2$, como mostrado na figura 6.2.

Os limites dos platôs são pontos críticos que separam fases incompressíveis e com gap de fases compressíveis sem gap [11]. Para cadeias de spin 1, Affleck [1, 2] notou que esse tipo de transição é semelhante à que ocorre em sistemas de bósons interagentes, o que foi estendido posteriormente para sistemas escada de spin $1/2$ [19]. Nessa analogia tratamos o campo magnético como o potencial químico $\mu \leftrightarrow B$. É possível descrever [9, 30], em $T = 0$, a transição de fase que ocorre próxima aos pontos críticos quânticos ($B_{c,AF}$ e $B_{c,FP}$) em termos de uma condensação da componente da magnetização ao longo da direção do campo magnético aplicado, ainda que, *stricto sensu*, não ocorra condensação de Bose-Einstein (BEC, do inglês Bose-Einstein Condensation) [14] em

sistemas unidimensionais. No sistema de interesse os objetos que se condensam são os mágnons, as quase-partículas de spin $S^z = \pm 1$. A ideia de condensação de mágnons é aplicada próximo a platôs de magnetização “inteiros” [35], ou seja, o spin por célula unitária difere do seu valor máximo por um inteiro.

Na figura 6.3 apresentamos resultados para a magnetização do sistema em função do campo magnético obtidos pela teoria ISW e pela aproximação HCB (ver seção 5.1.2), fazendo uma comparação com o resultado obtido através do FTLM. Vemos

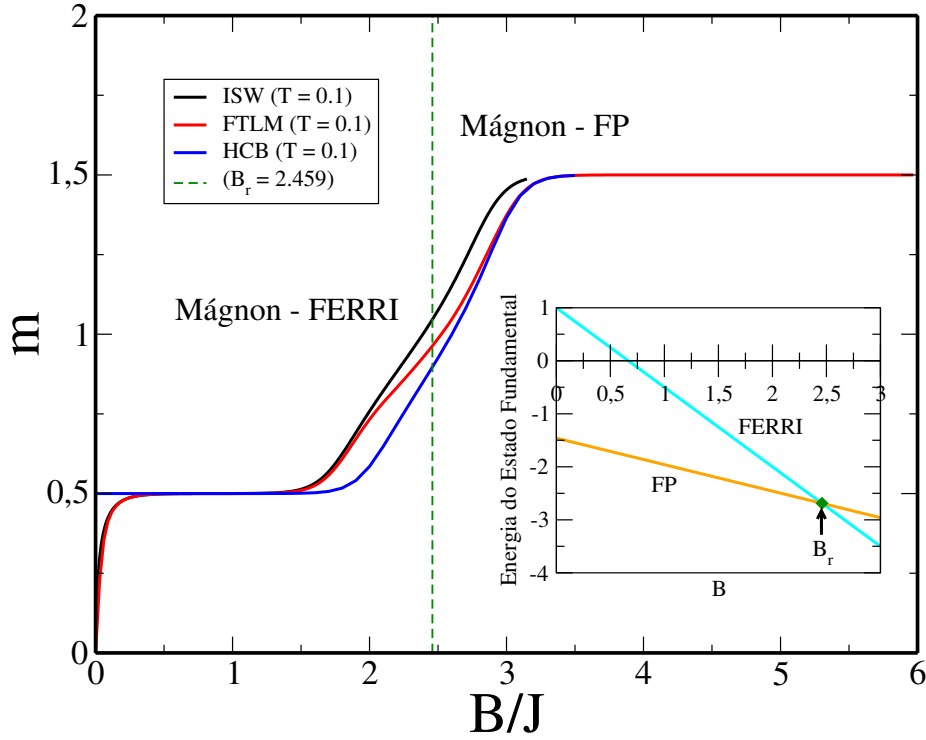


Figura 6.3: Curvas de magnetização obtidas através do FTLM e das teorias ISW e HCB com $S = 1$, $s = 1/2$ e $T = 0.1$; o losango indica o ponto $B = B_r$.

que para valores do campo magnético até a vizinhança do ponto crítico $B_{c,AF}$ a teoria ISW descreve bem o comportamento da magnetização, entretanto próximo ao valor do campo B_r , indicado na figura 6.3, ela falha. O valor do potencial químico $\mu = \mu_0$ que garante a restrição de magnetização nula de Takahashi é diferente para cada valor

de T , figura 6.4. O valor de μ_0 é obtido da equação 5.49 a campo nulo, para cada T , e

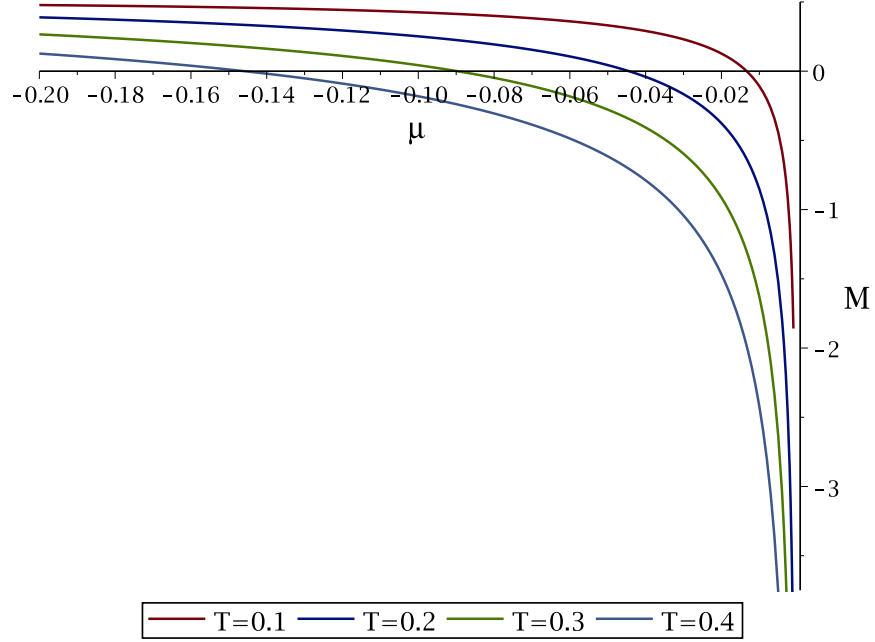


Figura 6.4: Magnetização m em função do potencial químico μ para baixas temperaturas.

utilizado para obter a magnetização em função do campo magnético. Fixamos o valor do potencial químico, para seu valor a campo nulo, a fim de evitar a condensação dos mágnons e com isso evitar a divergência na magnetização em $B = 0$; para B finito o potencial químico μ_0 é corrigido por B , que também faz o papel de um potencial químico.

As teorias ISW e HCB descrevem relativamente bem o comportamento em baixa temperatura da magnetização próximos aos pontos críticos $B_{c,AF}$ e $B_{c,FP}$. Entretanto, quando nos afastamos destes valores do campo magnético as teorias apresentam uma discrepância visível na figura 6.3. Indicamos na figura 6.3 o valor $B = B_r$ do campo magnético em que a energia do vácuo FERRI é mais estável do que o vácuo FP, e vice-versa, uma vez que estamos comparando os dois vácuos. Na figura 6.3 está indicada

uma linha tracejada que separa razoavelmente bem as descrições das teorias ISW ($B < B_r$) e HCB ($B > B_r$), onde o ponto $B = B_r$ é o valor do campo magnético em que as energias do estado fundamental do estado ferrimagnético (FERRI) e totalmente polarizado (FP) são iguais, em temperatura nula.

Na figura 6.5, apresentamos os resultados obtidos para (m) versus B , calculado via FTLT. Notamos que a magnetização é nula em campo nulo, sendo assim, o sistema está em um estado térmico paramagnético. Aumentando o campo magnético

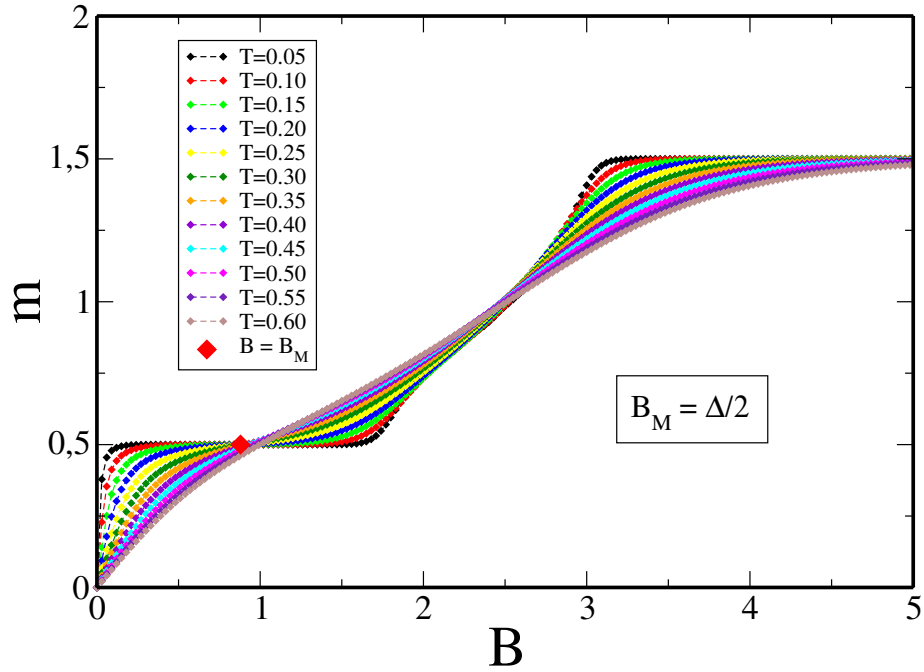


Figura 6.5: Curva da magnetização em função do campo magnético para $T \neq 0$; B_m está indicado pelo losango.

no regime de baixas temperaturas, o platô é exponencialmente atingido e a magnetização exibe um ponto de inflexão em $B = B_M$ para $T \lesssim 0.5$ que sinaliza a mudança de excitações de baixa energia ferromagnéticas ($B \leq B_M$) para mágnons antiferromagnéticos ($B \geq B_M$): os mágnons ferromagnéticos (antiferromagnéticos) são exponencialmente ativados e m é menor (maior) que a magnetização do platô.

Além disso, a forma singular da magnetização perto dos pontos críticos, o que implica $\chi \rightarrow \infty$, é termicamente suavizada e as singularidades da suscetibilidade evoluem para máximos locais, figura 6.6, e indicam as linhas de crossover. Na figura 6.7 mostramos

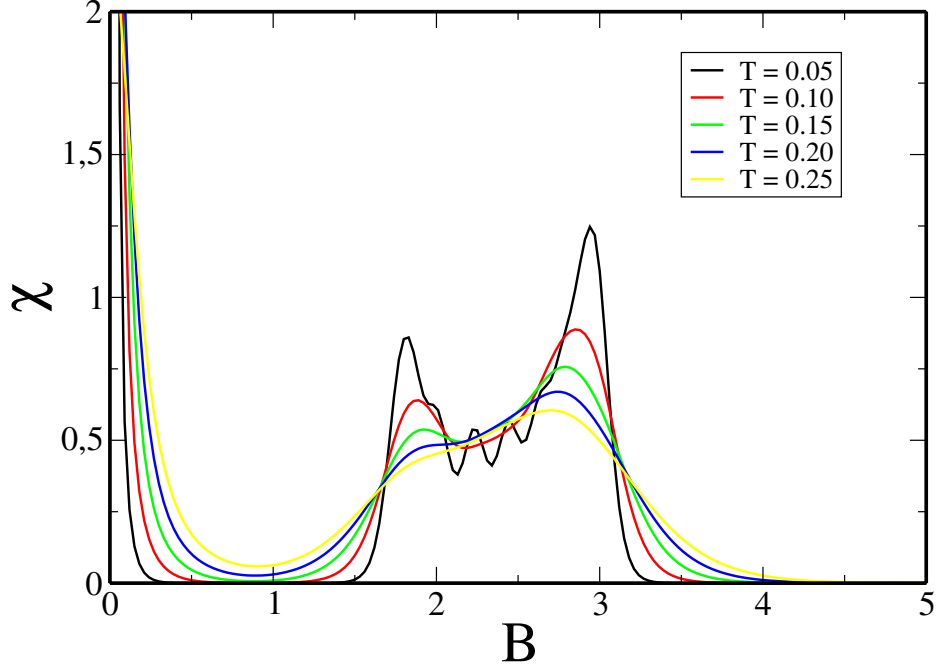


Figura 6.6: Curva da suscetibilidade em função do campo magnético para $T \neq 0$.

o excelente acordo entre os resultados do FTLM e aqueles obtidos pelo modelo efetivo que discutimos na seção 5.1.2; sendo assim, podemos utilizar os extremos desta curva a fim de estimar as linhas que limitam a fase Líquido de Luttinger analiticamente.

Na figura 6.8 apresentamos um diagrama de fases $T - B$ esquemático obtido através de resultados analíticos e numéricos; fazemos uma comparação entre a proposta analítica e o FTLM. Indicamos nesse diagrama todas as fases induzidas pelo campo magnético e suas respectivas linhas de crossover, os pontos críticos e as linhas de crossover, além das regiões de criticalidade quântica (RCQ) [7, 23, 27] do sistema. As linhas que abrangem a região do LL, limitadas em $T = 0$ por $B = B_{c,AF}$

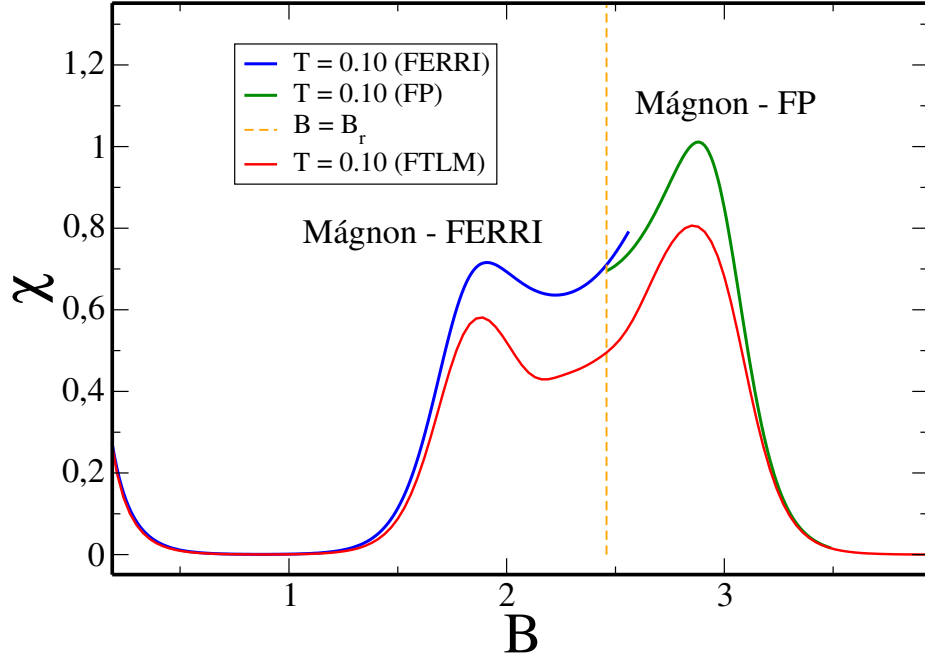


Figura 6.7: Curvas da suscetibilidade em função do campo magnético para $T = 0.1$; comparação entre o FTLM e o método analítico.

e $B = B_{c,FP}$, também podem ser obtidas dos extremos locais de m versus T para um dado B [27], figura 6.9. Mostramos na figura 6.10 uma boa concordância entre a proposta analítica e o FTLM. Além disso, com $B \rightarrow B_{c,AF}$ e $B \rightarrow B_{c,FP}$ as linhas de crossover seguem a função universal $a|B - B_{c,AF}|$ e $a|B - B_{c,FP}|$, respectivamente, com $a = 0.76238$ [27], que são as linhas de crossover da fase LL para fases de alta temperatura, não universais. Nossos resultados confirmam este comportamento assintótico para os dois pontos críticos quânticos. Também é possível estimar [7] as linhas de crossover relacionadas com os dois platôs mostrados na figura 6.5: assintoticamente dadas por $T \approx |B - B_{c,AF}|$ e $T \approx |B - B_{c,FP}|$.

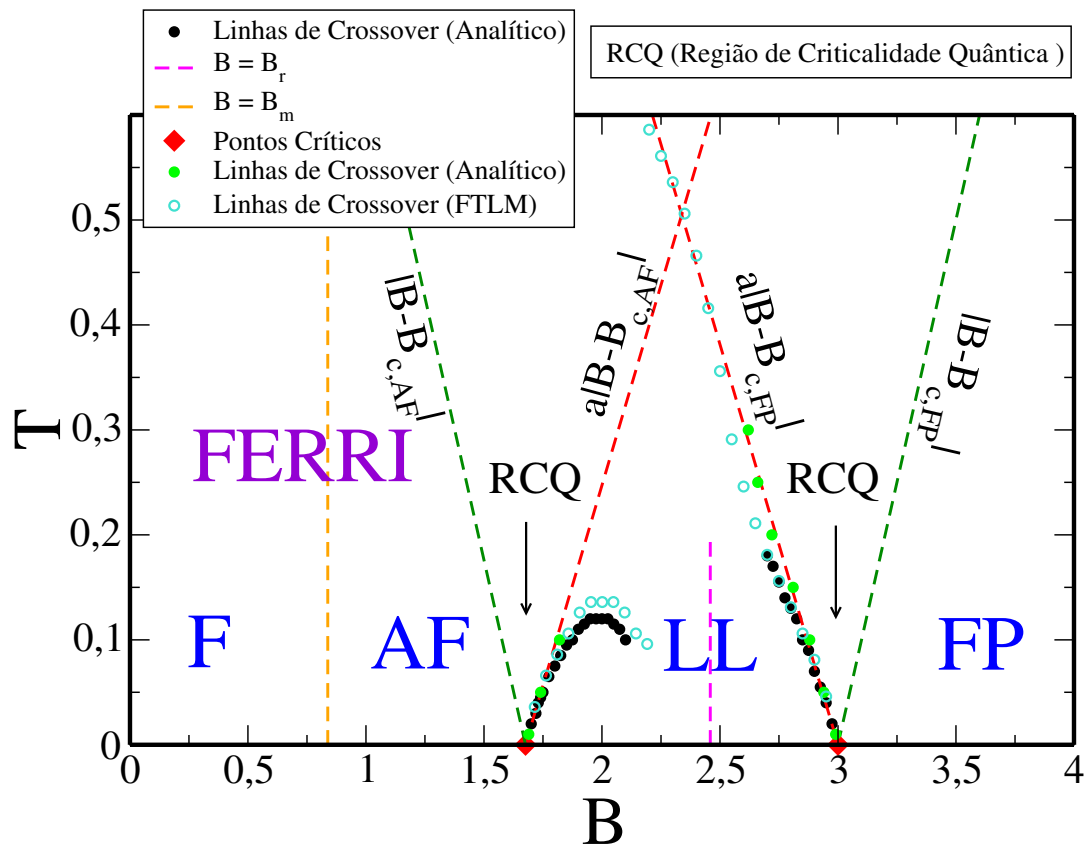


Figura 6.8: Diagrama de Fases $T - B$ esquemático; os losangos indicam os pontos críticos do sistema $B_{c,AF}$ e $B_{c,FP}$.

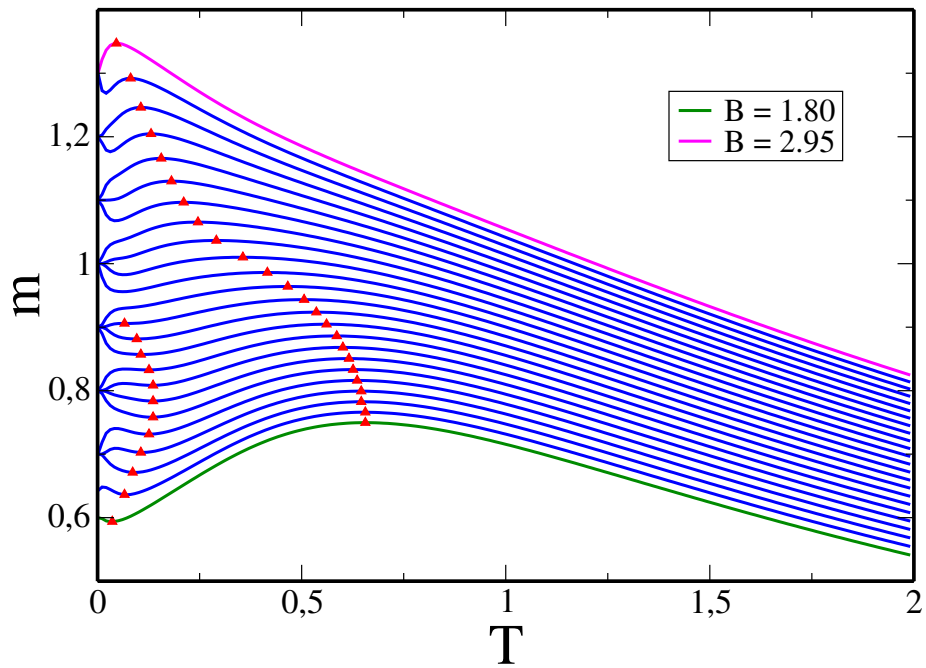


Figura 6.9: Magnetização em função da temperatura para $B = [1.80 - 2.95]$ obtida através do FTLM.

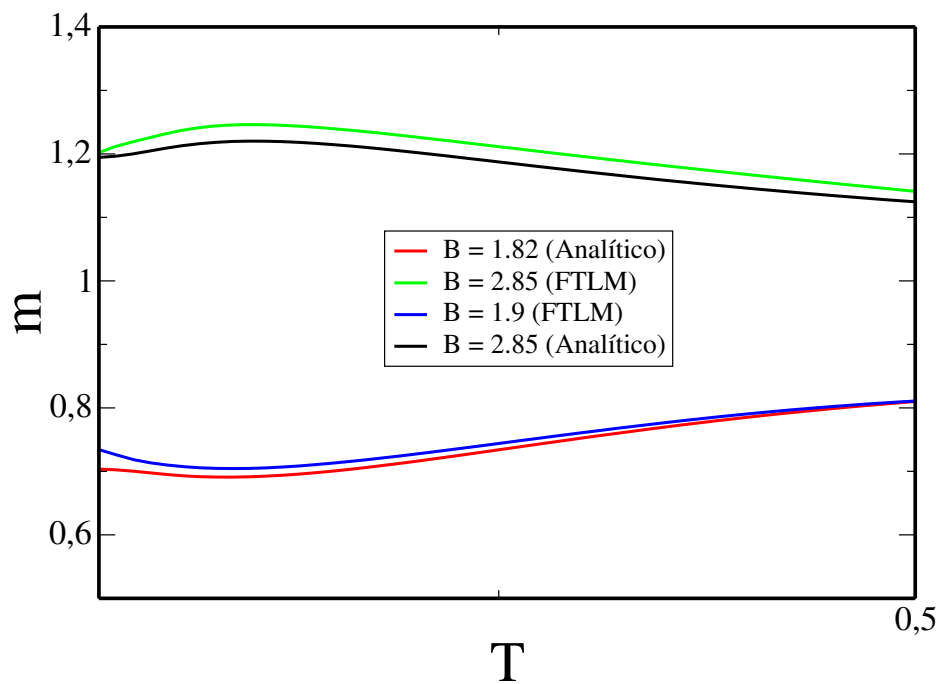


Figura 6.10: Comparação das curvas de magnetização em função da temperatura para um dado B obtidas através do FTLM e analiticamente.

Capítulo 7

Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho estudamos o estado fundamental, primeiras excitações magnéticas e transições de fase quânticas do modelo de Heisenberg com acoplamento de *superexchange* antiferromagnético na cadeia quase-unidimensional de spins mistos $1/2 - 1$, através de métodos numéricos (Lanczos e FTLM) e analíticos (Ondas de Spin não interagente e interagente), além de discutirmos e compararmos com dados numéricos um modelo efetivo proposto para estudar as propriedades físicas da cadeia de interesse.

O FTLM se mostrou bastante confiável, exceto em baixíssimas temperaturas onde a sua precisão é afetada por efeito de tamanho finito do sistema. A proposta analítica discutida descreve relativamente bem o comportamento em baixa temperatura das propriedades magnéticas da cadeia de interesse próximas aos pontos críticos quânticos do sistema. Entretanto, se afastando desses pontos críticos as teorias apresentam uma discrepância relevante. Esboçamos o diagrama de fases do sistema, as regiões de criticalidade quântica e as transições de fase induzidas pelo campo magnético. Em particular, para a cadeia de interesse identificamos os pontos críticos quânticos e as

linhas de crossover que limitam a fase Líquido de Luttinger.

Temos como perspectivas enriquecer o diagrama de fases do sistema acrescentando dados do calor específico obtidos através do FTLM e do modelo efetivo proposto.

Referências

- [1] I. Affleck. *Phys. Rev. B*, 41:6697–6702, 1990.
- [2] I. Affleck. *Phys. Rev. B*, 43:3215–3222, 1991.
- [3] P. Anderson. *Physical Review*, 86:694–701, 1952.
- [4] A. Auerbach. *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. Springer-Verlag, 1994.
- [5] J. C. Bonner and M. E. Fisher. *Phys. Rev.*, 135:640–658, 1964.
- [6] S. Brehmer, H. J. Mikeska, and S. Yamamoto. *J. Phys.: Condens. Matter*, 9:3921–3930, 1997.
- [7] R. Chitra and T. Giamarchi. *Phys. Rev. B*, 55:5816–5826, 1997.
- [8] R. Coldea, S. Hayden, G. Aeppli, T. Perring, C. Frost, T. Mason, S.-W. Cheong, and Z. Fisk. *Phys. Rev. Lett.*, 86:5377–5380, 2001.
- [9] R. Coldea, D. A. Tennant, K. Habicht, P. Smeibidl, C. Wolters, and Z. Tylczynski. *Phys. Rev. Lett.*, 88:137203–137206, 2002.
- [10] M. D. Coutinho-Filho, R. R. Montenegro-Filho, E. P. Raposo, C. Vitoriano, and M. H. Oliveira. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, 19:232–244, 2008.

- [11] F. Crépin, N. Laflorencie, G. Roux, and P. Simon. *Phys. Rev. B*, 84:054517, 2011.
- [12] E. Dagotto. *Rev. Mod. Phys.*, 66:763–840, 1994.
- [13] F. B. de Brito. Ondas de spin em cadeias AB_2 ferrimagnéticas: Flutuações quânticas e termodinâmica. Master’s thesis, Departamento de Física DF-UFPE.
- [14] L. P. e S. Stringari. *Bose-Einstein Condensation*. Clarendon Press, 2003.
- [15] R. R. M. Filho. *Correlação Eletrônica e Magnetismo em Sistemas Quase-Unidimensionais*. PhD thesis, DF-UFPE, 2006.
- [16] E. Fradkin. *Field Theories of Condensed Matter Physics*. Field Theories of Condensed Matter Physics. Cambridge University Press, 2013.
- [17] M. Getzlaff. *Fundamentals of Magnetism*. Springer Berlin Heidelberg, 2007.
- [18] T. Giamarchi. *Quantum Physics in One Dimension*. International Series of Monographs on Physics. Clarendon Press, 2003.
- [19] T. Giamarchi and A. M. Tsvelik. *Phys. Rev. B*, 59:11398–11407, 1999.
- [20] H. Guo. *Phys. Rev. A*, 86:055604, 2012.
- [21] Y. Hosokoshi, K. Katoh, Y. Nakazawa, H. Nakano, and K. Inoue. *Journal of the American Chemical Society*, 123:7921–7922, 2001.
- [22] N. B. Ivanov. *J. Phys. Condens. Matter*, 12:435–447, 2009.
- [23] J. Jaklic and P. Prelovsek. *eprint arXiv:cond-mat/9803331*.
- [24] C. Kittel. *Quantum theory of solids*. Wiley, New York, 1963.

- [25] E. Lieb and D. Mattis. *Journal of Mathematical Physics*, 3:749–751, 1962.
- [26] A. M. S. Macêdo, M. C. dos Santos, M. D. Coutinho-Filho, and C. A. Macêdo. *Phys. Rev. Lett.*, 74:1851–1854, 1995.
- [27] Y. Maeda, C. Hotta, and M. Oshikawa. *Phys. Rev. Lett.*, 99:057205, 2007.
- [28] A. L. Malvezzi. *Brazilian Journal of Physics*, 33:55–72, 2003.
- [29] R. R. Montenegro-Filho and M. D. Coutinho-Filho. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 357:173–180, 2005.
- [30] R. R. Montenegro-Filho and M. D. Coutinho-Filho. *Phys. Rev. B*, 78:014418, 2008.
- [31] T. Nakanishi and S. Yamamoto. *Phys. Rev. B*, 65:214418, 2002.
- [32] Y. Nakano, K. Kasamatsu, and T. Matsui. *Phys. Rev. A*, 85:023622, 2012.
- [33] W. Nie, H. Katsura, and M. Oshikawa. *Phys. Rev. Lett.*, 111:100402, 2013.
- [34] I. Oliveira. *Física Moderna para iniciados, inter. e afic. vol 2*. Livraria da física.
- [35] M. Oshikawa, M. Yamanaka, and I. Affleck. *Phys. Rev. Lett.*, 78:1984–1987, 1997.
- [36] J. B. P. Prelovsek. *J. Phys.: Condensed Matter*, 2011.
- [37] S. K. Pati, S. Ramasesha, and D. Sen. *Phys. Rev. B*, 55:8894–8904, 1997.
- [38] E. P. Raposo and M. D. Coutinho-Filho. *Modern Physics Letters B*, 09:817–822, 1995.

- [39] E. P. Raposo and M. D. Coutinho-Filho. *Phys. Rev. Lett.*, 78:4853–4856, 1997.
- [40] E. P. Raposo and M. D. Coutinho-Filho. *Phys. Rev. B*, 59:14384–14405, 1999.
- [41] S. Rezende. *A dança dos Spins*. Ciência hoje, vol. 14, no. 80, pág. 28, 1992.
- [42] S. Rezende. *Materiais e dispositivos eletrônicos*. Ed. Universidade Federal de Pernambuco, 1996.
- [43] J. Ribamar. Um modelo molecular para o magnetismo em ferro, cobalto e níquel. Master’s thesis, Universidade Federal de Pernambuco, 2003.
- [44] C. Rüegg, K. Kiefer, B. Thielemann, D. F. McMorro, V. Zapf, B. Normand, M. B. Zvonarev, P. Bouillot, C. Kollath, T. Giamarchi, S. Capponi, D. Poilblanc, D. Biner, and K. W. Krämer. *Phys. Rev. Lett.*, 101:247202, 2008.
- [45] S. Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 2001.
- [46] S. Sachdev. *Reviews of Modern Physics*, 75:913–932, 2003.
- [47] S. Sachdev. *Quantum Phases and Phase Transitions of Mott Insulators*. Lecture Notes in Physics, Berlin Springer Verlag, 2004.
- [48] S. Sachdev. *Nature Physics*, 4:173–185, 2008.
- [49] S. Sachdev and B. Keimer. *Physics Today*, 64:020000, 2011.
- [50] J. Seiden. *J. Physique Lett.*, 44:947–952, 1983.
- [51] M. Takahashi. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 87:233–246, 1986.
- [52] M. Takahashi. *Phys. Rev. B*, 40:2494–2501, 1989.

- [53] A. S. F. Tenório, R. R. Montenegro-Filho, and M. D. Coutinho-Filho. *J. Phys. Condens. Matter*, 23:506003, 2011.
- [54] M. Verdaguer, A. Gleizes, J. P. Renard, and J. Seiden. *Phys. Rev. B*, 29:5144–5155, 1984.
- [55] S. Wessel. *Phys. Rev. B*, 75:174301, 2007.
- [56] W. P. Wolf. *Rep. Prog. Phys.*, 24:212, 1961.
- [57] S. Yamamoto. *Phys. Rev. B*, 69:064426, 2004.
- [58] S. Yamamoto, S. Brehmer, and H.-J. Mikeska. *Phys. Rev. B*, 57:13610–13616, 1998.
- [59] S. Yamamoto and T. Fukui. *Phys. Rev. B*, 57:14008, 1998.
- [60] S. Yamamoto, T. Fukui, K. Maisinger, and U. Schollwöck. *J. Phys.: Condens. Matter*, 10:11033, 1998.
- [61] S. Yamamoto and H. Hori. *Phys. Rev. B*, 72:054423, 2005.