



Universidade Federal de Pernambuco  
Centro de Ciências Exatas e da Natureza  
Programa de Pós-Graduação em Física

WELLINGTON MOREIRA DA SILVA

**TEORIA DE ONDAS DE SPIN PARA FERRIMAGNETOS ( $s, S$ )  
COM CAMPO MAGNÉTICO APLICADO**

Recife

2019

WELLINGTON MOREIRA DA SILVA

**TEORIA DE ONDAS DE SPIN PARA FERRIMAGNETOS ( $s, S$ )  
COM CAMPO MAGNÉTICO APLICADO**

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

Área de concentração: Física Teórica e Computacional - Elétrons Fortemente Correlacionados.

Orientador: Prof. Renê Rodrigues Montenegro Filho

Recife

2019

Catálogo na fonte  
Bibliotecária Arabelly Ascoli CRB4-2068

S586t Silva, Wellington Moreira da  
Teoria de ondas de spin para ferrimagnetos (s, S) com campo magnético aplicado / Wellington Moreira da Silva. – 2019.  
113 f.: fig.

Orientador: Renê Rodrigues Montenegro Filho  
Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco.  
CCEN. Física. Recife, 2019.  
Inclui referências.

1. Ferrimagnetos. 2. Ondas de spin. 3. Transições de fase quânticas. 4. Líquido de Luttinger. I. Montenegro Filho, Renê Rodrigues (orientador). II. Título.

530.1 CDD (22. ed.) UFPE-FQ 2019-42

**WELLINGTON MOREIRA DA SILVA**

**TEORIA DE ONDAS DE SPIN PARA FERRIMAGNETOS (s, S)  
COM CAMPO MAGNÉTICO APLICADO**

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

Aprovada em: 03/06/2019.

**BANCA EXAMINADORA**

---

Prof. Renê Rodrigues Montenegro Filho  
Orientador  
Universidade Federal de Pernambuco

---

Prof. Eduardo Padrón Hernández  
Examinador Interno  
Universidade Federal de Pernambuco

---

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

---

Prof. Fernando Jorge Sampaio Moraes  
Examinador Externo  
Universidade Federal Rural de Pernambuco

---

Prof. Marcelo Leite Lyra  
Examinador Externo  
Universidade Federal de Alagoas

# 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 esposa, Ananerity Alves, e ao meu filho, Willian Moreira, que sofreram muito com minhas ausências, entretanto, os poucos momentos juntos (muitos feriados e fins de semana no departamento comigo), a paciência, a perseverança e suas orações foram e são 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, a saber: João Wilson, Luana, Maria Gabriela e Otávio. Além dos irmãos por parte de pai que (infelizmente) não foram criados conosco, mas que os amo tanto quanto os outros: Rodolfo e Rorivan.

A todos os meus familiares pela enorme paciência nas minhas ausências e por toda torcida e confiança depositadas em mim.

Aos meus amigos, que muito me ajudaram, desde o início da 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 amigos do departamento e da vida: Alysson José, Antônio Lorena, Bruno Veríssimo, Cleyton Alves, Emerson Freitas, Felipe Octavio, James Richard, Fred Revoredo, Rafael MacGyver, Tony Monte, Wellington Pedro e Wemerson José.

Aos colegas do ciclo profissional do bacharelado em física: Crazy Paul, Fernando Benevides, Fillipe Cesar, Gabriel Dias, Jhonisson Cavalcanti, Pedro Henrique, Ricardo Batista e Yuri Barros. Até hoje esperamos o cronograma de mecânica estatística, rrsrsrs. Piada interna.

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

Aos colegas do LFTC que sempre me ajudaram quando precisei: Hugo Andrade, Leonardo Viana, Victor Manuel e Yoandris Vielza. Em especial Fábio Ribeiro, um verdadeiro amigo (amigo + irmão).

A todos os professores, funcionários e alunos do Colégio Luíza Cora (CLC colégio e curso) pelo tempo de excelente e agradável convivência e aprendizado. Em particular, à coordenadora Patrícia Neves, que sempre procurou fazer um horário que não atrapalhasse o doutorado. Além dos bons amigos que lá fiz: Acácio, Bruno, Carlos, Evandro, Marcos, Nivaldo e Rafael.

Aos professores, funcionários e alunos da Escola Estadual de Ensino Fundamental e Médio Professor Celestin Malzac, da Secretaria de Educação do Estado da Paraíba, cuja convivência me ajudou a crescer mais como pessoa e como profissional. Em especial, à direção, nas pessoas da diretora, Maria José Cavalcante, e da vice, Maria José Cândida, que nunca mediram esforços para me ajudar, fechando meus horários em apenas dois dias; aos professores Anderson e Jefferson, ambos de química, sempre dispostos a me ajudar, além das agradabilíssimas conversas; aos professores Anderson (filosofia), Ednaldo e Rubens que sempre faziam o máximo me ajudar nas montagens de horário.

Aos professores, técnicos e administrativos do Departamento de Física, que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho, em particular, cito os professores Antônio Cruz, Celso Melo, Clécio Clemente, Flávio Aguiar, Leonardo Cabral, Maurício Coutinho e Marcelo Leite, que foram muito importantes na minha vida acadêmica e científica.

Uma menção honrosa ao professor Eduardo Padrón, com quem não tive a oportunidade de cursar disciplina, mas é uma pessoa de personalidade ímpar e o melhor chefe do departamento de física em muitos anos.

E, claro, ao professor Renê, que por todos esses mais de 8 anos de convivência, com empenho, dedicação, paciência e várias discussões em física ajudou a superar muitas das minhas limitações, e isso foi imprescindível para minha formação e para este produto final. Além de um orientador acadêmico, um amigo.

Ao CNPq, à Capes e à Facepe, pelo apoio financeiro às instalações do departamento e a mim, desde o início da graduação.

## RESUMO

Transições de fase quânticas, especialmente em magnetos (e.g., ferromagnetos, antiferromagnetos, ferrimagnetos), são induzidas através da variação de um parâmetro externo (e.g., campo magnético  $B$ , pressão) em temperatura  $T$  nula. No caso da transição induzida por um campo magnético, os pontos críticos quânticos estão localizados nos extremos dos platôs de magnetização e separam fases com *gap* de fases sem *gap*. Em uma dimensão, linhas de crossover separam, em  $T$  finito, as regiões sem *gap*, onde as excitações de mais baixa energia formam um líquido de Luttinger, das regiões de platô (fase isolante). Cadeias ferrimagnéticas alternadas, em particular as cadeias  $(1/2, S)$ , têm magnetização espontânea em  $T = 0$  e uma excitação de baixa energia com *gap* em campo nulo. Em particular, possuem dois platôs de magnetização: o platô na magnetização de saturação, totalmente polarizado, e, devido ao *gap*, há um platô de magnetização ferrimagnético. Neste trabalho, discutimos teorias de ondas de spin (interagentes e não interagentes) desenvolvidas para estudar as propriedades em baixa temperatura dessas cadeias ferrimagnéticas sob um campo magnético aplicado: uma partindo do estado clássico ferrimagnético considerando as interações; e outra do estado clássico totalmente polarizado sem interação, ambas utilizando a restrição de Takahashi, comparando seus resultados com dados de simulações de Monte Carlo quântico. Uma vez que estamos interessados em descrever todo o diagrama de fases  $T$  vs.  $B$  do sistema, aprofundamos a teoria de ondas de spin a partir do vácuo totalmente polarizado. As linhas de crossover do diagrama de fases no regime de baixas temperaturas são obtidas, especialmente as linhas que separam as fases isolantes (com *gap*) da fase sem *gap*. Em particular, dos extremos locais das curvas de susceptibilidade e magnetização, identificamos o crossover entre um regime líquido de Luttinger formado pelas excitações do estado clássico ferrimagnético e outro construído das excitações do estado clássico totalmente polarizado. Estes dois regimes líquido de Luttinger são limitados por linhas de crossover que formam um domo assimétrico, como observado em outros magnetos em regimes quânticos sob um campo magnético aplicado.

**Palavras-chave:** Transições de fase quânticas. Ferrimagnetos. Ondas de Spin. Líquido de Luttinger. Linhas de crossover.

## ABSTRACT

Quantum phase transitions, in particular in magnets, are induced by varying an external parameter (e.g., magnetic field  $B$ , pressure) at zero temperature  $T$ . In the case of the transition induced by a magnetic field, the quantum critical points are located at the endpoints of the magnetization plateaus and separate gapped phases from gapless phases. In one dimension, crossover lines bound, at finite  $T$ , the gapless regions, where the lower energy excitations form a Luttinger liquid, from the plateau regions (insulating phases). Alternating ferrimagnetic chains, in particular the  $(1/2, S)$  chains, have a spontaneous magnetization at  $T = 0$  and one gapped lower energy excitation at zero field. In particular, they have two magnetization plateaus: the plateau at saturation magnetization, fully polarized plateau, and, due to the gap, there is another magnetization plateau at the ferrimagnetic magnetization. In this work, we discuss spin-wave theories (interacting and non-interacting) developed to study the low temperature properties of these ferrimagnetic chains under an applied magnetic field: one starting from the classical ferrimagnetic state considering the interactions; and other from the classical fully polarized state without interaction, both using the Takahashi constraint, comparing their results with quantum Monte Carlo data. Since we are interested in describing whole  $T$  vs.  $B$  low energy phase diagram of the system, we deepen the spin-wave theory from the fully polarized vacuum. The crossover lines of the phase diagram in the low temperature regime are obtained, specially the lines which separating the gapped phases of the gapless phases. In particular, from the local extreme points in the susceptibility and magnetization curves, we identified the crossover between a Luttinger liquid regime formed by the excitations from the classical ferrimagnetic state to another built from the excitations of the fully polarized classical state. These two Luttinger liquid regimes are bounded by an asymmetric dome-like crossover line, as observed in other magnets in quantum regime under an applied magnetic field.

**Keywords:** Quantum phase transitions. Ferrimagnets. Spin-Wave. Luttinger Liquids. Crossover lines.

# SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO . . . . .	10
1.1	COMPOSTOS FERRIMAGNÉTICOS . . . . .	20
2	TRANSIÇÕES DE FASE QUÂNTICAS . . . . .	27
2.1	ISOLANTES MAGNÉTICOS . . . . .	28
2.1.1	A Cadeia Quântica de Ising . . . . .	28
2.1.2	O Dímero Antiferromagnético . . . . .	31
2.2	CRITICALIDADE QUÂNTICA . . . . .	32
2.3	TEORIA DE ESCALA E EXPOENTES CRÍTICOS . . . . .	34
2.3.1	Expoentes Críticos . . . . .	35
2.3.2	Propriedades de escala em $T = 0$ . . . . .	36
2.3.3	Extensão para Temperaturas $T \neq 0$ . . . . .	40
2.3.4	A Linha Crítica e o Expoente $\Psi$ . . . . .	43
2.4	O LÍQUIDO DE LUTTINGER . . . . .	45
3	TEORIA DE ONDAS DE SPIN EM MAGNETOS DE HEISENBERG . . . . .	55
3.1	FERROMAGNETOS . . . . .	55
3.1.1	Hamiltoniano bosônico . . . . .	56
3.2	ANTIFERROMAGNETOS . . . . .	62
3.2.1	Hamiltoniano bosônico . . . . .	62
3.3	FERRIMAGNETOS ALTERNADOS ( $s, S$ ) . . . . .	65
3.3.1	Teoria de ondas de spin: vácuo ferrimagnético . . . . .	68
3.3.2	Teoria de ondas de spin: vácuo totalmente polarizado . . . . .	75
3.3.3	Termodinâmica . . . . .	78
3.3.4	Efeitos do Campo Magnético . . . . .	81
3.3.5	Magnetizações locais: teoria FSW-FRIV . . . . .	83
3.3.6	Magnetizações locais: teoria FSW-FPV . . . . .	84
4	DIAGRAMA DE FASES DA CADEIA FERRIMAGNÉTICA DE SPINS MISTOS ( $1/2, 1$ ) . . . . .	86
4.1	CURVAS DE MAGNETIZAÇÃO E SUSCEPTIBILIDADE: QMC . . . . .	86
4.2	TEORIA ISW-FRIV . . . . .	88
4.2.1	Termodinâmica . . . . .	91
4.3	TEORIA FSW-FPV . . . . .	93
4.4	COMPARAÇÃO ENTRE O MÉTODO QMC E AS DUAS APROXIMAÇÕES SWT . . . . .	97

4.5	<b>REGIME LÍQUIDO DE LUTTINGER</b> . . . . .	97
4.6	<b>DIAGRAMA DE FASES</b> . . . . .	103
5	<b>CONCLUSÕES</b> . . . . .	105
	<b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .	106

# 1 INTRODUÇÃO

A teoria das transições de fase quânticas [1, 2] fornece uma ferramenta poderosa para a compreensão de diversos sistemas em física da matéria condensada. Essas transições de fase são acessadas em  $T = 0$  pela variação de algum parâmetro externo,  $g$  (e.g., pressão, potencial químico, campo magnético), e apesar de ocorrerem estritamente em temperatura nula, podem influenciar no comportamento em baixas temperaturas do sistema. A presença do ponto crítico quântico (QCP) no diagrama de fases é a chave para compreender muitos sistemas em física da matéria condensada. Alguns exemplos incluem isolantes magnéticos [3–6], compostos de férmions pesados [7, 8], supercondutores de alta temperatura [9, 10] e gases bidimensionais de elétrons [11]. As propriedades físicas das flutuações quânticas, que podem destruir a ordem de longo alcance no zero absoluto, são muito diferentes das flutuações térmicas responsáveis pelas transições de fase tradicionais, ou clássicas. Em particular, os sistemas quânticos são descritos por funções de onda complexas, e a sua dinâmica de fase nas proximidades do QCP requer novas teorias que não possuem análogos às transições de fase clássicas.

A presença de flutuações clássicas e quânticas leva a um interessante diagrama de fases na vizinhança do ponto crítico quântico, como esquematizado na Fig. 1. A Fig. 1(a) descreve a situação em que a ordem existe apenas em  $T = 0$ , e.g., em magnetos<sup>§</sup> bidimensionais com simetria  $SU(2)$  onde a ordem em temperatura finita é proibida pelo teorema de Mermin-Wagner [12]. Neste caso, não haverá uma transição de fase propriamente dita em temperaturas finitas. Entretanto, o comportamento em  $T \neq 0$  é caracterizado por três regimes muito diferentes, separados por crossovers, dependendo do comportamento do parâmetro de ordem ser dominado por flutuações térmicas ou quânticas. Entre esses dois regimes está a chamada região de criticalidade quântica [1, 13, 14], onde esses dois tipos de flutuações são importantes. A física da região de criticalidade quântica é controlada pelas excitações térmicas do estado fundamental crítico quântico, cujas características principais são a presença de leis de potência, o comportamento de líquido de Fermi não trivial, etc. O comportamento universal apenas é observado na vizinhança do ponto crítico quântico, ou seja, quando o comprimento de correlação é muito maior que as escalas de comprimento microscópicas.

Na Fig. 1(b) é descrita a existência de ordem também para  $T \neq 0$ . Aqui uma transição de fase real é encontrada através da variação de  $g$  em baixas temperaturas; o ponto crítico quântico pode ser visto como o ponto final de uma linha de transições de

<sup>§</sup> No dicionário, você pode encontrar que um magneto é um material que tem a propriedade de atrair outros, e.g., o ferro. Aqui, nos referimos aos magnetos de Heisenberg, eg., ferrimagnetos, antiferromagnetos.

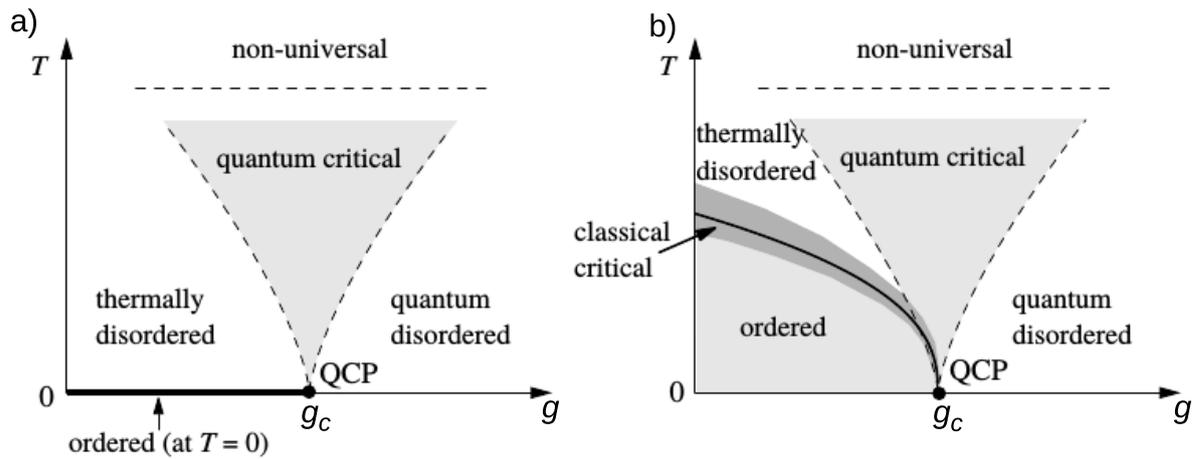


Figura 1 – Diagramas de fases esquemáticos  $T$  vs.  $g$  na vizinhança de um ponto crítico quântico (QCP), onde  $g$  é o parâmetro externo usado para induzir a transição de fase quântica. a) Há ordem apenas em temperatura nula. As linhas tracejadas indicam as fronteiras da região de criticalidade quântica onde as principais singularidades podem ser observadas; essas linhas de crossover são dadas por  $k_B T \propto |g - g_c|^{z\nu}$ , onde  $z\nu$  é um expoente crítico e seu valor é tipicamente universal. b) Pode existir ordem também em temperaturas finitas. A linha cheia marca a fronteira em  $T \neq 0$  entre as fases ordenada e desordenada. Fora desta linha o comportamento crítico é clássico. Figura retirada e adaptada da Ref. [2].

fase de segunda ordem em temperaturas finitas. Na vizinhança da fronteira dessa linha em temperaturas finitas, a fase é dominada por flutuações clássicas, porém esta região se torna cada vez mais estreita à medida que nos aproximamos do QCP.

O ponto crítico quântico separa uma fase isolante com *gap* de uma fase condutora sem *gap*. Exemplos de grande importância são os isolantes magnéticos [4–6, 15], para os quais os pontos críticos quânticos podem ser experimentalmente acessados através da aplicação de um campo magnético. As excitações elementares em isolantes magnéticos formam um condensado de Bose-Einstein (BEC) [4, 5, 16]. Em antiferromagnetos essas excitações são magnons, quasipartículas com spin inteiro e que obedecem à estatística de Bose. Em alguns experimentos, a densidade de magnons (e.g., densidade de triplons, como veremos adiante) é controlada pela aplicação de um campo magnético, levando à formação do BEC. A Fig. 2 sintetiza vários experimentos que foram descritos em termos da condensação de Bose-Einstein (BEC). Nesses magnetos que exibem o BEC, em campo nulo, um estado fundamental não magnético está separado de um estado magnético excitado por um *gap*  $\Delta$ . O *gap* do estado excitado pode se tornar nulo devido ao campo magnético aplicado, resultando em um campo crítico  $H_{c1}$ , com transição pertencendo à mesma classe de universalidade da condensação de Bose-Einstein.

Na Fig. 3(a) ilustramos os íons em uma célula do antiferromagneto tridimensional

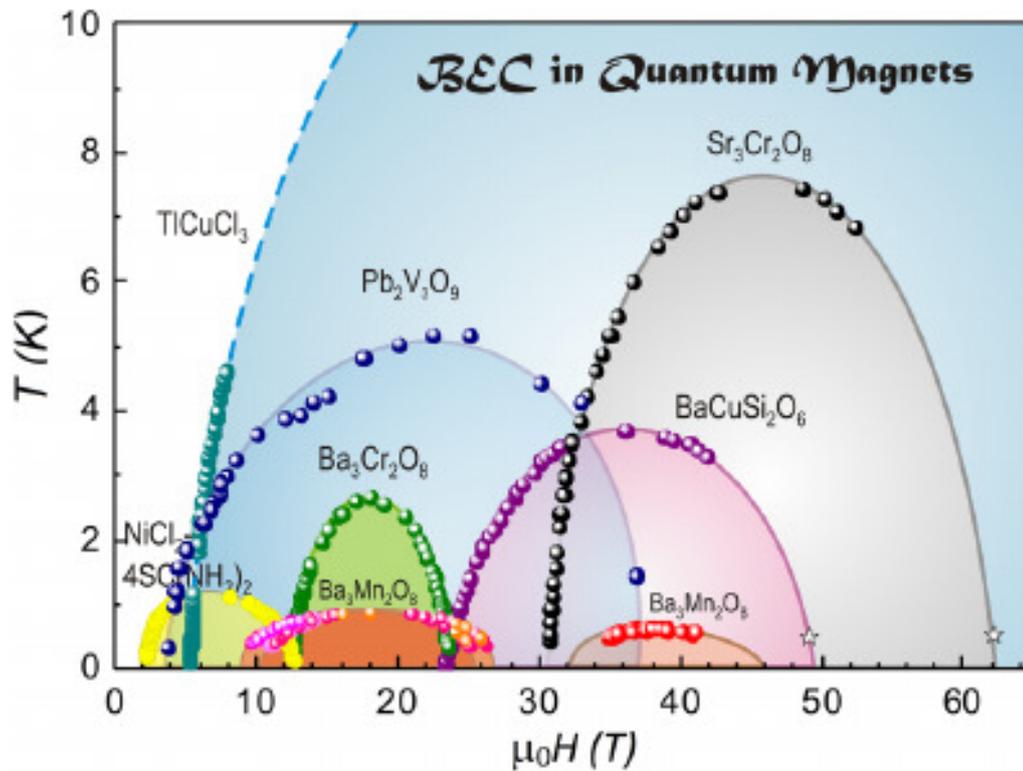


Figura 2 – Diagrama de fases ( $T, H$ ) para vários magnetos discutidos no contexto da condensação de Bose-Einstein (BEC). Figura retirada e adaptada da Ref. [4].

$\text{TiCuCl}_3$  [16–18], que podem ser visualizados como um conjunto de dímeros, pares de íons de cobre ( $\text{Cu}^{2+}$ ) cada um carregando spin  $S = 1/2$  e interagindo através do Hamiltoniano de Heisenberg [4, 5]. O termo de troca intradímeros, que é antiferromagnético ( $J_0 > 0$ ), é a interação mais forte, de modo que um dímero isolado tem um estado fundamental com spin total nulo e um estado excitado triplamente degenerado com energia  $J_0$  e spin  $S = 1$ , Fig. 3(c). A Fig. 3(b) ilustra o arranjo tridimensional do material magnético. A interação entre os planos é fraca (o termo  $J_2$  é pequeno), de modo que o composto pode ser tratado como quase-bidimensional. Aqui o estado tripleto é identificado com a presença de um triplon; uma quasipartícula bosônica com  $S = 1$ . E o estado singlete é identificado com a ausência dessa quasipartícula. O efeito Zeeman controla a densidade de triplons. Quando o campo magnético aumenta, a energia de excitação dos triplons com  $S^z = +1$  diminui e eventualmente torna-se nula, como está representado na Fig. 3(c) e obtido experimentalmente, Fig. 4(a). O que define dois campos magnéticos críticos  $H_{c1}$  e  $H_{c2}$  no diagrama de fases, como mostrado na Fig. 3(d). Em temperatura nula, a magnetização é zero abaixo de  $H_{c1}$ , onde existe apenas singletos. Entre os dois campos críticos a magnetização aumenta com o aumento do campo magnético (quando mais triplons são adicionados ao estado fundamental) devido ao aumento da energia de Zeeman, Fig. 3(c). Acima do campo crítico  $H_{c2}$  cada sítio é ocupado por um triplon e a magnetização satura a uma unidade por dímero. Abaixo de

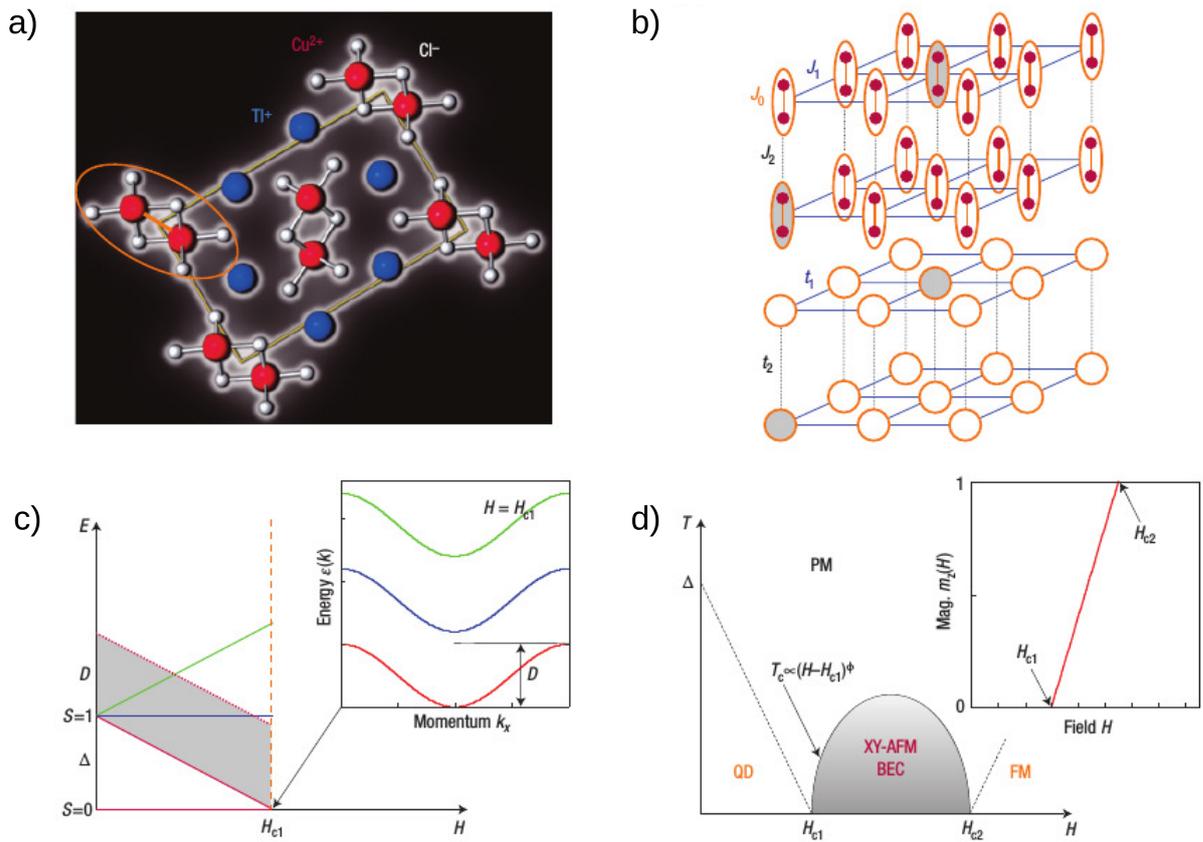


Figura 3 – BEC de magnons em antiferromagnetos no regime quântico. a) Dímeros no material  $\text{TiCuCl}_3$  com os íons  $\text{Cu}^{2+}$  e superexchange via  $\text{Cl}^-$ . b) Dímeros em uma rede quadrada com interação mais relevante intradímeros antiferromagnética  $J_0$  e interações interdímeros  $J_i$ . Estados tripletos (cinza, topo) são mapeados em quasipartículas bosônicas (triplons, inferior). c) Efeito Zeeman dos estados tripletos com  $gap \Delta$  e largura de banda  $D$  em  $\vec{k}_0 = (-\pi/a, \pi/a)$ . A figura inserida é a relação de dispersão do triplons no campo crítico  $H_{c1}$ . d) Diagrama de fases esquemático com a fase paramagnética (PM), a fase quântico desordenada (QD), a fase ferromagnética (FM) e a fase canted-antiferromagnética (XY-AFM), onde o BEC de magnons ocorre. Nas proximidades dos pontos críticos, a fronteira da fase XY-AFM BEC segue uma lei de potência dada, nas proximidades de  $H_{c1}$ , por  $T_c \propto (H - H_{c1})^\phi$ , com um expoente universal  $\phi = 2/3$  para uma condensação de Bose-Einstein de magnons. A figura inserida é a curva de magnetização  $m_z(H)$  para um sistema de spins tridimensionais dimerizados com platôs  $m_z = 0, 1$  (com  $gap$ ). Figura retirada e adaptada da Ref. [5].

$H_{c1}$  o estado fundamental é um estado paramagnético quântico desordenado formado pela superfície de singletos (vácuo dos triplons) e pode ser representado por um produto direto de estados singletos em cada dímero. Quando o  $gap$  se torna igual ao campo crítico  $H_{c1}$ , um condensado de Bose é formado. Em  $H_{c1}$  a fase paramagnética sofre uma transição para uma fase canted antiferromagnética (XY-AFM) com ordem magnética de longo alcance no plano perpendicular ao campo [19], Fig. 3(d). As propriedades

críticas do magneto na vizinhança desta transição de fase são governadas pelo ponto crítico quântico pertencente à classe de universalidade do BEC localizado em  $T = 0$  e  $H = H_{c1}$ . Além disso, a densidade de bósons é extremamente baixa (regime de alta diluição) próximo ao campo crítico  $H_{c1}$ , enfraquecendo os efeitos das interações de núcleo duro. Em particular, nas proximidades dos pontos críticos quânticos, a fronteira da fase segue uma lei de potência  $T_c \propto (H - H_{c1})^\phi$  com um expoente universal  $\phi = z/d$ , que depende apenas da dimensionalidade  $d$  e do expoente crítico dinâmico  $z$ ; para os triplons, a relação de dispersão é quadrática, ou seja,  $z = 2$  [19]. A relação de dispersão das quasipartículas bosônicas (magnons) torna-se linear,  $\omega \propto k$  para  $k \ll 1$ , no estado ordenado que existe entre  $H_{c1}$  e  $H_{c2}$ .

A física da condensação dos triplons, aplicada a sistemas de dímeros acoplados, discutida acima, é essencialmente a mesma, uma vez que os pontos críticos quânticos estão na mesma classe de universalidade [4]. A condensação de triplons foi observada em um grande número de isolantes magnéticos, tais como os compostos  $ACuCl_3$  ( $A = Tl, K, NH_4$ ),  $BaCuSi_2O_6$  e  $C_4H_{12}N_2Cu_2Cl_6$  [4, 5]. Arranjos quase-unidimensionais de spin  $S = 1$  em cadeias de spin, cadeias de Haldane, e até antiferromagnetos frustrados podem ser descritos dentro da mesma discussão; o que de fato foi realizado para materiais formados por íons de Níquel e para o  $Cs_2CuCl_4$ , respectivamente [20–22]. Destacamos ainda, que o mínimo na curva da magnetização em função da temperatura na Fig. 4(d) não pode ser compreendido a partir de uma teoria de campo médio, mas é uma consequência da condensação dos magnons [16, 19], o que ocorre também em magnetos em baixas dimensionalidades. No caso unidimensional, onde o condensado é desordenado por flutuações térmicas e quânticas, mínimos similares na curva de magnetização em função da temperatura podem ocorrer, agora como um crossover simples [23]. Em particular, a curva da susceptibilidade em função da temperatura, como a dos materiais  $KCuCl_3$  e  $TlCuCl_3$  [4], mostrada na Fig. 5, apresenta um máximo no valor do campo crítico devido ao *gap* em campo nulo. A localização deste máximo é ditada pelo crossover de um aumento exponencial para temperaturas  $k_B T \ll \Delta$  para um decréscimo do tipo Curie-Weiss em temperaturas  $k_B T \gg \Delta$ .

Além desses magnetos, um dos materiais que podem ser bem aproximados por modelos unidimensionais são os materiais do tipo *spin ladders* (escadas de spin) [24–26]. Na Fig. 6 ilustramos dois tipos: as ladders de duas pernas, Fig. 6(a), e as ladders de três pernas, Fig. 6(b). Ladders que possuem um número par de pernas têm o estado fundamental com correlações de curto alcance, onde um decaimento exponencial da correlação spin-spin é produzida pela existência de um *gap* entre as excitações. Entretanto, ladders que possuem um número ímpar de pernas se comportam de forma muito diferente das ladders de número par de pernas e mostram propriedades similares às cadeias simples em baixas energias, como excitações sem *gap* e correlações spin-spin com lei de potência. Essa diferença entre ladders com número de pernas pares ou

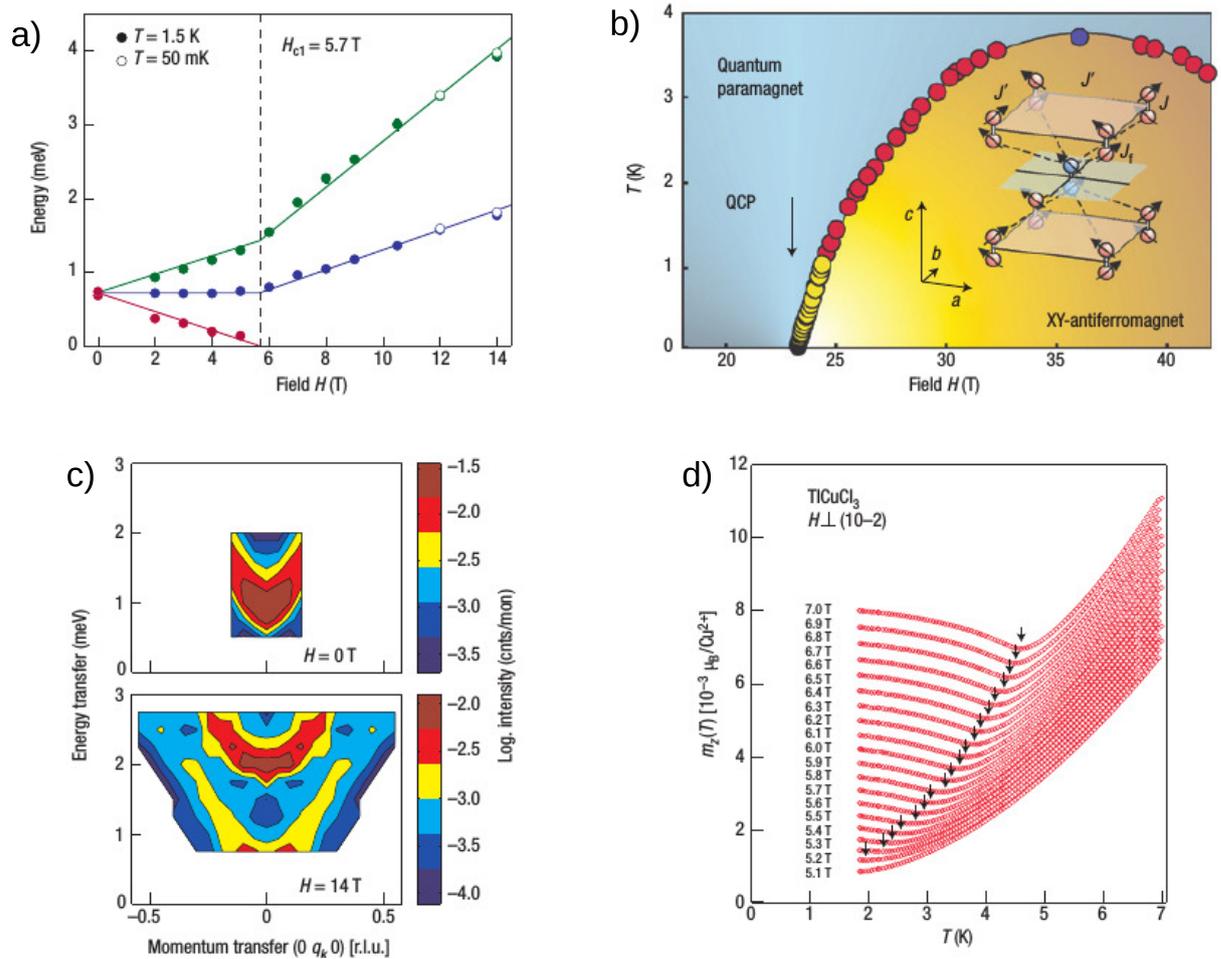


Figura 4 – Resultados experimentais da condensação de Bose-Einstein (BEC) de magnons. a) Efeito Zeeman dos modos tripletos no material  $\text{TiCuCl}_3$  até  $H > H_{c1}$  medido por espalhamento inelástico de nêutrons. b) Diagrama de fases do composto  $\text{BaCuSi}_2\text{O}_6$  medido pela magnetometria de torque, pelo efeito magnetocalórico e pelo calor específico. Uma redução dimensional foi observada neste material, com um crossover do expoente crítico  $\phi = 2/3$  do BEC tridimensional a um expoente crítico  $\phi = 1$  para duas dimensões em temperaturas próximas ao ponto crítico quântico. c) Excitações no BEC de triplons realizado no material  $\text{TiCuCl}_3$ . Modos de Goldstone com dispersão em torno de  $q_k = 0$ . Anisotropia de spin geralmente acarreta um gap de spin em materiais. d) Magnetização em função da temperatura  $m_z(T)$  no  $\text{TiCuCl}_3$  para valores fixos do campo magnético, como indicado. Mínimos indicados (setas verticais) para o crossover de temperatura finita, como esperado para uma condensação de magnons (triplons). Figura retirada e adaptada da Ref. [5].

ímpares foi confirmada experimentalmente em uma grande variedade de experimentos [26]. Ladders de duas pernas, por exemplo, são observadas no composto pirofosfato de vanádio  $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$  na Fig. 7(a) e em alguns cupratos como o  $\text{SrCu}_2\text{O}_3$  na Fig. 7(b). Enquanto ladders de três pernas foram observadas no composto  $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$ , Fig.7(b). Em particular, efeitos de um campo magnético aplicado nesses sistemas tipo escada foram

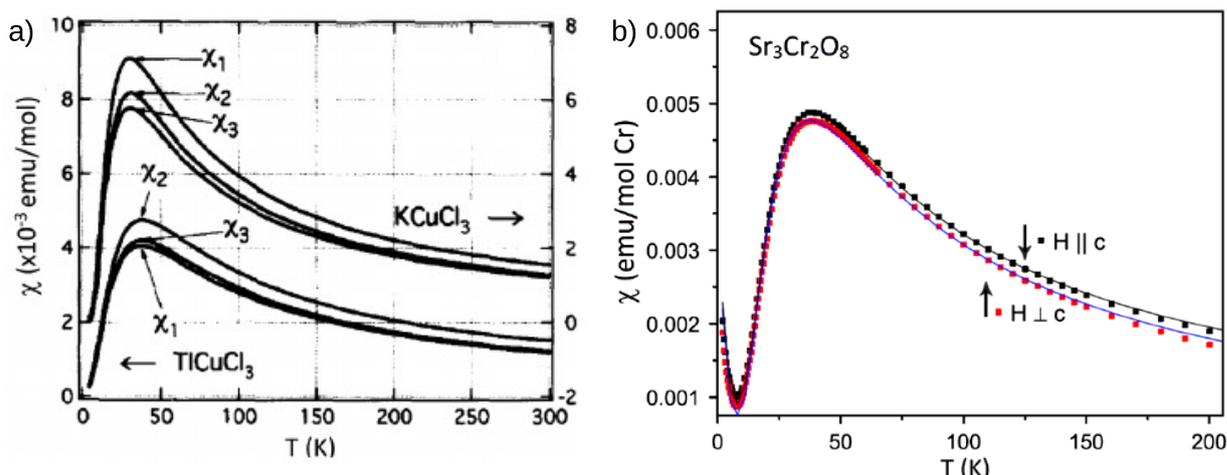


Figura 5 – a) Dependência com a temperatura das susceptibilidades magnéticas dos materiais  $\text{KCuCl}_3$  e  $\text{TiCuCl}_3$  medidos para um certo valor do campo magnético. b) Susceptibilidade magnética vs. temperatura  $\chi(T)$  do composto  $\text{Sr}_3\text{Cr}_2\text{O}_8$  medido em um valor fixo do campo magnético. Figuras retiradas e adaptadas da Ref. [4].

estudados [19, 27–33], onde foi observado transições de fase quânticas induzidas pelo campo magnético. Na Fig. 8, estão resumidas todas as fases de interesse que podem ser acessadas experimentalmente para o composto metal orgânico brometo de cobre piperidínio  $(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N})_2\text{CuBr}_4$ , abreviadamente  $(\text{Hpip})_2\text{CuBr}_4$ , um material ladder de duas pernas. A figura ilustra três regimes distintos: a fase quanticamente desordenada

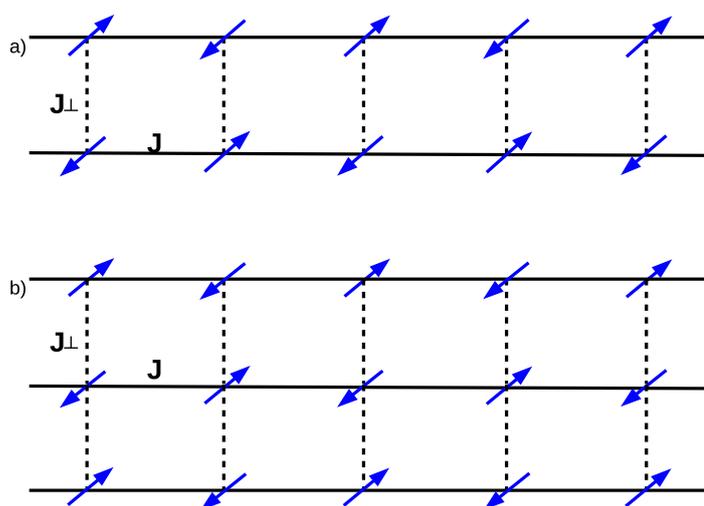


Figura 6 – Ladders de duas e três pernas, a) e b), respectivamente.  $J_{\perp}$  é termo de acoplamento entre cadeias.

(QD), a fase de criticalidade quântica (QC), e a fase do líquido de Luttinger (LL). Em particular, esta última [26, 34] é uma fase sem *gap* com excitações que apresentam uma relação de dispersão linear e delimitada por linhas de crossover [23]. Especialmente, o

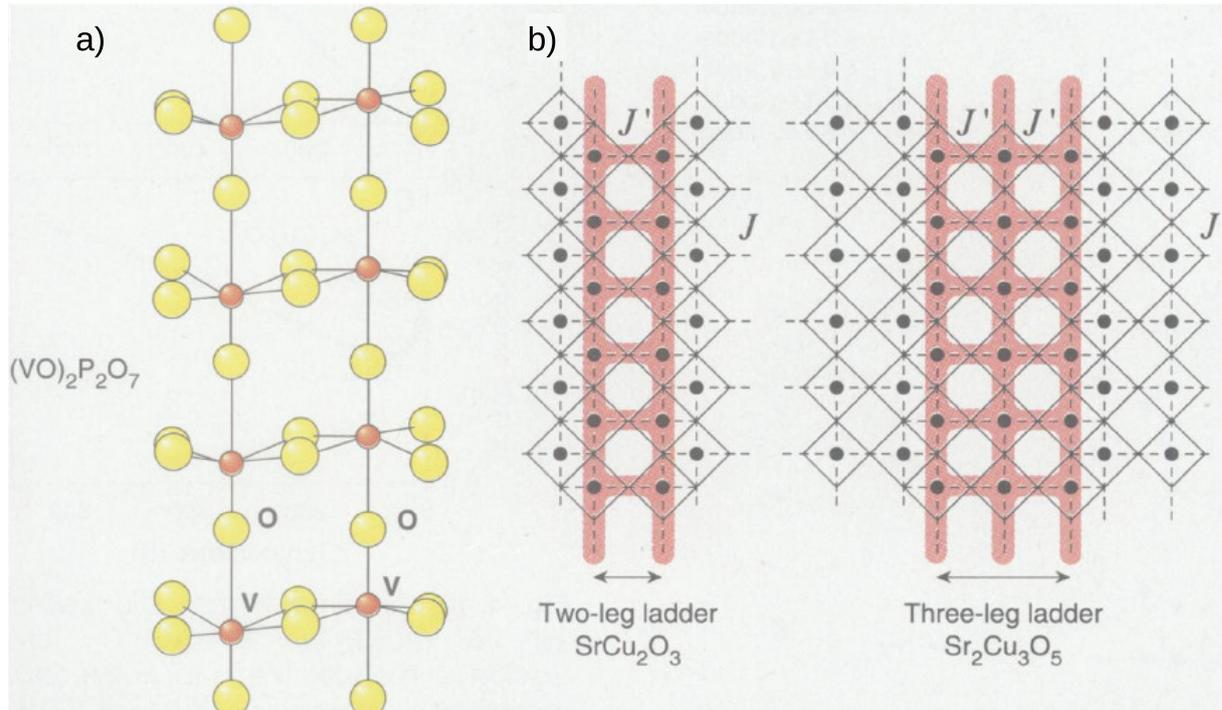


Figura 7 – a) Composto do tipo escada (ladder)  $(VO)_2P_2O_7$ ; íons O e V estão indicados. b) Representação esquemática dos compostos ladders de duas pernas  $SrCu_2O_3$  e de três pernas  $Sr_2Cu_3O_5$ . Os pontos em preto são átomos de cobre, e as interseções das linhas cheias são as localizações dos átomos de oxigênio; as linhas tracejadas são ligações Cu-O. As ladders de duas e três pernas estão destacadas,  $J$  é os acoplamento ao longo das cadeias, e  $J'$  é o acoplamento ao longo das linhas. Figura retirada e adaptada da Ref. [24].

crossover na região LL é sinalizado pela linearidade da curva do calor específico em baixas temperaturas.

Na Fig. 9 mostramos resultados experimentais do calor específico  $C_m(T, B)$  do composto ladder  $(Hpip)_2CuBr_4$ . No regime QD,  $B \leq B_c = 6.99$  T, o calor específico mostra um pico em  $T \approx 5$  K, Fig. 9(a), devido a excitações do tipo tripleto na ladder e é exponencialmente ativado em baixas temperaturas por causa da presença do *gap*,  $\Delta$ . O calor específico muda drasticamente para campos  $B > B_c$ , é explicado pela formação da fase LL, Fig. 9(b). Enquanto que em altas temperaturas  $C_m$  é dominado pelos estados do tripleto ( $S_z = 0$ ) com *gap*, um pico adicional cresce em baixas temperaturas. Abaixo deste pico, a dependência com a temperatura permanece linear até  $B = B_s \approx 14.5$  T, com dependência linear com o campo. A linearidade de  $C_m$  é demonstrada na Fig. 9(c). Para valores do campo magnético próximos ao máximo do domo LL, a razão  $C_m/T$  avaliada em diferentes temperaturas colapsa na mesma curva. Além disso, na Fig. 9(d) está representado um perfil de dados obtidos de  $\partial M/\partial T$ . No modelo de férmions livres [26], e em aproximações [23, 28, 35], a magnetização tem um mínimo ou um máximo como função da temperatura ( $\partial M/\partial T = 0$ ). Esses extremos ocorrem

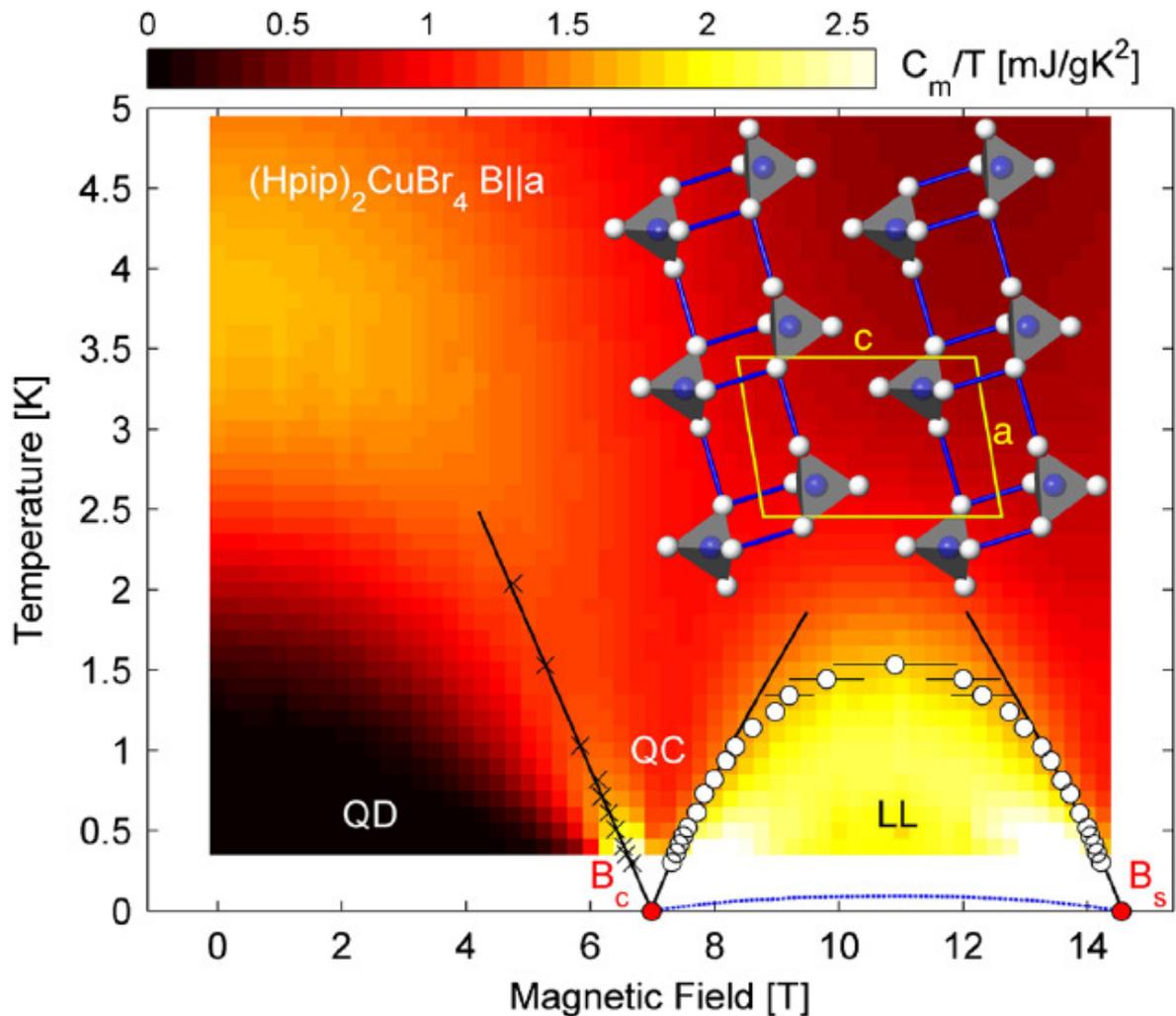


Figura 8 – Diagrama de fases esquemático da temperatura versus campo magnético do composto ladder  $(\text{Hpip})_2\text{CuBr}_4$ , ilustrando a fase quanticamente desordenada (QD), a região de criticalidade quântica (QC), e a fase do líquido de Luttinger (LL). Os pontos críticos quânticos ocorrem em  $B_c$  (valor do campo magnético que anula o  $\text{gap } \Delta$  do tripleto) e em  $B_s$  (valor do campo magnético em que o sistema se encontra totalmente polarizado). A figura inserida mostra a estrutura da rede do  $(\text{Hpip})_2\text{CuBr}_4$ , com átomos de Cu e Br, azul e branco, respectivamente. Figura retirada e adaptada da Ref. [31].

quando a temperatura corresponde ao potencial químico, e assim fornece outra forma de determinação do crossover em temperaturas finitas para a região LL. Os picos do calor específico concordam muito bem dentro do erro experimental, Fig. 9(d).

Nesses sistemas, as fases com  $\text{gap}$  são associadas aos platôs nas curvas de magnetização. Em uma dimensão, estes platôs de magnetização podem ser compreendidos como um efeito topológico através do argumento de Oshikawa, Yamanaka e Affleck (OYA) [36] que generaliza o teorema de Lieb-Schultz-Mattis (LSM) [37]. Uma extensão deste teorema para o caso com um campo magnético aplicado [38] afirma que cadeias de spins translacionalmente invariantes podem ter  $\text{gap}$  sem a quebra da simetria de translação,

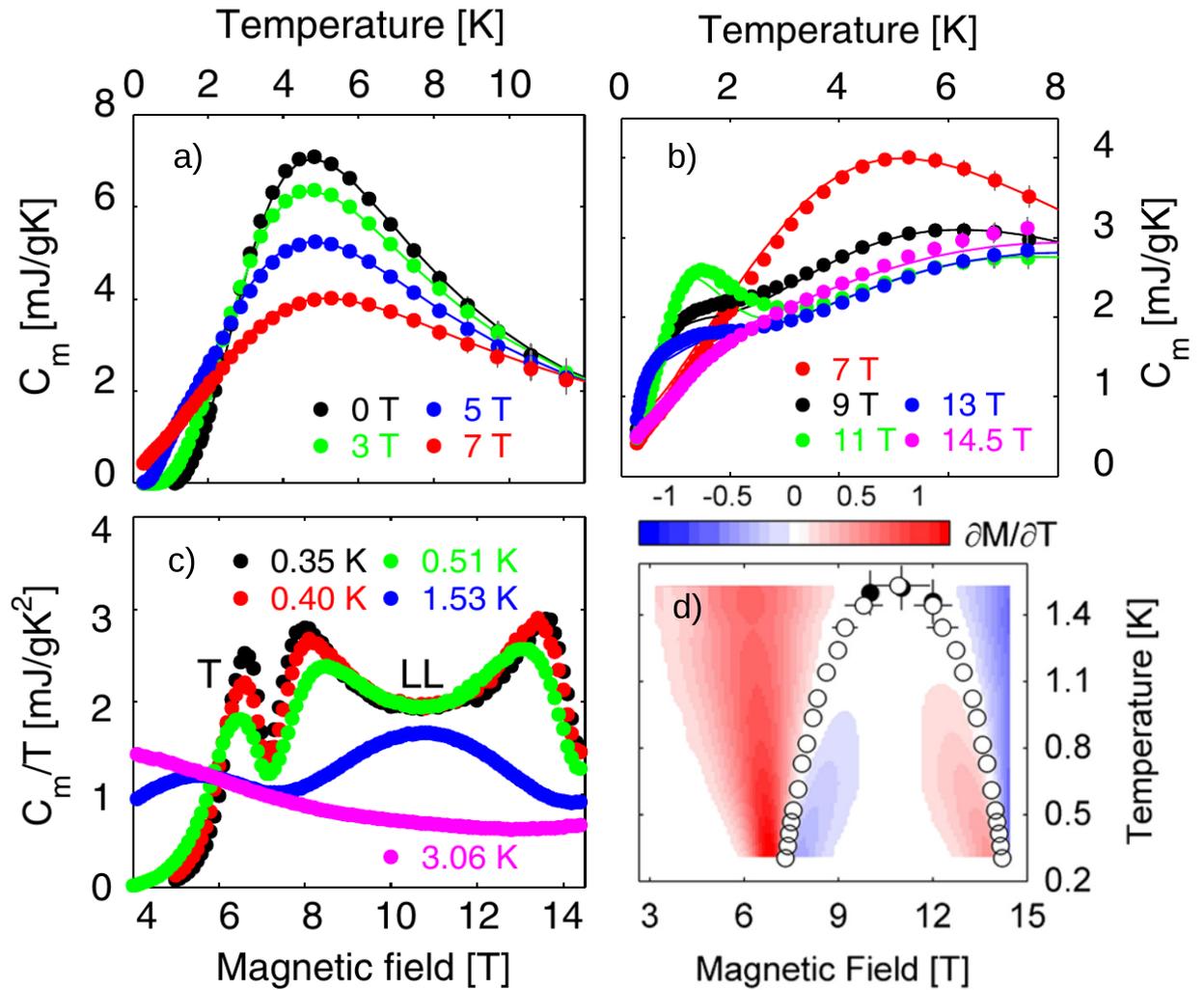


Figura 9 – a) Calor específico magnético  $C_m(T, B)$  para  $B \leq B_c$ , e b)  $B_c \leq B \leq B_s$ . As linhas são baseadas em diagonalização exata e no grupo de renormalização da matriz densidade. c)  $C_m(T, B)/T$  avaliado em temperatura fixa. A região com dependência linear com a temperatura do calor específico magnético é indicada por LL, enquanto T marca o pico devido a relaxação do tripleto. d) Perfil de  $\partial M/\partial T$  como função do campo magnético e da temperatura. Círculos brancos indicam o contorno da fase derivada de  $\partial M/\partial T = 0$  (ver também a Fig. 8), enquanto que os círculos em preto são máximos no calor específico,  $\partial C_m/\partial T = 0$ , obtidos em campo fixo. Figura retirada e adaptada da Ref. [31].

desde que a magnetização por spin,  $m$ , obedeça a relação  $S - m = \text{inteiro}$ . É esperado que essas fases com *gap* correspondam a platôs nesses valores de  $m$ . Entretanto, essa extensão de LSM não prova a presença do platô. Então, OYA construíram um argumento correspondente usando a Bosonização Abeliana, que está em acordo com o teorema LSM e, além disso, fornece uma condição para a existência dos platôs. O argumento OYA assegura que só é possível um platô de magnetização se  $S_u - m_u = \text{inteiro}$ , onde  $S_u$  e  $m_u$  são, respectivamente, a soma de  $S$  e  $m$ , sobre todos os sítios em um período do

estado fundamental. O período do estado fundamental é determinado pela estrutura espacial explícita do Hamiltoniano, e também por quebras espontâneas de simetria. Se o estado fundamental não apresenta quebra espontânea da simetria de translação,  $S_u$  é igual à magnetização por célula do sistema totalmente polarizado, enquanto que  $m_u$  é a magnetização por célula. O argumento OYA foi ampliado a modelos em altas dimensões e para graus de liberdade de carga [39].

Devido ao *gap* dos magnons, os pontos finais dos platôs na curva de magnetização são pontos críticos quânticos. Em sistemas tridimensionais, esta transição está na mesma classe de universalidade da condensação de Bose-Einstein [5, 40] e foi estudada em uma grande variedade de isolantes magnéticos [4, 5, 41]. Nos sistemas magnéticos, a magnetização e o campo magnético dos modelos bosônicos se comportam como a densidade de magnons e o potencial químico, respectivamente. Em uma dimensão, o mapeamento para o modelo de bósons de núcleo duro ou para um sistema fermiônico sem spin [40] implica em uma singularidade do tipo raiz quadrada na curva de magnetização:  $m \sim \sqrt{|B - B_c|}$  quando,  $B \rightarrow B_c$ . Para acoplamentos tridimensionais, o condensado pode ser estabilizado em temperaturas abaixo da ordem tridimensional [40].

Exatamente nos campos críticos quânticos, os magnons têm uma relação de dispersão clássica,  $\omega \sim q^2$ , onde  $q$  é o vetor de onda da rede. Em uma dimensão, esses campos críticos separam uma fase com *gap* de uma fase sem *gap* chamada de fase Líquido de Luttinger (LL) [26, 34], com excitações sem *gap* apresentando uma relação de dispersão linear,  $\omega \sim q$ . As previsões da teoria do Líquido de Luttinger em isolantes magnéticos com um campo magnético aplicado, incluindo o regime crítico quântico, foram investigadas em muitos materiais [31, 33]. Para temperaturas finitas e  $B \approx B_c$ , o regime crítico quântico é observado, e a linha de crossover para o regime LL é dada por  $T(B) \sim a|B - B_c|$ , com um coeficiente universal  $a$  e independente do modelo específico [23].

## 1.1 COMPOSTOS FERRIMAGNÉTICOS

Ferrimagnetos, em particular, ferrimagnetos unidimensionais [42, 43], são materiais que exibem magnetização líquida ferromagnética, como resultado de subredes magnéticas com diferentes íons magnéticos e/ou número de sítios magnéticos diferentes. A maioria desses materiais são magnetos moleculares bimetálicos contendo dois íons de metais de transição diferentes por célula unitária, que são distribuídos alternadamente em uma cadeia, Fig. 10. Materiais ferrimagnéticos tipicamente apresentam cadeias bipartidas [12] (uma cadeia que pode ser dividida em duas subredes interpenetráveis, onde os vizinhos mais próximos de um íon de uma subrede reside na outra subrede),

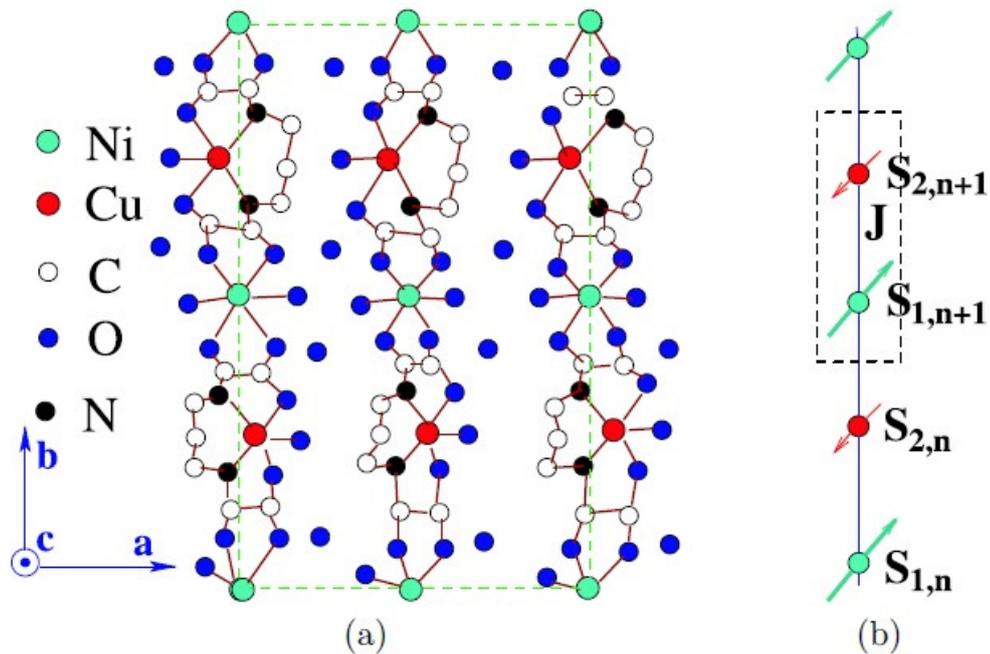


Figura 10 – (a) Estrutura do composto bimetálico quase-1D  $\text{NiCu(pba)(H}_2\text{O)}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  com sítios de spins alternados  $S_1 = S_{\text{Ni}} = 1$  e  $S_2 = S_{\text{Cu}} = 1/2$  ao longo do eixo  $b$ . Os átomos de hidrogênio estão omitidos para uma maior clareza. (b) Estado de Néel clássico do modelo de Heisenberg que descreve o composto ferrimagnético. Figura retirada da Ref. [44].

e exibem ferromagnetismo não saturado devido predominantemente a acoplamentos antiferromagnéticos entre suas subredes; expondo, portanto, ambas as ordens ferromagnética e antiferromagnética de longo alcance. Observa-se experimentalmente [43], que a curva do produto da susceptibilidade com a temperatura ( $\chi T$ ) *versus*  $T$  para compostos dessa natureza apresenta um mínimo em  $T = T_{\min}$ , o qual é exemplificado na Fig. 11(a) com a curva do composto 2-[3,5-bis(N-tert-butilaminossil)fenil]-4,4,5,5-tetrametila-4,5-dihidro-1H-imidazol-1-oxi 3-óxido, ou PNNBNO [45]. Diminuindo a temperatura a partir de  $T_{\min}$ , a curva  $\chi T$  exibe um crescimento acentuado, Fig. 11(b), antes do estabelecimento de uma ordem magnética tridimensional em baixíssimas temperaturas (tipicamente  $T < 3\text{K}$ ), cuja assinatura é um pico- $\lambda$  na curva do calor específico, Fig. 11(d). Em baixas temperaturas, o calor específico e a susceptibilidade 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.

Esses compostos ferrimagnéticos podem ser classificados em duas categorias [42, 44]. 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  $ABC$ , as quais apresentam

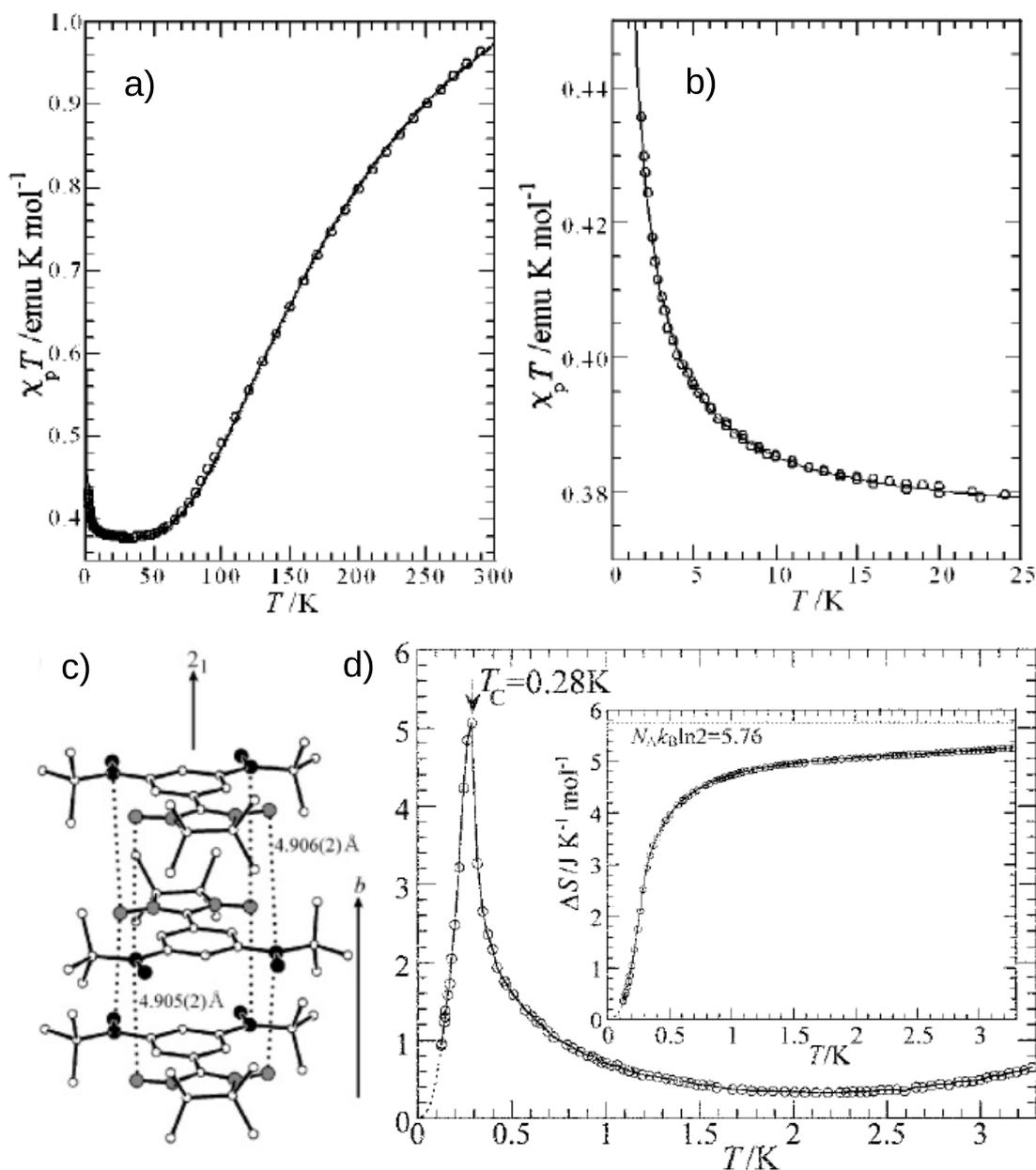


Figura 11 – a) Visão geral da curva do produto da susceptibilidade ( $\chi$ ) pela temperatura ( $T$ ) em função de  $T$  e b) seu comportamento em baixas temperaturas para o composto orgânico ferrimagnético PNNBNO. c) Estrutura uniforme da cadeia nos cristais do PNNBNO. d) Calor específico em função da temperatura para o composto orgânico ferrimagnético PNNBNO. Figura retirada da referência [45].

acoplamentos antiferromagnéticos homogêneos e célula unitária constituída de três centros magnéticos. Na segunda categoria, centro da nossa pesquisa, o número de 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, como, por exemplo, as cadeias ferrimagnéticas bimetálicas compostas de íons de Ni e Cu [44], Fig. 10. Os ferrimagnetos unidimensionais exibem magnetização espontânea em  $T = 0$ , como

esperado do teorema de Lieb e Mattis [46], e o *gap* no espectro de excitação é responsável por um platô de magnetização em suas curvas de magnetização no valor da magnetização do estado fundamental. Em campo nulo, as propriedades críticas na vizinhança de  $T = 0$  foram estudadas nos casos isotrópico [47–49] e anisotrópico [49, 50]. Outros fenômenos interessantes emergem através da introdução de fatores que desestabilizam o estado ferrimagnético, tal como a dopagem [51–58] ou frustração geométrica [44, 59–65].

No passado, a maioria dos experimentos realizados em sistemas de spins mistos quase-unidimensionais estavam interessados em medidas da susceptibilidade de cadeias ferrimagnéticas com spins  $S$  muito grande (tipicamente  $S = 5/2$ ), uma vez que o sistema é mais clássico [66]. Os efeitos quânticos são mais relevantes no caso quântico extremo  $(s, S) = (1/2, 1)$ , como, por exemplo, no material bimetálico quase-1D  $\text{NiCu}(\text{pba})(\text{H}_2\text{O})_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  [67] ilustrado na Fig. 10. Este material, possui uma interação de troca em torno de 121 K, e mostra uma transição para uma ordem tridimensional em torno de 7 K, veja a Fig. 12, que modifica um pouco o comportamento em baixíssimas temperaturas dos ferrimagnetos 1D. A Fig. 12(a) mostra uma curva experimental típica ( $\chi T$  vs.  $T$ ) frequentemente usada para determinar o caráter das interações de curto alcance. Para um sistema paramagnético, a lei de Curie implica o comportamento linear ( $\chi T = \text{const}$ ) em todo  $T$ . Se o sistema tem predominantemente interações ferromagnéticas (FM) ou antiferromagnéticas (AFM),  $\chi T$  aumenta ou diminui, respectivamente, enquanto a temperatura ( $T$ ) diminui. Sendo assim, no intervalo  $70 \text{ K} < T < 300 \text{ K}$  o acomplamento dominante entre primeiros vizinhos é AFM, enquanto que o aumento de  $\chi T$  abaixo do mínimo ( $T \approx 70 \text{ K}$ ) implica que o sistema se comporta como uma cadeia ferromagnética em baixas temperaturas. O decaimento abrupto abaixo de 7 K pode ser atribuído ao estabelecimento de uma ordem de longo alcance 3D-AFM. A Fig. 12 (b) apresenta o comportamento do calor específico, que muda de  $C_v(T) \propto T^{1/2}$  em baixas temperaturas, através de um pico do tipo Schottky AFM (para temperaturas intermediárias) para uma região paramagnética com decaimento  $T^{-2}$  para altas temperaturas. Em particular, a termodinâmica em baixas temperaturas das cadeias de spins mistos é controlada por magnons FM, de modo que em campo nulo pode ser descrita através da restrição de Takahashi na teoria de ondas de spin (SWT) para ferromagnetos [68, 69]. Algumas variações desta teoria também foram aplicadas em ferrimagnetos 1D [70–74].

A teoria de ondas de spin [12, 74, 75] de cadeias ferrimagnéticas [70, 71, 73, 74, 76–81] foi desenvolvida a partir de um estado fundamental ferrimagnético clássico, considerando magnons livres e interagentes, com ênfase nas propriedades em campo nulo. As curvas de magnetização desses sistemas sob um campo magnético aplicado foram discutidas principalmente através de métodos numéricos [66, 76, 77, 80, 82–85]. Na Fig. 13(a) exibimos as excitações de baixa energia, em unidades do campo magnético, da cadeia  $1/2 - 5/2$ , além do resultado da teoria de ondas de spin livres (FSW, do inglês free spin wave) [77], tendo um excelente resultado em comparação com a teoria FSW

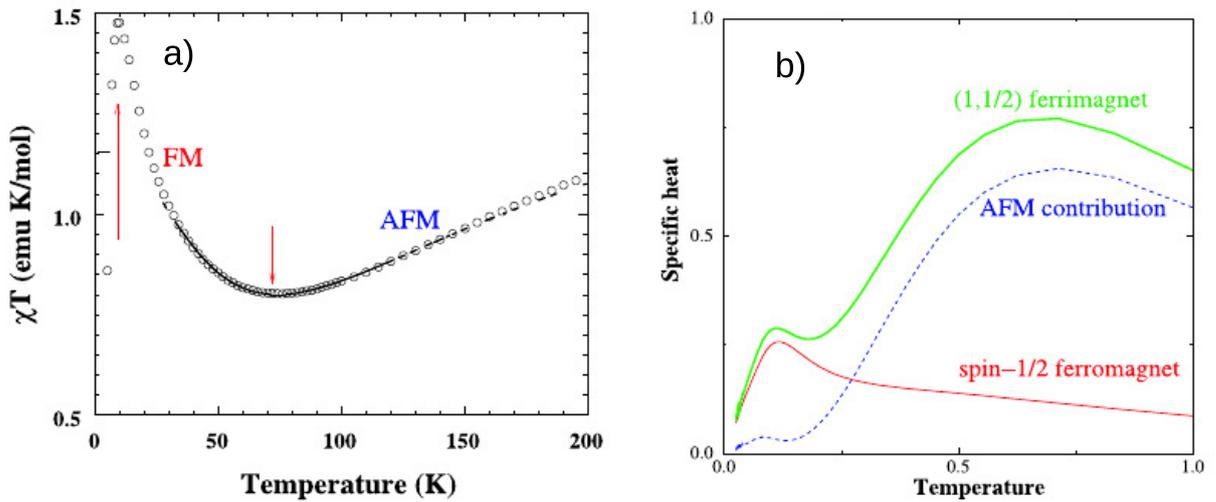


Figura 12 – (a) Resultados experimentais da susceptibilidade em função da temperatura ( $\chi T$  vs.  $T$ ) para a cadeia de spins mistos  $(1/2, 1)$  do composto  $\text{NiCu}(\text{pba})(\text{H}_2\text{O})_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ . b) Calor específico em função da temperatura ( $C_v$  vs.  $T$ ) para a cadeia de spins mistos  $(1/2, 1)$  através do DMRG comparado a  $C_v(T)$  da cadeia ferromagnética (FM) de spin-1/2 (DMRG) em campo magnético  $h = 0.05J$ . A diferença dos calores específicos pode ser identificada como contribuição antiferromagnética (AFM).  $C_v$  e  $T$  em unidade de  $J$ . Figura retirada e adaptada da Ref. [44].

para o modo ferromagnético (excitações que baixam o spin total em uma unidade), enquanto que para o modo antiferromagnético (excitações que aumentam o spin total 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 teoria de ondas de spin e o resultado exato é comum para cadeias com  $s$  e  $S$  quaisquer [70, 79], uma vez que a teoria FSW 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 (magnons não interagentes). Por outro lado, o método de ondas de spin interagentes [70, 73, 74, 86] (ISW, do inglês interacting spin wave), que leva em consideração as interações entre as ondas de spin, se mostra melhor quantitativamente em relação à teoria de ondas de spin livre. Como exemplo, exibimos na Fig. 13(b) 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 da FSW e  $\Delta = 1.676J$  através da ISW), muito mais próximo do valor exato  $\Delta = 1.759J$  [79]. Na Fig. 14, mostramos cálculos do calor específico e da susceptibilidade vezes a temperatura, em função da temperatura ( $\chi T$  vs.  $T$ ) para cadeias ferrimagnéticas de spins mistos  $(1/2, S)$  através das teorias FSW e ISW, com algumas variações [73], em comparação com dados numéricos do método Monte Carlo quântico [87–90] (QMC).

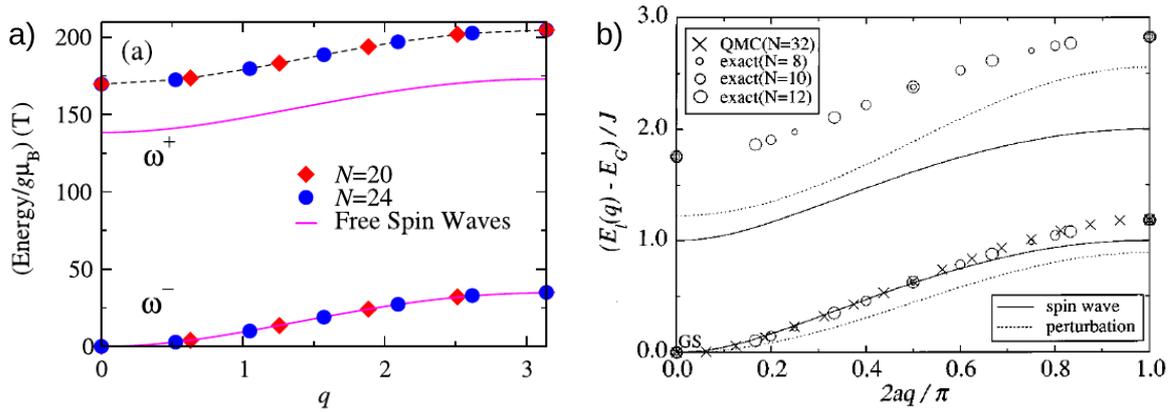


Figura 13 – a) Resultados da Diagonalização Exata usando  $g = 10$ , da cadeia ferrimagnética  $1/2 - 5/2$  para os valores indicados de  $N$  sítios. As linhas cheias são resultados da teoria FSW. Figura retirada e adaptada da Ref. [66]. b) Modos de mais baixa energia da cadeia  $1/2 - 1$ . Os resultados da teoria de ondas de spin linear (linhas pontilhadas) e interagente (linhas cheias), é comparado com cálculos numéricos. Figura retirada e adaptada da Ref. [70].

Neste contexto, investigamos nesta tese a teoria de ondas de spin em cadeias ferrimagnéticas de spins mistos ( $s, S$ ), em particular, com  $s = 1/2$ , no regime de baixas temperaturas e na presença de um campo magnético aplicado. Comparamos alguns resultados com dados do método Monte Carlo quântico (QMC), obtidos usando o código do método estocástico de expansão em série do ALPS (Algorithms and Libraries for Physics Simulations) [90], com  $10^6$  passos de Monte Carlo. Consideramos aqui excitações dos estados fundamentais ferrimagnético (FRIV) e totalmente polarizado (FPV). No caso ferrimagnético, consideramos ondas de spins interagentes, enquanto que no caso totalmente polarizado, apenas ondas de spins livres, sem interação. Considerando os valores da magnetização, do valor zero ao ponto de saturação, as duas aproximações apresentam desvios similares comparados com dados do QMC. Aprofundamos a teoria do estado fundamental ferromagnético e obtemos as linhas de crossover que limitam as regiões de platô e o regime LL. Em particular, mostramos dados de susceptibilidade e magnetização que podem ser usados para identificar um crossover entre os dois regimes LL, um construído das excitações magnéticas dos estados FRIV e o outro do estado FPV. Além disso, discutimos resultados mais detalhados para temperatura nula.

A tese segue o seguinte roteiro. No Cap. 2 apresentamos uma discussão sobre transições de fase quânticas, em particular, com campo magnético aplicado e discutimos crossovers em temperatura finita. Expomos no Cap. 3 o método de ondas de spin para alguns magnetos de Heisenberg, tais como os ferromagnetos e os antiferromagnetos, e em particular, os ferrimagnetos de spins alternados ( $s, S$ ); neste capítulo as principais técnicas analíticas que serão empregadas para obter alguns resultados deste trabalho são apresentadas. As relações de dispersão e a energia do estado fundamental são

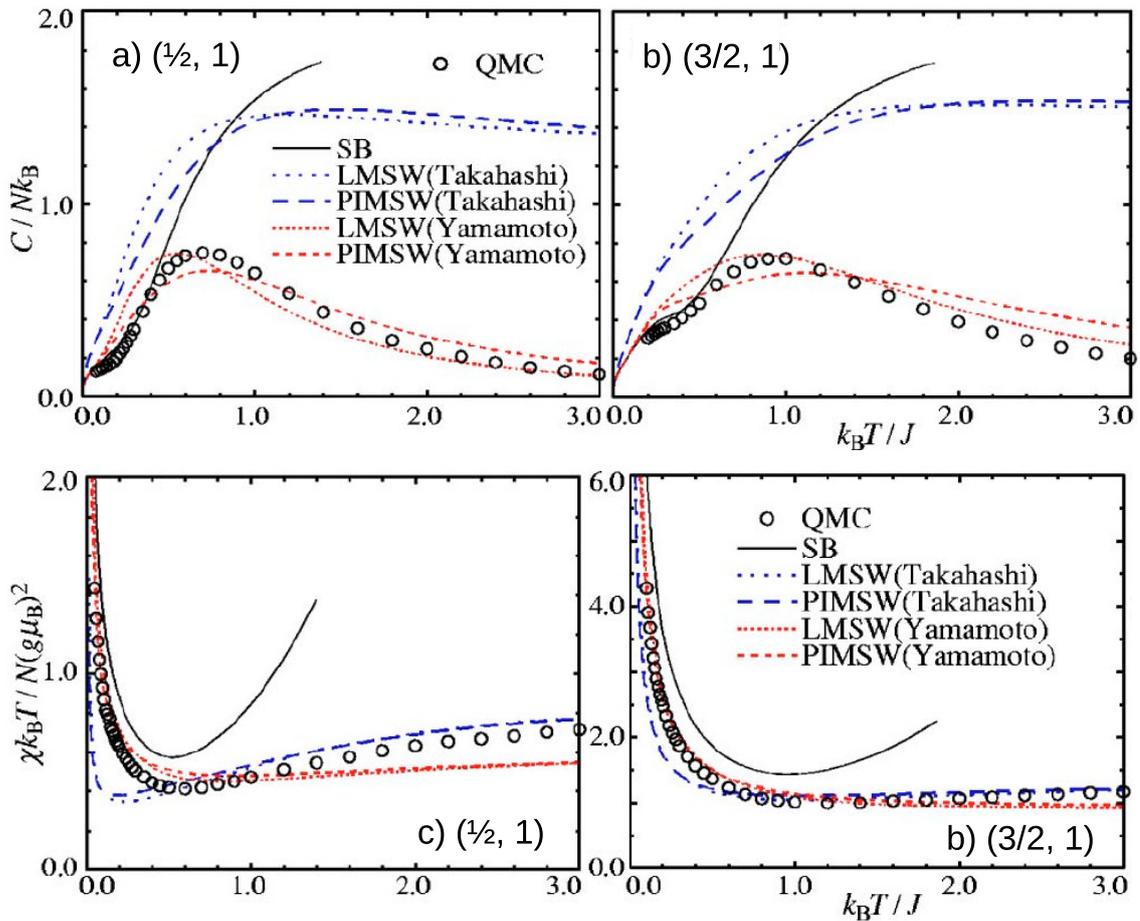


Figura 14 – Cálculos do calor específico  $C$  como função da temperatura para as cadeias ferrimagnética de spins alternados a)  $(1/2, 1)$  e b)  $(1/2, 3/2)$  e cálculos da susceptibilidade versus a temperatura em função da temperatura ( $\chi T$  vs.  $T$ ) para as cadeias ferrimagnética de spins alternados c)  $(1/2, 1)$  e d)  $(1/2, 3/2)$  através das teorias de Schwinger-boson (SB), ondas de spin linear modificada (LMSW, do inglês linear-modified-spin-wave), ondas de spin interagentes modificada perturbativamente (PIMSW, do inglês perturbational interacting-modified-spin-wave), e Monte Carlo quântico (QMC). As teorias de ondas de spin modificadas são construídas de duas formas distintas, o esquema de Takahashi e o esquema diferente de Yamamoto. Figuras retiradas e adaptadas da Ref. [73].

obtidas, além de discutir a metodologia analítica utilizada nos cálculos das propriedades termodinâmicas. No capítulo 4 discutimos em detalhe as duas aproximações de ondas de spin desenvolvidas para estudar os propriedades térmicas desses ferrimagnetos sob um campo magnético aplicado e comparamos os resultados com o método QMC, além de obter o diagrama de fases no regime de baixas temperaturas. Finalmente no capítulo 5 expomos nossas conclusões.

## 2 TRANSIÇÕES DE FASE QUÂNTICAS

Nas últimas duas décadas os estudos da matéria no regime quântico (do inglês, *quantum matter*), têm sido parte significativa das pesquisas em física moderna. Pode-se dizer que *quantum matter* é qualquer material (sólido, líquido ou gasoso) no qual a estatística quântica das partículas que o formam afetam profundamente as propriedades do sistema. A ideia é descrever as fases de um grande número de partículas interagentes em temperaturas suficientemente baixas para a qual a mecânica quântica possui um papel fundamental na descrição de suas características. Em particular, descrever as fases quânticas de elétrons em sólidos. Uma vez que o elétron tem spin, o estudo mais detalhado da configuração de spin na função de onda do elétron permite uma descrição precisa dessas fases quânticas. Neste contexto, há uma grande variedade de fases magnéticas, incluindo as fases ferromagnéticas, antiferromagnéticas e ferrimagnéticas. As fases quânticas podem ser ajustadas entre duas ou mais fases variando algum parâmetro externo ao sólido, e.g., pressão, campo magnético. Definimos genericamente este parâmetro como  $g$ . Quando  $g$  é variado, temos a possibilidade de uma transição de fase quântica em um valor crítico,  $g = g_c$ , deste parâmetro.

As transições de fase quânticas são extremamente relevantes em número variado de áreas, desde a física da matéria condensada a átomos frios e teoria quântica de campos. Essas transições, em contraste com os fenômenos críticos controlados por temperatura, ocorrem devido à competição entre os diferentes parâmetros que descrevem as interações básicas do sistema. Sua principal característica é o caráter quântico das flutuações críticas. Uma vez que as flutuações de energia e tempo são acopladas, através do princípio da incerteza, então, em temperatura nula, o tempo possui um papel fundamental; as propriedades estáticas se emaranham com as dinâmicas [1, 91].

A transição entre duas fases pode ter a característica de um salto abrupto, i.e. uma transição de fase quântica de primeira ordem, análoga à transição de primeira ordem induzidas por flutuações térmicas. No entanto, o caso mais interessante e mais frequente é o caso contínuo (transição de segunda ordem), quando a transição entre essas fases ocorre de forma gradual. Quando estamos em uma determinada fase, a função de onda adquire características fundamentais dessa fase em grandes escalas de comprimento. Entretanto, há uma escala de comprimento,  $\xi$ , abaixo da qual a função de onda adquire características do ponto crítico  $g = g_c$ . Em uma transição de fase contínua, a escala de comprimento  $\xi$  diverge quando nos aproximamos do ponto crítico em  $g = g_c$ . A divergência do comprimento de correlação é uma das principais características das transições de segunda ordem, pois não diverge nas transições de primeira ordem. A função de onda para o estado quântico em  $g = g_c$  é então uma superposição de um

conjunto exponencial de configurações que flutuam em todas as escalas de comprimento, ou seja, possui emaranhamento de longo alcance.

O ponto crítico quântico (QCP)  $g = g_c$  é definido pelo estado fundamental da função de onda, e portanto, estritamente falando, ocorre apenas no zero absoluto. Assim, de uma perspectiva experimental, as transições de fase quânticas podem ser vistas como uma área de pesquisa puramente teórica, uma vez que ocorre estritamente em temperatura nula. Entretanto, como será mais claro posteriormente, a influência do ponto crítico se estende sobre um amplo regime de temperaturas no diagrama de fases: esse é o regime chamado de criticalidade quântica, que é crucial para a compreensão de uma grande variedade de experimentos. Há uma linha especial nesse diagrama de fase, a trajetória crítico-quântica, onde a termodinâmica e as propriedades de transporte são governadas pelos expoentes críticos quânticos, que estão associados com o ponto crítico quântico. Além disso, observa-se efeitos de crossover induzidos por temperatura no lado não crítico do diagrama de fases.

## 2.1 ISOLANTES MAGNÉTICOS

Iniciaremos a discussão das transições de fase quânticas e da criticalidade quântica considerando dois exemplos práticos e elucidativos: a cadeia quântica de Ising e o dímero antiferromagnético. Em particular, descreveremos a região do diagrama de fases chamada, regime de criticalidade quântica (QCR). Os dois são exemplos de isolantes magnéticos: a carga do elétron é localizada, assim o foco está apenas na orientação do spin do elétron nos diferentes sítios da rede cristalina.

### 2.1.1 A Cadeia Quântica de Ising

Um modelo simples que exibe uma transição de fase quântica é o chamado modelo de Ising unidimensional em um campo magnético transversal [92]. De fato, esse tipo de transição foi observada em experimentos realizados por Coldea e colaboradores em cristais de  $\text{CoNb}_2\text{O}_6$  [93], Fig. 15, que pertence à família columbita de minerais. Apenas o spin eletrônico total no íon  $\text{Co}^{2+}$  é capaz de escolher sua orientação; todos os outros elétrons são pareados em singletos. Devido aos efeitos do acoplamento spin-órbita, os spins  $\text{Co}^{2+}$  têm uma energia mais baixa quando estão paralelos ou antiparalelos ao eixo cristalino: tais spins são chamados de spins de Ising. É importante ressaltar que as interações entre os spins são essencialmente entre primeiros vizinhos, representado pelo Hamiltoniano da Eq. 2.6, e os acoplamentos dipolares de longo alcance não são importantes; as interações de curto alcance surgem do processo de troca de Heisenberg, e sua escala de energia é determinada pelas interações coulombianas.

Os graus de liberdade são representados pelos operadores  $\hat{S}_i^{z,x}$ , que são as

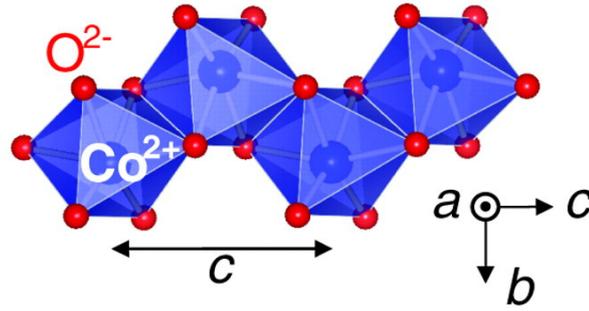


Figura 15 – Uma cadeia de íons  $\text{Co}^{2+}$  em zig-zag, cercados por octaedros de oxigênios em  $\text{CoNb}_2\text{O}_6$ . Os spins em  $\text{Co}^{2+}$  sofre uma transição de fase quântica quando aplicado um campo magnético transversalmente à direção da cadeia. Figura retirada e adaptada da Ref. [13].

matrizes de Pauli, dadas por:

$$\hat{S}_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \text{ e } \hat{S}_i^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

em cada sítio  $i$ . Denotaremos os autovalores de  $\hat{S}_i^z$  simplesmente por  $S_i^z$ , onde  $S_i^z$  têm os valores  $\pm 1$ . Identificaremos os dois estados com autovalores  $S_i^z = +1, -1$  como as duas possíveis orientações para os estados dos spins no íon  $\text{Co}^{2+}$ , spin Ising, que podem ser representados por  $|\uparrow\rangle_i$  e  $|\downarrow\rangle_i$ . O Hamiltoniano de spins do composto  $\text{CoNb}_2\text{O}_6$  tem um acoplamento entre vizinhos ao longo da cadeia em zig-zag unidimensional no cristal e preferem se alinhar paralelamente uns aos outros. Consequentemente, seu estado fundamental é ferromagnético, com todos os spins paralelos. Há dois possíveis estados fundamentais ferromagnéticos:

$$|\uparrow\rangle = \prod_{i=1}^N |\uparrow\rangle_i \text{ ou } |\downarrow\rangle = \prod_{i=1}^N |\downarrow\rangle_i, \quad (2.2)$$

onde  $N$  é o número total de spins em uma cadeia. O estado fundamental quebra a simetria de inversão de spin do Hamiltoniano do cristal.

Podemos agora induzir uma transição de fase quântica no cristal aplicando um campo magnético transversal ao eixo cristalino de preferência, como foi feito na Ref. [93]. Quando  $g \rightarrow \infty$ , notamos que um estado fundamental muito diferente da Eq. 2.2 deve surgir. Devido ao termo de Zeeman, todos os spins devem se orientar paralelamente ao campo aplicado; para um campo aplicado transversalmente à direção do eixo cristalino, na direção  $+\hat{x}$ , cada spin deve ser um autoestado da componente  $x$  do spin, o que nos leva a um único estado fundamental

$$|\Rightarrow\rangle = \prod_{i=1}^N |\rightarrow\rangle_i \text{ onde } |\rightarrow\rangle_i = \frac{|\uparrow\rangle_i + |\downarrow\rangle_i}{\sqrt{2}}. \quad (2.3)$$

Diferentemente dos estados na Eq. 2.2, o estado na Eq. 2.3 é invariante diante da troca de  $|\uparrow\rangle_i$  e  $|\downarrow\rangle_i$ , não quebrando a simetria de inversão de spin. Esse estado não é um ferromagneto, e vamos chamá-lo de paramagneto. Note aqui a diferença entre esse paramagneto, um paramagneto quântico, e o paramagneto térmico, obtido elevando um ferromagneto a temperaturas acima de  $T_c$ . No caso térmico, os spins estão flutuando em tempo real em resposta às perturbações incoerentes do ambiente térmico; em oposição, em um paramagneto quântico, os spins estão numa superposição quântica coerente de *up* e *down*.

A questão chave é que não é possível variar  $g$  e suavemente conectar os estados na Eq. 2.2, obtidos para  $g = 0$ , aos da Eq. 2.3, obtidos para  $g \rightarrow \infty$ . Para estudarmos isso é fundamental considerar a natureza do limite  $N \rightarrow \infty$ . Para  $N = 1$ , os dois estados degenerados na Eq. 2.2 tunelam para o outro na presença de qualquer campo magnético transversal, e o estado fundamental é, como Eq. 2.2. No entanto, para  $N$  grande, a amplitude de tunelamento entre  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$  torna-se exponencialmente pequena em  $N$ , porque é o produto da amplitude de tunelamento de todos os spins. Assim, no limite termodinâmico, a amplitude de tunelamento é estritamente zero: quando o cristal se encontra no estado  $|\uparrow\rangle$ , tem memória infinita da orientação *up*, e nunca encontrará o estado  $|\downarrow\rangle$ . Essa afirmação permanece válida para um intervalo finito de campos transversos, quando o estado fundamental permanece na maioria das vezes *up*: a diferença entre o número de spins *up* e *down* mede o momento ferromagnético, e a presença da quebra da simetria de inversão do spin. Assim, deve haver um ponto de não-analiticidade em  $g$ , onde o momento ferromagnético no estado fundamental se anula, e a simetria de inversão de spin é restaurada. Isso identifica o ponto crítico quântico em  $g = g_c$ . Agora, podemos nos perguntar sobre a evolução da função de onda do estado fundamental como uma função de  $g$ , entre os dois casos limite das Eqs. 2.2 e Eq. 2.3. Longe do ponto crítico, e em escalas de comprimento maiores que  $\xi$ , a função de onda efetivamente renormaliza em uma estrutura similar a qualquer uma das Eq. 2.2 ou Eq. 2.3. Em outras palavras, se descrevermos o estado em termos de spins efetivos que representam a média dos spins microscópicos. Então a dimensão dos spins efetivos é  $\xi$ , e sua função de onda se parece com Eq. 2.2 para  $g < g_c$ , e com Eq. 2.3 para  $g > g_c$ . Como notado anteriormente,  $\xi$  diverge quando  $|g - g_c|$  se torna pequeno, e para escalas de comprimento menores que  $\xi$  a função de onda é como a em  $g = g_c$ . Entretanto, em geral, não é possível encontrar uma representação simples desta função de onda crítico-quântica. Essa função de onda envolve uma superposição extremamente não-trivial de todas as  $2^N$  configurações de spins, com correlações entre spins que decaem com uma lei de potência. Pode-se dizer que esse estado crítico quântico em  $g = g_c$  está em um estado quântico fortemente emaranhado.

### 2.1.2 O Dímero Antiferromagnético

Discutiremos aqui o segundo exemplo: o dímero antiferromagnético, que é idealizado no isolante antiferromagnético  $\text{TlCuCl}_3$ , Fig. 16 (a). Este material possui os spins dos elétrons desemparelhados e localizados em cada íon  $\text{Cu}^{2+}$ . O sistema é descrito pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \sum_{i < j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.4)$$

onde  $\vec{S}_i$  e  $\vec{S}_j$  são os vetores de spin com  $S = 1/2$ , e  $J_{ij}$  é a integral de troca entre os íons de cobre. Os termos de troca são antiferromagnéticos,  $J_{ij} > 0$ , i.e. os spins preferem se alinhar antiparalelamente. Adicionalmente, são dimerizados: cada spin  $j$  está acoplado a um único spin vizinho com o termo de troca  $J$ , enquanto os outros acoplamentos,  $J/g$ , têm termos de troca menores, uma vez que  $g > 1$ .

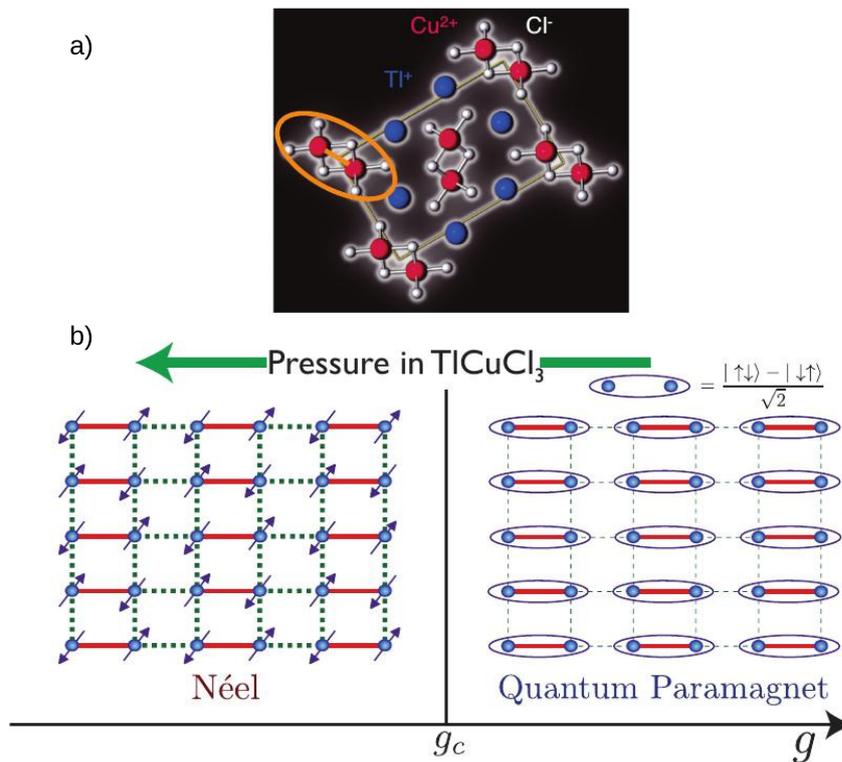


Figura 16 – a) Esquema representativo da célula unitária do isolante antiferromagnético  $\text{TlCuCl}_3$ . b) Um exemplo simples do dímero antiferromagnético em uma rede quadrada. As linhas em vermelho a interação de troca  $J > 0$ , enquanto as linhas verdes tracejadas têm termos de troca dados por  $J/g$  com  $g > 1$ . As elipses representam singletos (Spin total nulo). Figura retirada e adaptada da Ref. [13].

No modelo ilustrado na Fig. 16 (b) pode-se observar que para  $g = 1$ , o estado fundamental possui uma ordem Néel (ou antiferromagnética) com os spins polarizados: este estado quebra a simetria de rotação do Hamiltoniano. O que é análogo ao estado

ferromagnético da cadeia Ising. Entretanto, neste caso os spins estão congelados. Com o congelamento, cada spin *up* tem um vizinho *down* ( e vice versa), desta forma, cada termo do Hamiltoniano possui energia negativa.

Agora, em contraste ao que foi discutido para  $g = 1$ , quando considerado o estado fundamental para  $g \rightarrow \infty$ , os acoplamentos entre dímeros distintos se anulam, e o Hamiltoniano desacopla em uma soma independente de pares de spins em cada dímero. Sendo assim, o estado fundamental é um singlete:

$$(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}.$$

Em particular, como o singlete é rotacionalmente invariante, o estado fundamental do Hamiltoniano em  $g = \infty$  é um produto direto sobre todos os singletos.

Similarmente ao que foi discutido para a cadeia Ising, há uma quebra de simetria de rotação de spin (estado Néel) para certos valores de  $g$ , entretanto, no ponto crítico  $g = g_c$  a simetria de rotação de spin é restaurada. A transição é contínua em  $g = g_c$ , onde o estado fundamental do sistema é emaranhado entre todos os spins em todas as escalas de comprimento. Os dois estados fundamentais diferentes da Fig. 16 e seu espectro de excitação foi observado em experimentos de espalhamento de nêutrons no composto  $\text{TlCuCl}_3$ .

## 2.2 CRITICALIDADE QUÂNTICA

Como já discutimos neste capítulo, a transição de fase quântica deixa marcas claras em uma ampla porção do diagrama de fases para  $T > 0$ . A fim de discutir o significado experimental do estado crítico quântico em  $g = g_c$  consideremos a influência de temperaturas finitas na transição de fase no estado fundamental. Na Fig. 17 está ilustrado o diagrama de fases  $T \times g$  para o dímero antiferromagnético da Fig. 16.

A evolução do estado fundamental em  $T = 0$  foi discutida anteriormente. As regiões em azul da Fig. 17 podem ser descritas em baixas temperaturas como uma mistura de poucos estados excitados acima do estado fundamental [13]. Para  $g < g_c$ , as excitações são ondas de spin: pequenas flutuações do estado ordenado Néel que se propagam como onda. Entretanto, para  $g > g_c$  as excitações são quase partículas chamadas de triplons: excitações locais dos singletos no dímero, que saltam de dímero a dímero.

A região de criticalidade quântica é ilustrada em laranja na Fig. 17. Nesta região o sistema se comporta como o estado fundamental no ponto crítico quântico em  $g = g_c$ . Como os efeitos térmicos são mais fortes em temperaturas  $T$  elevadas, a região de criticalidade quântica está contida numa faixa que se alarga com o aumento de  $T$ .

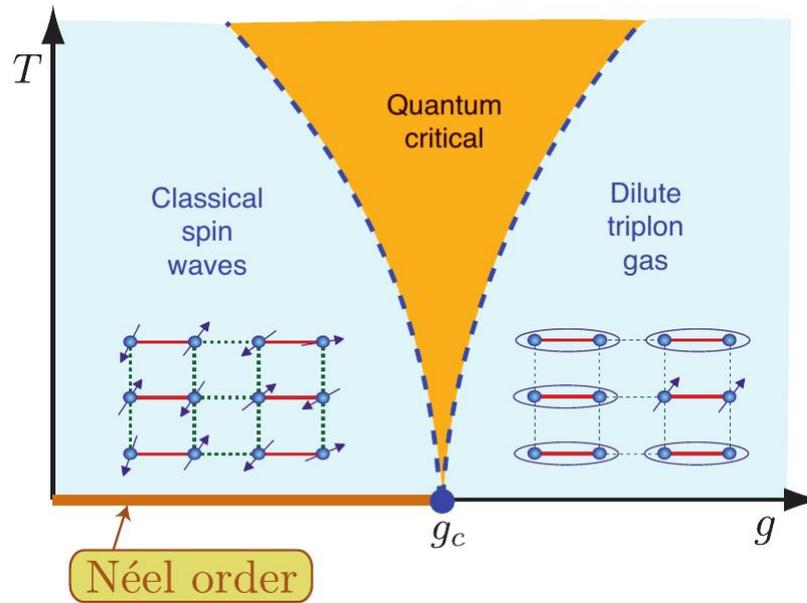


Figura 17 – Diagrama de fases em  $T \neq 0$  para o modelo ilustrado na Fig. 16. Para  $g < g_c$ , as excitações de baixa energia do sistema são pequenas flutuações da ordem Néel, as ondas de spins. As ondas de spin possuem forte acoplamento não linear que destroem a ordem em  $T > 0$ , e a dinâmica é descrita classicamente em uma teoria de ondas de spins interagentes. Para  $g > g_c$ , as excitações são os tripletos (estados com spin total igual a 1) de cada dímerno. Esses se tornam móveis e formam um gás de triplons, cuja dinâmica pode ser descrita através da equação de Boltzmann. A criticalidade quântica surge na região intermediária em laranja, onde não há teoria clássica efetiva; na verdade, é uma região que possui a dinâmica fortemente acoplada com as excitações críticas não triviais.

Uma característica chave da criticalidade quântica é o tempo de equilíbrio térmico

$$\tau_{eq} = C_{eq} \frac{\hbar}{k_B T}, \quad (2.5)$$

onde  $\hbar$  é a constante de Planck,  $k_B$  é a constante de Boltzmann, e  $C_{eq}$  é um número universal adimensional, ou seja, é independente das grandezas microscópicas do Hamiltoniano. É importante destacar que o valor de  $\tau_{eq}$  é o menor possível: as regiões em azul da Fig. 17 ( $\tau_{eq} \gg \hbar/k_B T$ ), onde a descrição efetiva é puramente clássica. Entretanto, a região em laranja deve ser descrita levando em consideração os efeitos quânticos para uma compreensão das excitações do estado crítico e suas interações complexas. Na Fig. 18 ilustramos um crossover similar para a cadeia quântica de Ising observado no composto  $\text{CoNb}_2\text{O}_6$ .

A seguir, discutiremos a teoria de escala dos fenômenos críticos quânticos. Definiremos os expoentes críticos e enfatizaremos o importante papel do chamado expoente crítico dinâmico em uma transição de fase quântica.

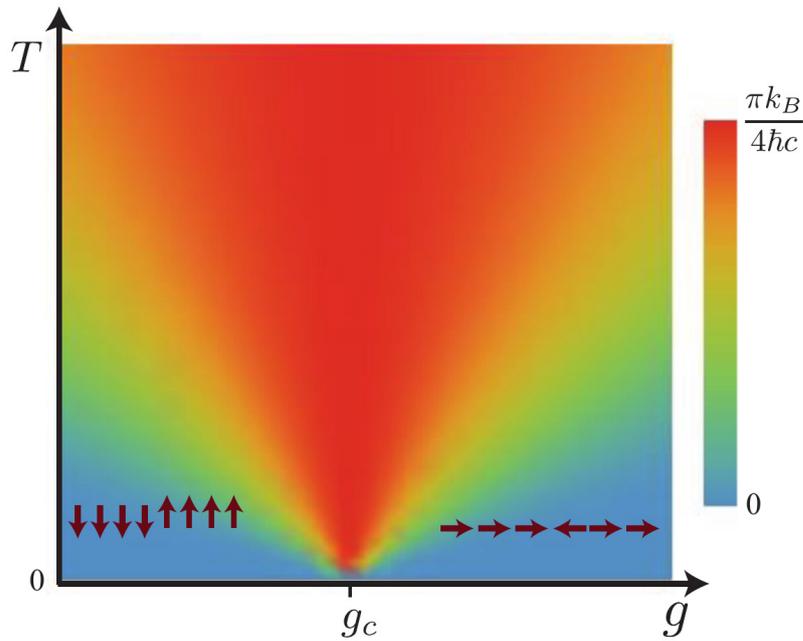


Figura 18 – Propriedades em temperatura finita da cadeia quântica de Ising que modela o composto  $\text{CoNb}_2\text{O}_6$ . As configurações típicas dos spins nos dois regimes mais baixos de temperatura. Para  $g < g_c$ , temos configurações ferromagnéticas, enquanto que para  $g > g_c$  temos um estado paramagnético. Figura retirada e adaptada da Ref. [13].

## 2.3 TEORIA DE ESCALA E EXPOENTES CRÍTICOS

As propriedades de escala de um sistema nas proximidades de uma transição de fase quântica podem ser obtidas considerando um conjunto de transformações de escala e um comprimento e tempo característicos que determinam seu comportamento próximo ao ponto crítico quântico. O grupo de renormalização (RG) fornece o aparato matemático para descrever essas transformações de escala. O ponto crítico é associado a um ponto fixo instável que governa a transição. O conjunto de expoentes críticos associados com este ponto fixo caracteriza a classe de universalidade da transição.

Com já discutimos, um modelo simples que exhibe uma transição de fase quântica é o modelo de Ising unidimensional em um campo magnético transversal [92], cujo Hamiltoniano é dado pela expressão

$$\mathcal{H} = -J \sum_i S_i^z S_{i+1}^z - h \sum_i S_i^x - H \sum_i S_i^z, \quad (2.6)$$

onde  $J > 0$  é o termo de acoplamento entre primeiros vizinhos,  $h = gJ$  é o campo magnético transversal e  $H$  é o campo magnético uniforme na direção  $\mathbf{z}$  conjugado ao parâmetro de ordem  $m = \langle S^z \rangle$ . Considere inicialmente o caso  $H = 0$ . Neste caso, podemos notar que

- $T = 0$  e  $h = 0$ . Há uma ordem magnética de longo alcance com um parâmetro de

ordem  $m \neq 0$ .

- $T = 0$  e  $h \rightarrow \infty$ . O campo magnético transversal destrói a ordem de longo alcance e  $m = 0$ .

Então, há a possibilidade de que em um valor crítico da razão ( $h/J$ ) ocorra uma transição de fase em temperatura nula de um estado ordenado com  $m \neq 0$  a um estado desordenado com  $m = 0$ .

Como veremos ao longo do capítulo, do ponto de vista do grupo de renormalização, a transição de fase em  $h/J = (h/J)_c$  é descrita pela existência de um ponto fixo instável, em temperatura nula, nas equações do RG para os parâmetros do modelo. Associados com este ponto crítico quântico há um conjunto de expoentes críticos, que descrevem o comportamento singular das diferentes quantidades físicas na transição.

### 2.3.1 Expoentes Críticos

Na vizinhança de uma transição de fase de segunda ordem, em temperatura nula ou finita, várias quantidades físicas apresentam comportamento tipo lei de potência que são caracterizados por expoentes críticos [94]. Se  $\bar{g} = g - g_c$  mede a distância ao ponto crítico, a parte singular da densidade de energia livre  $f_s$ , o comprimento de correlação  $\xi$ , o tempo de relaxação crítico  $\tau$ , o parâmetro de ordem  $m = -\partial f_s / \partial H$  e a susceptibilidade  $\chi = -\partial^2 f_s / \partial H^2$ , quando  $g \rightarrow g_c$ , se comportam da seguinte forma [95]:

$$\begin{aligned}
 f_s &\propto |\bar{g}|^{2-\alpha} \\
 \xi &\propto |\bar{g}|^{-\nu} \\
 m &\propto |\bar{g}|^{\beta} \\
 \chi &\propto |\bar{g}|^{-\gamma} \\
 \tau &\propto |\bar{g}|^{-\nu z} \\
 m(H, g = g_c) &\propto |H|^{1/\delta},
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

onde a última equação é definida no ponto crítico. Essas equações definem os expoentes críticos mais comuns,  $\alpha$ ,  $\nu$ ,  $\beta$ ,  $\delta$  e  $\gamma$  e o expoente dinâmico  $z$ . Há um outro expoente muito importante, que é o expoente  $\eta$  associado com o comportamento da função de correlação no ponto crítico. Já que no ponto crítico não há escala de comprimento, enquanto o comprimento de correlação torna-se infinito, a função de correlação  $G(r)$  decai algebricamente com a distância  $r$  da forma  $G(r) \propto 1/r^{d-2+\eta}$ . Para o caso de transições quânticas, a definição de  $\eta$  envolve o expoente  $z$ , tal que

$$G(r) \propto \frac{1}{r^{d+z-2+\eta}}$$

no ponto crítico quântico. Frequentemente veremos a combinação  $d + z$  exercendo o papel de uma dimensionalidade efetiva.

Os expoentes críticos introduzidos acima não são independentes. Eles estão relacionados pelas relações de escala [95]

$$\begin{aligned} \alpha + 2\beta + \gamma &= 2 \\ \beta + \gamma &= \beta\delta \\ \nu(2 - \eta) &= \gamma. \end{aligned}$$

Em particular, um caso interessante é a relação de hiperescala que relaciona os expoentes críticos à dimensão  $d$  do sistema. No caso térmico essa é a relação de Josephson:

$$2 - \alpha = \nu d. \tag{2.8}$$

Para transições de fase quânticas a relação de hiperescala é modificada, sendo dada por [96]

$$2 - \alpha = \nu(d + z). \tag{2.9}$$

Note que novamente a combinação  $d + z$ , exerce o papel de uma dimensionalidade efetiva. Outra relação, não menos importante, no caso quântico é [97]

$$2\beta = \nu(d + z - 2 + \eta), \tag{2.10}$$

que também é uma relação de hiperescala.

### 2.3.2 Propriedades de escala em $T = 0$

Um passo fundamental na teoria dos fenômenos críticos é compreender as propriedades dos sistemas físicos sob uma mudança de escala nas dimensões de tempo e espaço. A razão é que, quando o sistema se aproxima do ponto crítico, o tamanho das regiões, nas quais os graus de liberdade estão correlacionados, aumenta. O tamanho típico dessas regiões e seu tempo de relaxação definem o comprimento de correlação  $\xi$  e o tempo característico  $\tau_\xi$ , respectivamente. No ponto crítico todos os spins estão correlacionados, o comprimento de correlação diverge e o sistema é invariante por escala.

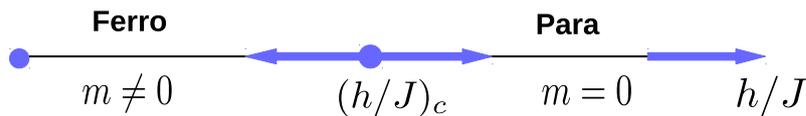


Figura 19 – Diagrama de fase em temperatura nula do modelo de Ising em um campo transverso para  $d \geq 1$ . A transição de fase em  $(h/J)_c$  é associada com um ponto fixo instável das equações do grupo de renormalização. As setas mostram a direção do fluxo das equações do RG. Na fase ferromagnética o fluxo está na direção do atrator em acoplamento forte  $J = \infty$ . O fluxo na fase paramagnética está na direção  $h = \infty$  ou  $J = 0$ .

Então, para uma compreensão dos fenômenos críticos, é fundamental investigar a mudança dos parâmetros físicos (e.g., interações, campo magnético, magnetização) sob uma transformação de escala. Na Fig. 19 é mostrado um exemplo típico de transformação de escala dos parâmetros. Dentro do formalismo matemático do Grupo de Renormalização (RG), que descreve as transformações de escala, o ponto crítico quântico invariante por escala está associado com um ponto fixo nas equações do RG.

Considere o modelo simples apresentado na Eq. 2.6. Quando o sistema se aproxima do ponto crítico quântico (QCP), todos os spins fortemente correlacionados dentro de uma região podem ser tratados como um único spin. Ou seja, podemos imaginar o sistema sendo formado por uma nova rede onde o bloco dos spins é substituído por um spin efetivo. Discutiremos como os parâmetros do Hamiltoniano da Eq. 2.6 mudam, sob uma transformação de escala de comprimento por um fator  $b$ , nas proximidades de  $T = 0$ . Denotamos os parâmetros físicos nessa nova rede (rede efetiva) por uma "linha", como por exemplo, a nova escala de comprimento é representada por  $L'$ , enquanto que na rede original a escala de comprimento é  $L$ . Desta forma, escrevemos

$$\begin{aligned} J' &= b^{-y}J \text{ ou } h' = b^{-y}h \\ \bar{g}' &= b^a \bar{g} \\ H' &= b^x H, \end{aligned} \quad (2.11)$$

onde introduzimos os expoentes  $y$ ,  $a$  e  $x$ . A quantidade  $\bar{g} = h/J - (h/J)_c$  mede a distância ao ponto crítico no espaço dos parâmetros. É fácil verificar que  $(h/J)' = (h/J)$  no ponto fixo.

A parte singular da densidade de energia livre  $f_s$  pode ser escrita, em  $T = 0$ , como

$$f_s = \frac{F_s}{L^d} = J f(g, H/J), \quad (2.12)$$

onde  $f(q, p)$  é uma função de escala e  $J$  é a constante de acoplamento que tem dimensão de energia,  $L$  é o tamanho do sistema e  $d$  é a dimensão euclidiana. A nova densidade de energia livre do sistema, onde foi realizada a reescala  $L' = L/b$ , é dada por

$$f'_s = b^d f_s = J' f(g', H'/J'), \quad (2.13)$$

obtendo das relações, Eqs. 2.11,

$$f_s = b^{-d} b^{-y} J f(b^a g, b^x H/b^{-y} J) \Rightarrow \frac{f_s}{J} = b^{-(d+y)} f \left[ b^a g, b^{(x+y)} H/J \right].$$

Uma vez que  $b$  é arbitrário, tomamos  $b^a g = 1$ , desta forma

$$\frac{f_s}{J} = g^{\frac{d+y}{a}} f \left[ 1, \frac{H/J}{g^{\frac{x+y}{a}}} \right]. \quad (2.14)$$

De forma análoga, temos ainda que o comprimento de correlação é dado por

$$\xi = g^{-\frac{1}{a}} \xi' \left[ 1, \frac{H/J}{g^{\frac{x+y}{a}}} \right]. \quad (2.15)$$

Identificamos então o expoente do comprimento de correlação  $\nu = 1/a$ . Da definição do expoente  $\alpha$  associado com a parte singular da densidade de energia do estado fundamental, i.e.  $f_s/J = |g|^{2-\alpha}$ , Eqs. 2.7, temos

$$2 - \alpha = \nu(d + y). \quad (2.16)$$

Essa é a relação de hiperescala quântica, que relaciona os expoentes críticos  $\nu$  e  $\alpha$  à dimensionalidade do sistema  $d$  e ao expoente  $y$  que renormaliza o acoplamento  $J$  no ponto fixo. A Eq. 2.16 difere da relação de hiperescala usual em fenômenos críticos térmicos, uma vez que  $d$  é substituído por  $d + y$ .

O parâmetro de ordem,  $m = \langle S^z \rangle$ , é definido pela derivada da energia livre com respeito a seu campo conjugado  $H$ ;

$$m = - \left( \frac{\partial f_s}{\partial H} \right)_{H=0} \propto |g|^\beta.$$

Tomando a derivada da Eq. 2.14 obtemos  $m \propto |g|^{\nu(d-x)}$ , conseqüentemente

$$\beta = \nu(d - x). \quad (2.17)$$

Na presença do campo externo, temos

$$m(H) = - \left( \frac{\partial f_s}{\partial H} \right) = |g|^{\nu(d-x)} f' \left[ 1, \frac{H/J}{|g|^{(x+y)/a}} \right].$$

No ponto crítico,  $g = 0$ , o parâmetro de ordem deve ser finito na presença do campo externo conjugado. Podemos então escrever

$$m(H) = - \left( \frac{\partial f_s}{\partial H} \right) = |g|^{\nu(d-x)} \left( \frac{H/J}{|g|^{(x+y)/a}} \right)^r.$$

Obtemos o expoente  $r$  impondo que a dependência em  $|g|$  deva ser cancelada para produzir um parâmetro de ordem finito em  $|g| = 0$ , ou seja

$$r = \frac{d - x}{x + y} = \frac{\beta}{\Delta}, \quad (2.18)$$

onde foi introduzido o expoente  $\Delta = \nu(x + y)$ . Uma vez que o expoente crítico  $\delta$  é definido por  $m(H, |g| = 0) \propto H^{1/\delta}$ , obtemos, usando  $\delta = 1/r$ , a relação de escala,  $\delta = \Delta/\beta$ .

Por sua vez, a derivada da susceptibilidade é dada por

$$\chi = - \left( \frac{\partial^2 f_s}{\partial H^2} \right)_{H=0} \propto |g|^{-\gamma}.$$

Tomando a segunda derivada da Eq. 2.14, encontramos

$$\gamma = \nu(2x + y - d). \quad (2.19)$$

Reunindo os resultados obtidos até aqui podemos escrever que

$$\begin{aligned} 2 &= \alpha + 2\beta + \gamma \\ \Delta &= \beta + \gamma. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Próximo ao ponto crítico quântico, o tempo escala da forma  $\tau' = b^z \tau$ , que define o expoente dinâmico  $z$ . O caráter quântico das flutuações críticas nos permite relacionar  $z$  ao expoente  $y$  que governa a escala da constante de acoplamento  $J$  no ponto crítico quântico. Note que

$$\Delta E' = b^{-y} \Delta E$$

enquanto

$$\Delta \tau' = b^z \Delta \tau.$$

Uma vez que a relação de incerteza  $\Delta E \Delta \tau \geq \hbar$  é invariante por escala

$$\Delta E' \Delta \tau' = b^{(z-y)} \Delta E \Delta \tau \geq \hbar$$

e portanto  $y = z$ . E a relação de hiperescala quântica pode ser escrita como

$$2 - \alpha = \nu(d + z). \quad (2.21)$$

Nesta relação a dimensão  $d$  é substituída por  $d_{eff} = d + z$ , que tem um papel fundamental de dimensionalidade efetiva. Este desvio na dimensionalidade tem consequências importantes para transições de fase quânticas:

- A relação implica que os expoentes do sistema quântico são os mesmos dos seus correspondentes clássicos em  $d_{eff} = d + z$  dimensões [98]. Por exemplo, para o modelo de Ising em um campo transversal e  $d = 1$ , os expoentes críticos associados aos pontos fixos em  $T = 0$  assumem os valores,  $\beta = 1/8$ ,  $\alpha = 0$ ,  $\nu = 1$ ,  $\gamma = 1.75$ , que podem ser identificados como os expoentes críticos exatos obtidos por Onsager para o modelo de Ising clássico em duas dimensões. Então neste caso esperamos  $z = 1$ , que de fato é encontrado [92, 99].
- Uma vez que  $d_{eff}$  é acrescida, pode alcançar a dimensão crítica,  $d_c$ , acima da qual as flutuações podem ser ignoradas e a teoria de campo médio fornece uma descrição apropriada do sistema. Neste caso os expoentes críticos assumem valores típicos de campo médio ou Gaussianos [98].

A fim de finalizar nossa discussão das propriedades de escala em temperatura nula, vamos analisar algumas propriedades da função de correlação para  $T = 0$ . Sabe-se que o teorema flutuação-dissipação fornece a seguinte relação entre a susceptibilidade estática  $\chi(q)$  e a função de correlação  $S(q, \omega)$  em  $T = 0$  [94]:

$$\chi(q) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{S(q, \omega)}{\omega}. \quad (2.22)$$

A singularidade de  $\chi(q = 0) \propto |g|^{-\gamma}$  (para um ferromagneto) define o expoente  $\gamma$ . Por outro lado, a função de correlação estática é dada por

$$S(q) = \int d\omega S(q, \omega) \quad (2.23)$$

e

$$S(q = 0) \propto |g|^{-\gamma_s}, \quad (2.24)$$

que define  $\gamma_s$ . Para temperaturas finitas, temos  $\chi T = S(q = 0)$  e  $\gamma = \gamma_s$ . Entretanto, em  $T = 0$  o resultado é diferente. Vamos considerar o *ansatz* de escala para  $S(q, \omega)$  que define o expoente  $\eta$ :

$$S(q, \omega) = \xi^{2-\eta} D(q\xi, \omega\xi^z).$$

Das expressões de escala, obtemos as relações

$$\gamma_s = (2 - z - \eta)v = \gamma - \nu z \quad (2.25)$$

e

$$2\beta = \nu(d + z - 2 + \eta) \quad (2.26)$$

em temperatura nula.

### 2.3.3 Extensão para Temperaturas $T \neq 0$

Estenderemos as discussões da teoria de escala em  $T = 0$  para temperaturas finitas porém baixas. Agora a temperatura é um parâmetro do sistema e é normalizada pela energia característica ou constante de acoplamento em  $T = 0$ . Desta forma, podemos escrever que

$$\left(\frac{T}{J}\right)' = b^z \left(\frac{T}{J}\right). \quad (2.27)$$

Formalmente a temperatura renormalizada pode ser pensada como um campo que renormaliza sob uma transformação de escala de acordo com a Eq. 2.27. É interessante considerar três possibilidades dependendo dos valores assumidos por  $z$ :

- $z > 0$ : Neste caso o fluxo das equações do grupo de renormalização está distante de  $T = 0$ . Na linguagem do Grupo de Renormalização dizemos que a temperatura é um campo relevante. Este é o caso para o modelo de Ising em um campo transversal ( $y = z = 1$ ) e para outros problemas de muitos corpos [91].

- $z = 0$ : Este caso é caracterizado pelo surgimento de correções logarítmicas. Tais situações ocorrem, por exemplo, no ponto fixo isotrópico do ferromagneto de Heisenberg anisotrópico em duas dimensões.
- $z < 1$ : Esta é uma situação peculiar que pode ocorrer uma redução dimensional ( $d_{eff} < d$ ) e dá origem a uma solução crítica anômala para a temperatura finita de transição controlada pelo ponto fixo  $T = 0$ . Este é o caso do ferromagneto de Ising em um campo aleatório para  $d > 2$  [100].

Vamos agora analisar como a temperatura aparece nas funções de escala. Para a função de correlação dependente da temperatura, temos

$$\xi = |g|^{-\nu} f_{\xi} \left[ \frac{T/J}{|g|^{\nu z}}, \frac{H/J}{|g|^{\Delta}} \right], \quad (2.28)$$

onde  $f_{\xi}(q, p)$  é uma função de escala.

Para a densidade de energia livre, encontramos

$$f = |g|^{2-\alpha} f_E \left[ \frac{T/J}{|g|^{\nu z}}, \frac{H/J}{|g|^{\Delta}} \right], \quad (2.29)$$

onde  $\Delta = \beta + \gamma$  e usamos  $y = z$ .

Note que na Eq. 2.29 há uma característica interessante, i.e., o surgimento de um expoente crítico dinâmico em uma quantidade termodinâmica estática, a energia livre. Esta é uma marca característica das transições de fase quânticas.

Agora, iremos discutir a linha de crossover e o expoente  $\phi = \nu z$ . Para isso consideraremos o modelo de Ising bidimensional em um campo transverso. É possível fazer uma expansão das equações do Grupo de Renormalização para os parâmetros do modelo, em  $T = 0$ , próximo ao ponto crítico  $K_c$ , associado com a transição de fase quântica [91]. Essa expansão tem a forma de uma relação de recorrência, dada por

$$K_{n+1} = b^a (K_n - K_c) + K_c, \quad (2.30)$$

onde  $K_0 = h/J$  e  $K_c = (h/J)_c$ . Ou seja, esta equação descreve a mudança da razão entre o campo transverso e a constante de acoplamento, próximo ao ponto crítico, quando a escala de comprimento do sistema muda por um fator de  $b$ . Note que para  $K_0 = K_c$ , obtemos  $K_1, K_2, \dots, K_N = K_c$ .

Para baixas temperaturas, podemos generalizar a Eq 2.30, da seguinte forma

$$K_{n+1} = b^a (K_n - K_c) + K_c - \tilde{T}_n^2 \quad (2.31)$$

$$\tilde{T}_{n+1} = b^z \tilde{T}_n, \quad (2.32)$$

onde  $\tilde{T} = (T/J)$ . Iterando as relações de recorrência, temos

$$K_1 = b^a(K_0 - K_c) + K_c - \tilde{T}_0^2 \quad (2.33)$$

$$\tilde{T}_1 = b^z \tilde{T}_0 \quad (2.34)$$

$$K_2 = b^a(K_1 - K_c) + K_c - \tilde{T}_1^2 \quad (2.35)$$

$$\tilde{T}_2 = b^z \tilde{T}_1. \quad (2.36)$$

podemos escrever

$$K_2 = b^{2a}(K_0 - K_c) + K_c - b^a \tilde{T}_0^2 - b^{2z} \tilde{T}_0^2. \quad (2.37)$$

Repetindo esta iteração  $n$  vezes, obtemos a relação

$$K_n = K_c + b^{na}(K_0 - K_c - a_0 \tilde{T}_0^2) + a_0 b^{2nz} \tilde{T}_0^2,$$

onde  $a_0 = 1/(b^a - b^{2z})$ ,  $K_0 = h/J$  e  $\tilde{T}_0 = T/J$ . Fazendo  $l = b^n$ ,

$$K_l = K_c + l^a(K_0 - K_c - a_0 \tilde{T}_0^2) + a_0 l^{2z} \tilde{T}_0^2. \quad (2.38)$$

Uma vez que  $l$  é arbitrário, podemos repetir o procedimento de escala até

$$l^a(K_0 - K_c - a_0 \tilde{T}_0^2) = 1$$

onde definimos o comprimento de correlação,  $l = \xi$ :

$$\xi = \frac{1}{(K_0 - K_c - a_0 \tilde{T}_0^2)^{\nu}} \propto [h - h_c(\tilde{T})]^{-\nu},$$

com  $h_c(T) = h_c + a_0 T^2$ . Substituindo a última expressão na Eq. 2.38, obtemos que em escalas de comprimento  $\xi$ , pode-se escrever

$$K_\xi = K_c + 1 + a_0 \left( \frac{\tilde{T}}{[h - h_c(T)]^{\nu z}} \right)^2. \quad (2.39)$$

Vamos considerar a região não crítica do diagrama de fase,  $(h/J) > (h/J)_c$ , onde nenhuma quantidade física diverge. Note que se  $\tilde{T}/[h - h_c(T)]^{\nu z} \ll 1$ ,  $K_\xi$  é uma constante independente da temperatura. Entretanto se,  $\tilde{T}/[h - h_c(T)]^{\nu z} \gg 1$ ,  $K_\xi$  será uma quantidade que possui uma dependência com a temperatura. O que também é verificado para uma função de escala qualquer  $f(K_\xi)$ . Portanto, a linha

$$T_{cross} = (h - h_c)^\phi, \quad (2.40)$$

onde  $\phi = \nu z$ , representa uma linha de crossover que separa dois regimes diferentes para o comportamento de  $K_\xi$  ou qualquer função de escala  $f(K_\xi)$ , na parte não crítica do diagrama de fase.

Vale salientar que a existência de uma linha de crossover na região não crítica do diagrama de fase associada com o ponto crítico quântico, é uma característica geral das transições de fase quânticas. Entretanto, qual é o significado desta linha, uma vez que não há transição de fase ocorrendo ao longo dela? Considere uma quantidade física  $\Upsilon$  escrita de uma forma invariante por escala, sendo dada por

$$\Upsilon = |g|^{-\nu} f(T/T_{cross}), \quad (2.41)$$

onde  $T_{cross} = |g|^{\nu z}$  e  $g = 0$  define o ponto crítico. Tomando a derivada com respeito à temperatura, obtemos  $\partial\Upsilon/\partial T = |g|^{-\nu-\nu z} f'(t)$  onde  $f'(t)$  é a derivada da função de escala  $f(t)$  com respeito a  $t = T/T_{cross}$ . Fazendo  $\partial\Upsilon/\partial T = 0$  para encontrar a temperatura  $T_m$  que extremiza  $\Upsilon$ , temos  $f'(t_m) = 0$ . Assim, obtemos  $t_m = C$ , ou seja,  $T_m = CT_{cross} = C|g|^{\nu z}$  implicando que o extremo de  $\Upsilon$  é proporcional à linha de crossover. O que também pode ser verificado para pontos de inflexão. Portanto, quaisquer singularidades em quantidades físicas, e.g., máximos, mínimos, na região não crítica do diagrama de fase, serão proporcionais às linhas de crossover, fazendo com que esta linha seja acessível experimentalmente.

### 2.3.4 A Linha Crítica e o Expoente $\Psi$

Na seção anterior discutimos que no regime de baixas temperaturas, o comprimento de correlação pode ser escrito como

$$\xi = \frac{1}{(K_0 - K_c - a_0 T_0^2)^\nu}. \quad (2.42)$$

Além disso, calculamos a equação para a linha crítica,  $T_c$ , no diagrama de fase  $T \times g$ , como sendo o conjunto dos valores de  $T$  nos quais o comprimento de correlação diverge, i.e.  $K_0 - K_c - a_0 T_c^2 \equiv g(T_c) = 0$ , desta forma, podemos escrever que

$$T_c \propto |h/J - (h/J)_c|^{1/2} = |g(T=0)|^{1/2}.$$

A linha crítica, em geral, é dada por  $T_c = |g|^\Psi$ . No caso da Eq. 2.42 temos  $\Psi = 1/2$ .

Na Fig. 20, é mostrado um esquema do diagrama de fases no plano  $T \times g$  para o modelo do Ising em um campo transverso para  $d > 1$ . As setas ilustram a direção do fluxo das equações do grupo de renormalização. Há algumas características interessantes nesse diagrama que podemos destacar. Primeiramente, note que a natureza do ponto fixo associado ao ponto crítico quântico (QCP) em  $g = 0$  e  $T = 0$  é totalmente instável, uma vez que o fluxo está sempre saindo deste ponto. Em segundo lugar, observe o fluxo ao longo da linha crítica, i.e., das transições de fase em temperaturas finitas  $T_c(g)$ . O comportamento crítico ao longo desta linha é governado por outro ponto fixo, e este por sua vez controla o comportamento crítico em  $T \neq 0$ , uma vez que o fluxo ao longo da

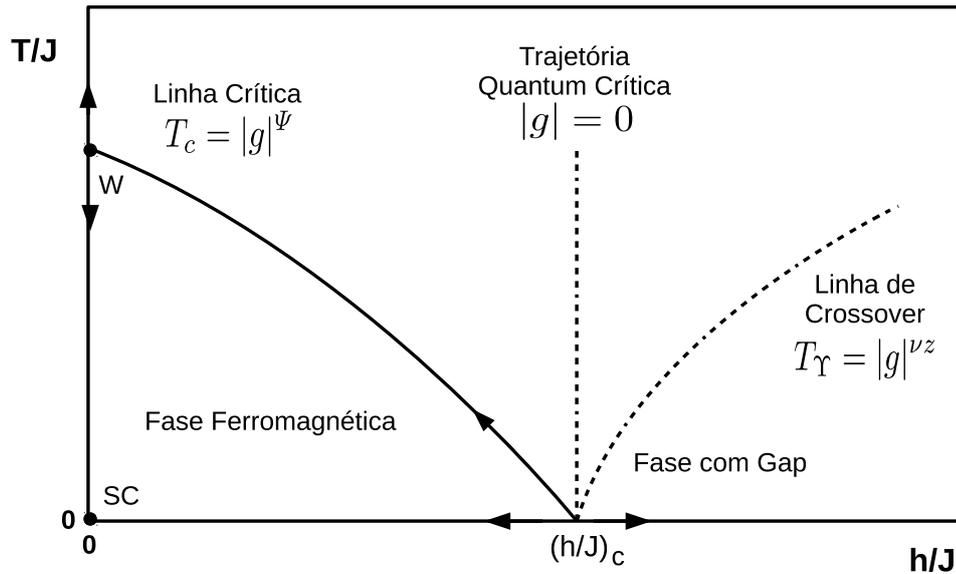


Figura 20 – Diagrama de fases do modelo de Ising em um campo transversal para  $d > d_L = 1$ . As setas indicam o fluxo das equações do grupo de renormalização. Note que o ponto fixo  $T = 0$  é instável. O ponto fixo  $W$  governa as transições na linha crítica  $T_c = |g|^\Psi$ , onde  $g = h/J - (h/J)_c$ . Os expoentes associados a este ponto fixo, pertencem a uma classe de universalidade distinta aos que estão associados com o ponto crítico quântico (QCP). Além disso, mostramos o ponto fixo  $SC$  (do inglês, Strong Coupling), que é o atrator da fase ferromagnética.

linha crítica se distancia do QCP. Sendo assim, os expoentes críticos em  $T \neq 0$ , associados com a transição de fase térmica, são em geral diferentes aos expoentes associados ao QCP, i.e., eles pertencem a outra classe de universalidade. Além disso, existem situações onde a linha crítica é governada pelo mesmo expoente da linha de crossover,  $\Psi = \nu z$ , e.g., no modelo de Ising bidimensional em um campo transversal.

É importante observar que ao estender a análise do diagrama de fases quânticas para diagramas de fases térmicas, devemos levar em consideração a *dimensão crítica inferior*,  $d_L$ , do sistema, i.e. a dimensão abaixo da qual a transição de fase não ocorre ( $d_L = 1$  para o modelo de Ising em um campo transversal e  $d_L = 2$  para o modelo de Heisenberg). Outro conceito importante é o conceito de *dimensão crítica superior*,  $d_c$ , acima da qual os expoentes críticos se tornam iguais aos expoentes da teoria de campo médio. Em particular, é fácil verificar que a dimensão crítica  $d_c$  das transições de fase quânticas é diferente da obtida em transições de fase térmicas, uma vez que a relação de hiperescala nessas transições são diferentes.

## 2.4 O LÍQUIDO DE LUTTINGER

Um líquido de Luttinger [2, 26, 34, 101, 102], ou líquido de Tomonaga-Luttinger, é um modelo teórico que descreve elétrons interagentes (ou outros férmions) em um condutor unidimensional (por exemplo, fios quânticos, como nanotubos de carbono). Esse modelo teórico é necessário em sistemas quânticos de baixa dimensionalidade (aqui qualquer sistema acima de 1D é de alta dimensão), uma vez que a teoria do líquido de Fermi proposta por Landau [103], que descreve com notório sucesso sistemas de férmions interagentes em 2 ou mais dimensões, não proporciona uma boa descrição para sistemas unidimensionais. De fato, este era um sinal de que a física em uma dimensão era muito diferente e exigia portanto uma nova teoria.

Essa teoria foi proposta pela primeira vez por Tomonaga [104] em 1950. O modelo mostrou que sob certas restrições, as interações de segunda ordem entre elétrons poderiam ser modeladas como interações bosônicas. Em 1963, Luttinger [101] reformulou a teoria em termos de ondas de Bloch e mostrou que as restrições propostas por Tomonaga eram desnecessárias para tratar as perturbações da segunda ordem como bósons. Mas a solução do modelo estava incorreta; a solução correta foi dada por Mattis e Lieb [105] em 1965. Esta solução resume todas as divergências encontradas na teoria de perturbação. O espectro de excitação do modelo diagonalizado é descrito em termos dos modos coletivos de bósons não interagentes. O modelo de Luttinger foi utilizado por Haldane [102] como base para a descrição de uma teoria geral de um gás de Fermi interagente em uma dimensão e que foi chamada de Teoria do Líquido de Luttinger. O nome Líquido de Luttinger foi escolhido para refletir a ideia de que tais sistemas têm um espectro de excitação de baixa energia similar ao espectro do modelo de Luttinger, mas com interações entre as excitações elementares. Isso se assemelha com a relação entre a teoria do Líquido de Fermi e o modelo solúvel em que é baseado, o gás de férmions livres.

No líquido de Luttinger existem apenas excitações coletivas (análogas às ondas sonoras) caracterizadas por uma velocidade  $u$ , que para férmions não interagentes corresponde à velocidade de Fermi ( $v_F$ ), mas assume uma forma diferente quando temos interação no sistema. A existência de excitações deste tipo é bem geral, se aplica a outros sistemas físicos de bósons, em particular, os mágnons em 1D. Em uma dimensão, devido às flutuações quânticas, o sistema apresenta tipicamente uma ordem de quase longo alcance, mesmo em temperatura nula, com funções de correlação apresentando um decaimento tipo lei de potência. Para uma cadeia antiferromagnética, por exemplo, com uma anisotropia entre o eixo  $z$  e o plano  $xy$ , as funções de correlação, na ausência

de um campo magnético externo, são dadas por [26]:

$$\begin{aligned}\langle S^z(x)S^z(0) \rangle &= \frac{1}{x^2} + (-1)^x A_z \left(\frac{1}{x}\right)^{2K} \\ \langle S^-(x)S^+(0) \rangle &= (-1)^x A_x \left(\frac{1}{x}\right)^{\frac{1}{2K}} + B_x \left(\frac{1}{x}\right)^{\frac{1}{2K}+2K}.\end{aligned}\quad (2.43)$$

O número  $K$  é um parâmetro adimensional que depende apenas das interações. As amplitudes  $A$  e  $B$  são não universais e dependem do modelo e das interações.

O que foi discutido acima e as Eqs. 2.43 constituem a base de um líquido de Luttinger que descreve o comportamento geral de um sistema unidimensional interagente [102]. As propriedades assintóticas são totalmente determinadas através da velocidade  $u$  e do parâmetro de Luttinger  $K$ . O último parâmetro controla o decaimento de todas as funções de correlação, Eq. 2.43, bem como as quantidades termodinâmicas.

Em uma dimensão as excitações individuais (locais) podem ser convertidas em excitações coletivas, o que permite obter excitações com o menor número quântico possível. Para exemplificar, considere uma cadeia magnética, pode-se imaginar que o menor número quântico possível para uma excitação magnética é  $\Delta S^z = 1$ , uma vez que pode-se flipar no mínimo um spin  $1/2$ . O que de fato ocorre em alta dimensão, onde essa excitação, um mágnon, pode se propagar como uma partícula, com uma relação bem definida entre sua energia  $E(q)$  e seu momento  $q$ . Em uma dimensão, o mágnon é formado por duas excitações elementares não-locais [34].

Do ponto de vista experimental, são discutidos em [26] a maioria dos sistemas unidimensionais. Em particular, os isolantes magnéticos são sistemas físicos notadamente interessantes para estudar a física em uma dimensão de sistemas itinerantes. Um sistema de dois estados (e.g., spin  $1/2$ ) pode ser mapeado no modelo de bósons de núcleo duro (HCB) [106]. Por exemplo, no estado antiferromagnético um spin para baixo (spin down) pode ser representado pela ausência de um bóson em um sítio, enquanto que um spin para cima (spin up) pode ser mapeado como a presença do bóson. Os bósons precisam de uma restrição de núcleo duro a fim de limitar o espaço de Hilbert. Assim, uma cadeia de spin é equivalente a bósons saltando em uma rede. O espectro de energia de uma cadeia ladder é mostrado na Fig. 21. Sob um campo magnético aplicado, o singlete e o tripleto de energia  $E_{1,1}$  podem ser usados para o mapeamento:

$$\begin{aligned}S_{i,k}^+ &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(-1)^{i+k}b_i^\dagger \\ S_{i,k}^z &\rightarrow \frac{1}{4}\left[1 + 2\left(b_i^\dagger b_i - \frac{1}{2}\right)\right]\end{aligned}\quad (2.44)$$

onde  $k = 1, 2$  rotula os spins de um dímero e  $i$  a posição dele [19]. Os isolantes magnéticos apresentam características interessantes:

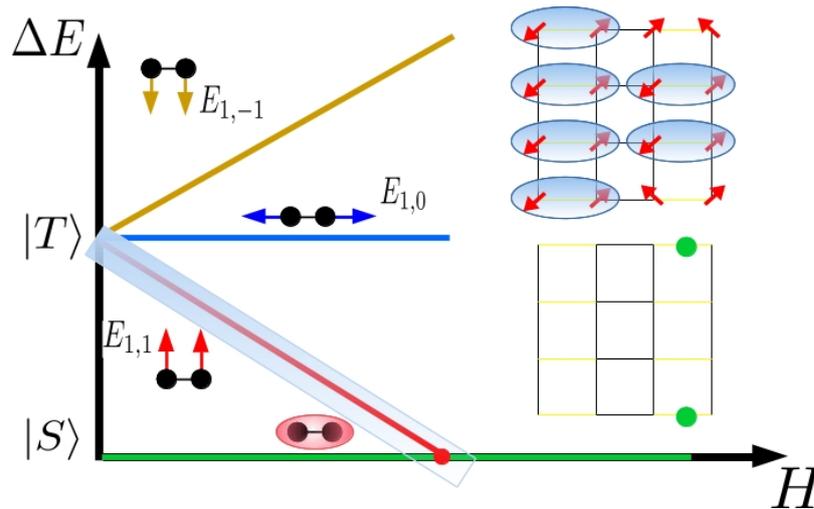


Figura 21 – Espectro de um sistema spins formados por dímeros fracamente acoplados. Na ausência do acoplamento entre os dímeros, onde existem apenas as ligações em amarelo (lado direito da figura), cada dímero é formado por um singlete  $|S\rangle$  (spin total nulo) e um tripleto triplamente degenerado  $|T\rangle$  (spin total igual a 1), ou seja, um estado fundamental e três estados excitados, respectivamente. Quando um campo magnético ( $H$ ) é aplicado a degenerescência do tripleto é quebrada devido ao termo de Zeeman. A energia de um dos tripletos ( $E_{1,1}$ ) decresce com o campo magnético e em um valor de  $H$  este nível de energia cruza com um dos singletos ( $\{\bullet\}$  em vermelho), sofrendo assim uma transição de fase quântica. O problema pode ser mapeado em um problema bosônico em que o singlete é representado pela ausência de um bóson no degrau, enquanto que o tripleto é a presença de um bóson. Quando há o acoplamento entre os dímeros (linhas pretas na rede no lado direito da figura), o tripleto fica itinerante, o que significa que os bósons ( $\{\bullet\}$  em verde no lado direito da figura) podem saltar de um degrau ao próximo, como está ilustrado no lado direito da figura. A linha de tripletos itinerantes (representado pela caixa em azul). Após o primeiro tripleto ser adicionado ao sistema, mais tripletos vão sendo adicionados até a banda de tripletos ser completamente preenchida no final da linha verde (lado esquerdo da figura), sofrendo a segunda transição de fase quântica. Na linguagem dos bósons isto significa que o sistema parte de uma quantidade nula de bósons por degrau (apenas singletos) para um bóson por degrau (totalmente polarizado), ou seja, esses sistemas podem ser representados por um sistema de bósons itinerantes.

- O campo magnético atua como um potencial químico para os bósons; o que permite o uso do campo magnético para controlar a densidade dos bósons, que é medido diretamente através da magnetização. De fato, poder ajustar a densidade de partículas faz delas uma importante ferramenta para examinar a física dos fenômenos críticos, permitindo o ajuste do ponto crítico quântico através do controle da densidade e temperatura [107].
- Em sistemas magnéticos (quando transladados para a linguagem dos bósons)

pode-se medir tanto a função de correlação quanto a densidade, esta última dada por

$$\langle S_j^-(t)S_0^+(0) \rangle \rightarrow (-1)^j \langle b_j(t)b_0^\dagger(0) \rangle \quad (2.45)$$

enquanto a função de correlação densidade-densidade é

$$\langle S_j^z(t)S_0^z(0) \rangle \rightarrow \langle \rho_j(t)\rho_0(0) \rangle \quad (2.46)$$

com o operador densidade para os bósons, sendo dados por  $\rho_j(t) = b_j^\dagger(t)b_j(t)$ .

Esses sistemas permitem examinar vários fenômenos relacionados com bósons. Em altas dimensões, é observada a condensação de Bose-Einstein (BEC) [4, 5]. Além disso, em uma dimensão, foi possível realizar pela primeira vez, através destes sistemas, um teste quantitativo para a física dos líquidos de Luttinger [31, 108, 109]. Outras características esperadas para sistemas unidimensionais também foram observadas, tais como as excitações fracionalizadas [110] e o fator de escala esperado entre frequência e temperatura em um líquido de Luttinger [111]. A Fig. 22 mostra o diagrama de fases

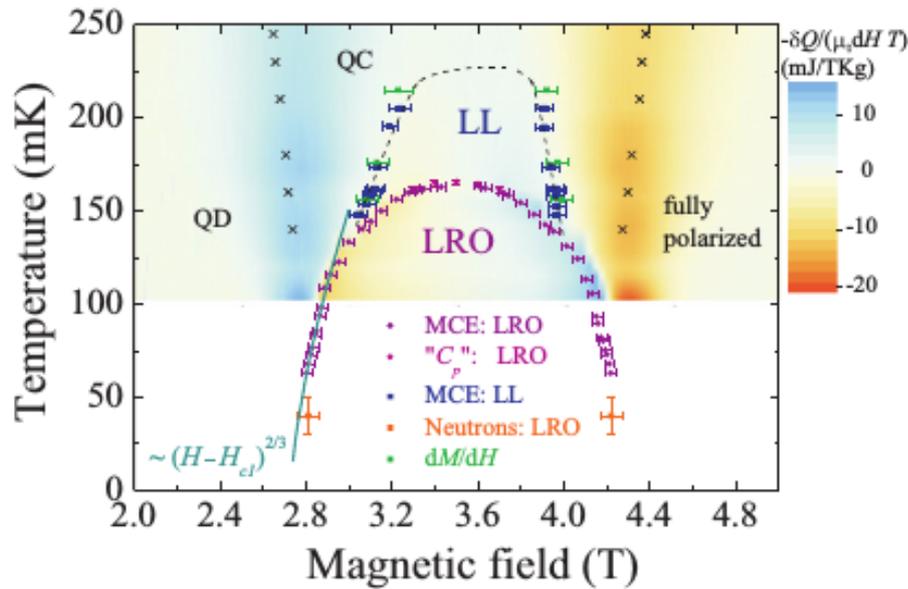


Figura 22 – Diagrama de fase do nitrato de cobre para campos magnéticos aplicados ao longo da direção **b**. A linha pontilhada é uma guia para os olhos. O contorno plotado representa dados de  $-\frac{1}{T}\delta Q_{MCE}(H)/d(\mu_0 H) = dM/dT$ , que é a geração ou absorção de calor devido à mudança do campo magnético. As cruzes representam os máximos locais no calor específico obtidos através de simulações de diagonalização exata. Elas representam o crossover entre as regiões QD (desordenada quânticamente, do inglês quantum disorder), QC (criticalidade quântica, do inglês quantum criticality), e o regime totalmente polarizado. Figura retirada da Ref. [112].

obtido para cadeia antiferromagnética de Heisenberg alternada que mostra o crossover

dimensional de um regime LL unidimensional em uma fase BEC tridimensional pela primeira vez; o nitrato de cobre  $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2.5 \text{D}_2\text{O}$  [112]. O contorno superior da fase ordenada de longo alcance (LRO) foi definida pelos saltos no calor específico. De forma geral, esse diagrama de fase é similar ao que foi obtido para a cadeia ladder  $(\text{Hpip})_2\text{Cu}(\text{Br},\text{Cl})_4$  [5], onde o contorno da fase BEC forma um domo. Além disso, em altas temperaturas, o comportamento LL é identificado. Esse regime apresenta também um domo acima daquele da fase LRO. Em particular, o domo do regime LL apresenta um formato assimétrico.

A teoria do líquido de Luttinger se aplica a uma grande variedade de sistemas unidimensionais, em particular, descreve as fases sem *gap* da cadeia de Haldane e da cadeia de Heisenberg antiferromagnética (HAF) de  $S = 1/2$ . O *gap* de Haldane [113] estimulou diversos trabalhos sobre as cadeias de spins com *gap*. Em particular, quando esses sistemas se tornam sem *gap*, é esperado que a física em baixa dimensão seja similar à da cadeia HAF. Uma característica interessante é que a magnetização da fase sem *gap*, fase esta induzida pelo campo magnético aplicado em cadeias de spins com *gap*, apresenta um mínimo como função da temperatura [23], Fig. 23, que segue uma função universal [23]. O mínimo é similar aos que são esperados da magnetização em função da temperatura para o BEC de magnons. Entretanto, no caso puramente unidimensional não há uma transição de fase em temperaturas finitas. Assim, o mínimo representa um crossover do regime relativístico LL ao regime de alta temperatura governado por uma relação de dispersão clássica. Na fase com *gap* ( $h < h_c$ ), observamos que a magnetização decresce exponencialmente quando  $T \rightarrow 0$ , como esperado. No entanto, na fase sem *gap* ( $h > h_c$ ), as magnetizações mostram um mínimo característico não trivial em baixas temperaturas  $T = T_m$ , que de fato é observado na Fig. 23.

O comportamento da magnetização em função da temperatura da Fig. 23 pode ser compreendido em termos da teoria de férmions livres ou bósons de núcleo duro (HCB), uma vez que em  $h \gtrsim h_c$  é encontrada uma baixa densidade de magnons no sistema [23]. Para  $h \lesssim h_s$  um mapeamento análogo pode ser feito, neste caso o vácuo é o estado totalmente polarizado, onde a magnetização mostra um máximo correspondente ao mínimo do caso  $h \gtrsim h_c$ . Entretanto, esta descrição não é válida na região  $h_c < h < h_s$ , e em baixa temperatura o comportamento da magnetização pode ser compreendido pela teoria do líquido de Luttinger. A expansão da densidade energia livre em função da temperatura é obtida através da teoria de campo conforme e é dada por [114]

$$f = \epsilon_0 - \frac{\pi c}{6v_F} T^2 + \mathcal{O}(T^3), \quad (2.47)$$

onde  $\epsilon_0$  é a energia do estado fundamental,  $v_F$  é a velocidade de Fermi e  $c$  é a carga central (é um número associado a um operador que comuta com todos os outros operadores simétricos, na teoria de campo conforme),  $c = 1$  para a teoria LL. Uma vez que a magnetização é a derivada da energia livre com respeito ao campo magnético,

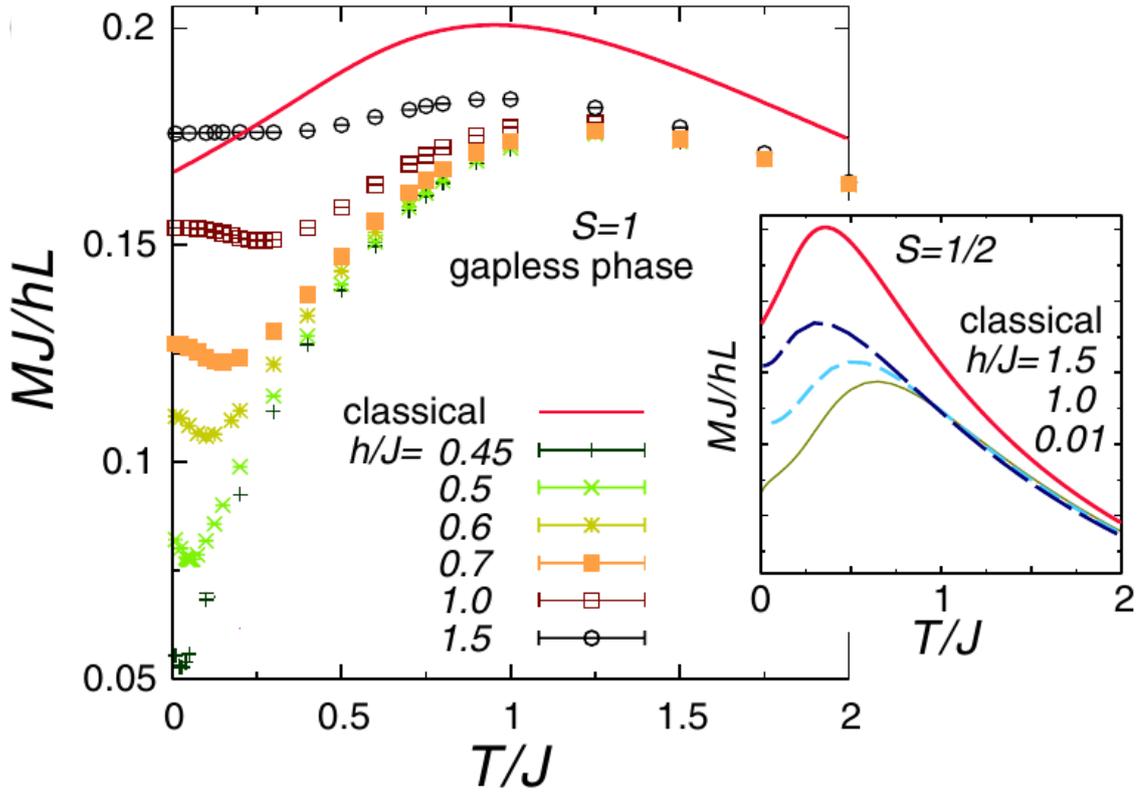


Figura 23 – Magnetização em função da temperatura do modelo de Heisenberg com  $S = 1$  na fase sem gap. A figura inserida mostra a magnetização de  $S = 1/2$  para fins de comparação. Figura retirada da Ref. [23].

temos

$$m = \left( \frac{\partial f}{\partial h} \right)_T = m_0 - \frac{\pi}{6v_F^2} \left( \frac{\partial v_F}{\partial h} \right)_T T^2 + \mathcal{O}(T^3). \quad (2.48)$$

Assim, a variação da magnetização depende do sinal de  $\partial v_F / \partial h$ . A velocidade de Fermi como função do campo magnético está ilustrada na Fig. 24. A velocidade de Fermi aumenta rapidamente acima de  $h = h_c$ , encontra um máximo em torno de  $h = h_m$ , e então decresce até  $h = h_s$ . No máximo da velocidade ( $h = h_m$ ), as principais correções são da ordem  $\mathcal{O}(T^3)$ , e a magnetização se torna plana. Ainda que o campo magnético esteja distante de  $h_m$ , a velocidade de Fermi,  $v_F$ , depende de  $h$ , embora que agora esta dependência seja muito fraca dentro da região  $h_c \lesssim h \lesssim h_m$ , onde a magnetização se torna quase plana em baixas temperaturas, o que de fato é consistente com os resultados mostrados nas Fig. 23 e Fig. 25.

Os extremos na curva da magnetização marcam a temperatura acima da qual as previsões baseadas no teoria do líquido de Luttinger falham. Isso pode ser interpretado como um crossover do regime LL com dispersão linear para um estado governado por relações de dispersão não relativísticas,  $\epsilon \propto k^2$ , indicado por uma seta na Fig. 27 (a). No regime LL surge uma ordem de quase longo alcance [40, 115]. Em  $h = h_c = \Delta$  há uma

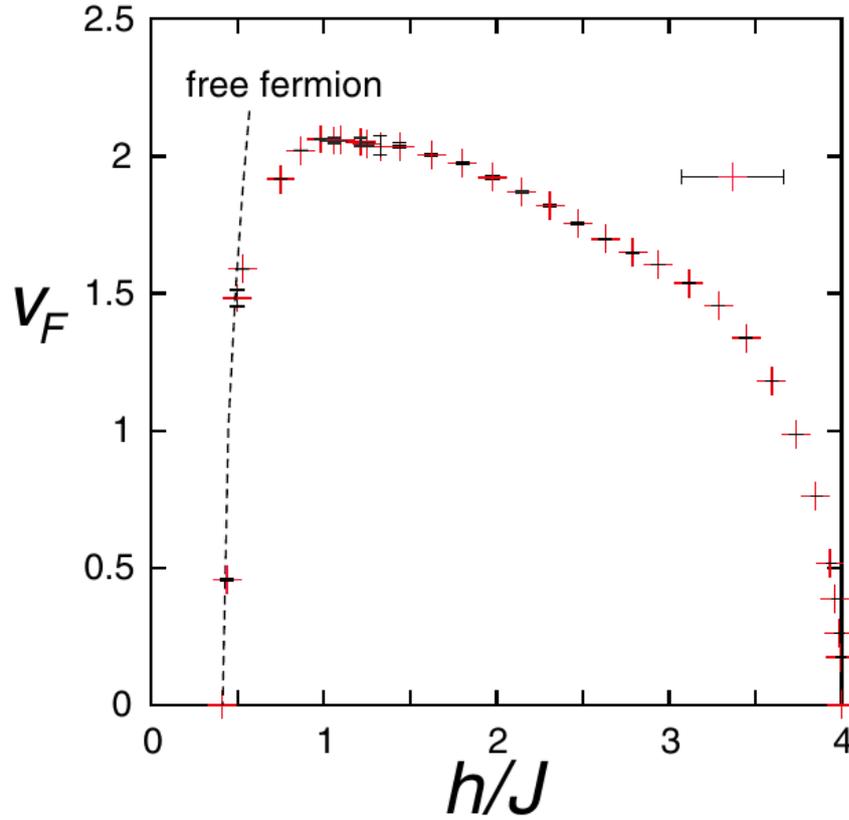


Figura 24 – Velocidade de Fermi,  $v_F$ , como função do campo magnético. A linha tracejada mostra o resultado da teoria de férmions livres. Figura retirada da Ref. [23].

baixa densidade de magnons no sistema e pode ser exatamente mapeado numa teoria de férmions livres, com relação de dispersão dada por [40, 115, 116]

$$E(k) \approx \Delta + \frac{k^2}{2m_{ef}} - hS^z, \quad (2.49)$$

onde  $1/m_{ef}$  é a curvatura de banda, e  $v_0 = \sqrt{\Delta/m_{ef}}$  corresponde à velocidade da onda. Quando  $h \gtrsim h_c$  o sistema ainda é aproximado pela teoria de férmions livres, e a magnetização é igual ao número de partículas

$$m = \sqrt{\frac{m_{ef}}{2\pi^2}} \int_0^\infty d\epsilon D(\epsilon) f(\epsilon - \mu), \quad (2.50)$$

onde  $\epsilon = k^2/2m_{ef}$ ,  $\mu = h - \Delta$ , e

$$f(\epsilon - \mu) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1} \quad (2.51)$$

é a função distribuição de Fermi. Com  $D(\epsilon) = \epsilon^{-1/2}$ , sendo a densidade de estados de um gás de elétrons livres em uma dimensão, podemos integrar a Eq. 2.50, obtendo assim sua solução exata

$$m = \sqrt{\frac{m_{ef}}{2\pi^2}} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{-1/2}}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1} d\epsilon, \quad (2.52)$$

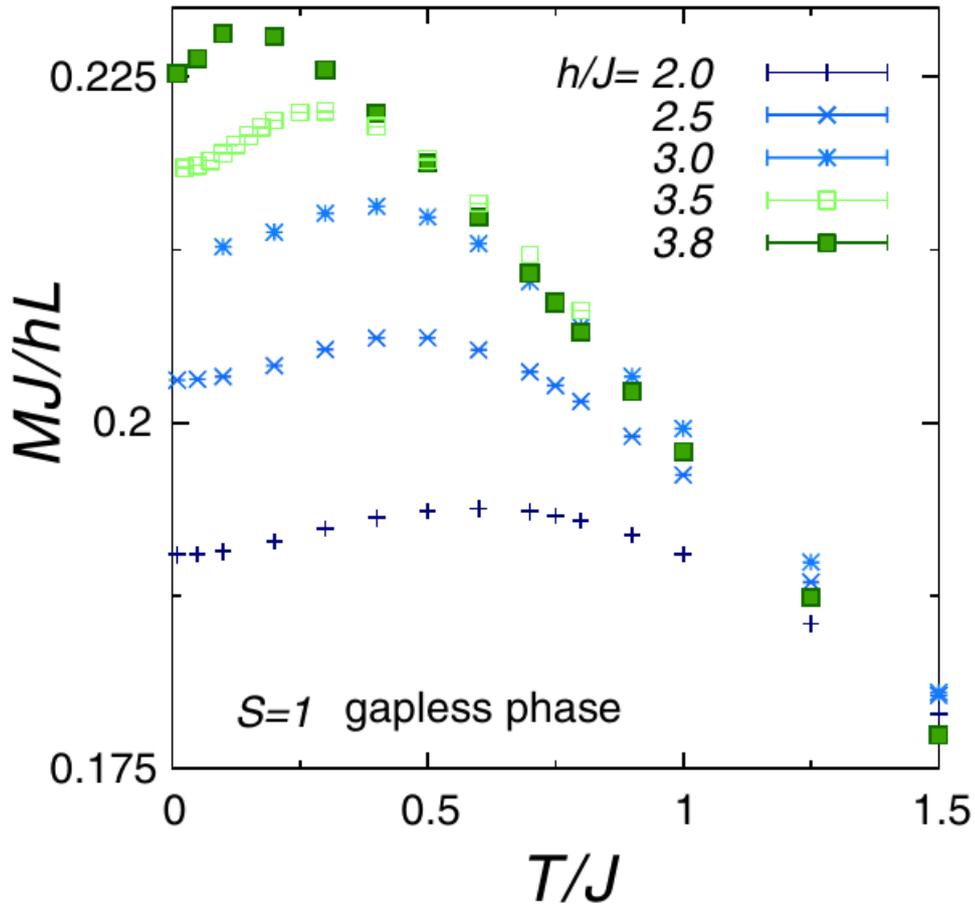


Figura 25 – Magnetização em função da temperatura do modelo de Heisenberg  $S = 1$  na fase sem *gap* nas proximidades do campo de saturação ( $h \gtrsim h_s$ ) em vários valores de  $h/J$ . Figura retirada da Ref. [23].

fazendo a mudança de variável  $t = \beta\epsilon$ , escrevemos que

$$m = \sqrt{\frac{m_{ef}}{2\pi^2\beta}} \int_0^\infty \frac{t^{-1/2}}{e^t/e^{\beta\mu} + 1} dt = \sqrt{\frac{m_{ef}}{2\pi^2\beta}} \int_0^\infty \frac{t^{s-1}}{e^t/z + 1} dt.$$

Em particular, a integral

$$I = \int_0^\infty \frac{t^{s-1}}{e^t/z + 1} dt$$

pode ser escrita da forma  $I = -\Gamma(s)L_{i_s}(-z)$ , onde  $s = 1/2$  e  $z = e^{\beta\mu}$ , com  $L_{i_s}(-z)$  sendo a função polilogarítmica, ou seja,  $L_{i_s}(x) = \sum_l x^l/l^s$ . Portanto,

$$m = -\sqrt{\frac{m_{ef}}{2\pi\beta}} L_{i_{s=1/2}}[-e^{\beta(h-\Delta)}]. \quad (2.53)$$

Na Fig. 26 mostramos a forma da Eq. 2.53, que reproduz bem o mínimo da magnetização encontrado na Fig. 23. Um mapeamento análogo pode ser realizado para o estado totalmente polarizado para campos ligeiramente abaixo do campo magnético de saturação ( $h \lesssim h_s$ ).

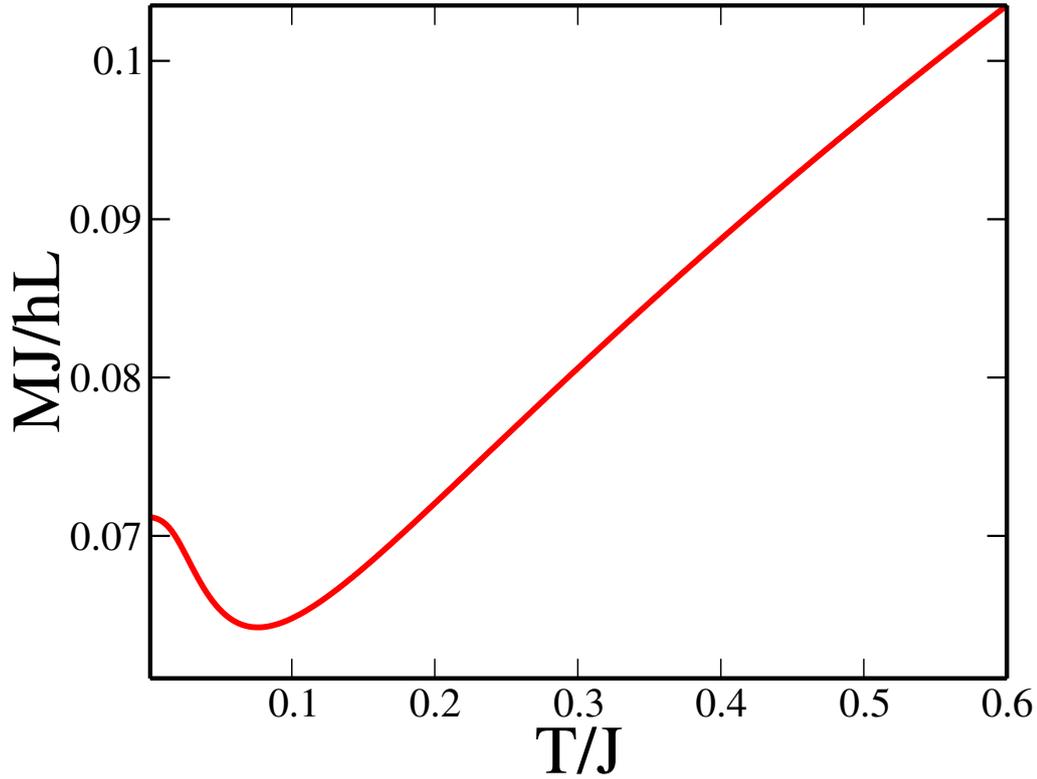


Figura 26 – Resultado obtido através da teoria de férmions livres para  $h - \Delta = 0.1$ , em acordo qualitativo com os resultados mostrados na Fig. 23.

O *gap* e o  $T$  de crossover, pois é um extremo da magnetização, pode ser estimado minimizando a Eq. 2.53, ou seja:

$$\left(\frac{\partial m}{\partial T}\right)_{T=T_m} = 0 \Rightarrow 2T \frac{\partial}{\partial T} L_{i_s=1/2} \left(-e^{\mu/T}\right)_{T=T_m} = -L_{i_s=1/2} \left(-e^{\mu/T_m}\right),$$

fazendo  $x = \mu/T$ , podemos escrever que

$$2x_m = \frac{L_{i_s=1/2} \left(-e^{x_m}\right)}{L_{i_s=-1/2} \left(-e^{x_m}\right)} \quad (2.54)$$

onde  $x_m = \mu/T_m$ . A solução desta equação é dada por  $x_m = a \sim 0.76238$ , logo

$$T_m = a(h - \Delta), \quad (2.55)$$

onde  $T_m$  é a temperatura de crossover.

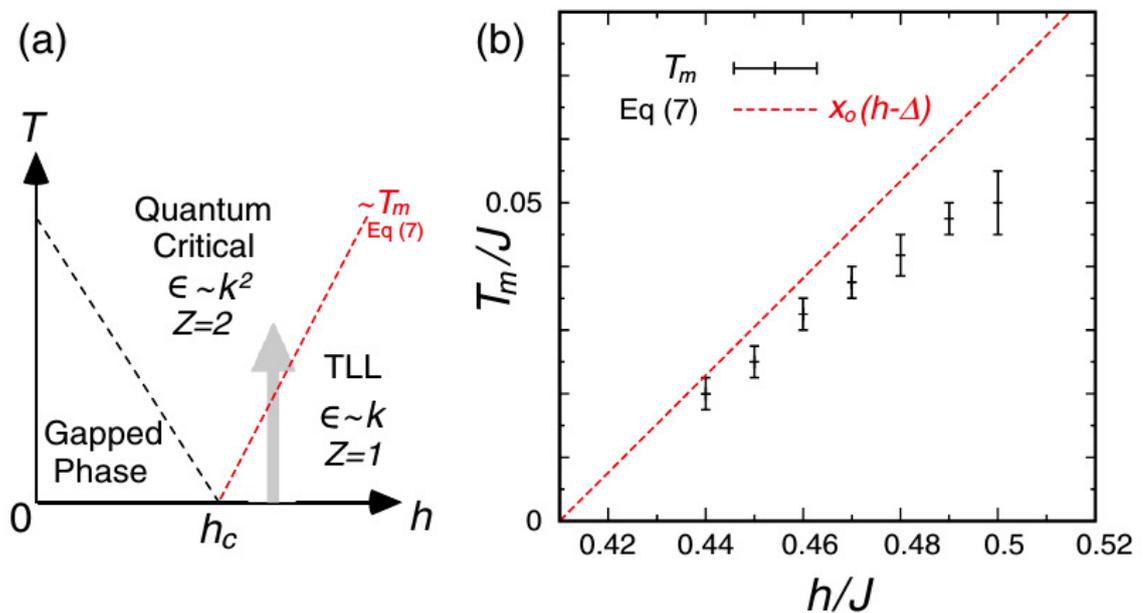


Figura 27 – a) Diagrama de fase para cadeias de spins com *gap*. As linhas tracejadas indicam os crossovers. Aquele entre a região governada pelo líquido de Luttinger e o regime de criticalidade quântica, dado por  $T \sim h - h_c \sim T_m$ . b) O ajuste dos resultados do QMC com a Eq. 2.55. O *gap*  $\Delta$  pode ser estimado. Figura retirada da Ref. [23].

## 3 TEORIA DE ONDAS DE SPIN EM MAGNETOS DE HEISENBERG

Em 1930 Felix Bloch [117, 118] mostrou a partir de 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 é quantizada e à partícula correspondente damos o nome de mágnon. Posteriormente, Holstein e Primakoff obtiveram a magnetização com um campo magnético aplicado, considerando as interações dipolo-dipolo entre os mágnons [106]. A teoria para o estado ferromagnético foi estendida para o estado antiferromagnético (Néel) por Anderson [119], Kubo [120] e por Oguchi [121] e para o estado ferrimagnético [122]. A derivação semiclássica inicial foi sofisticada em termos das linguagens bosônicas de Holstein-Primakoff [106] e de Dyson-Maleev [123, 124].

Cadeias ferrimagnéticas, em particular, as cadeias de spins alternados ( $s, S$ ) [66, 70, 73, 77, 79], 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.

Iniciaremos com uma breve discussão sobre a teoria de ondas de spin em ferromagnetos e antiferromagnetos de Heisenberg, com a finalidade de obtermos uma maior familiaridade com as técnicas analíticas necessárias para abordarmos o problema: as ondas de spins em ferrimagnetos alternados ( $s, S$ ). Abordaremos a teoria de ondas de spins [74], não-interagente ou livre (FSW) e interagente (ISW), em ferrimagnetos de Heisenberg com acoplamentos antiferromagnéticos na cadeia de spins mistos ( $s, S$ ), em particular, para a cadeias spins alternados ( $s = 1/2, S$ ). Especialmente, discutiremos um modelo efetivo para estudar o comportamento dos ferrimagnetos alternados na presença de um campo magnético. Enquanto que a termodinâmica desses ferrimagnetos será estudada através de uma restrição na magnetização proposta por Takahashi [125] e utilizada por Yamamoto [70, 71, 73] para estudar o comportamento em baixa temperatura de ferrimagnetos de spins mistos.

### 3.1 FERROMAGNETOS

Ferromagnetos são materiais magnéticos que, na ausência de um campo magnético, apresentam magnetização não nula (magnetização espontânea) abaixo de uma temperatura crítica  $T_c$  (temperatura de Curie). As excitações de mais baixa energia desses materiais podem ser modeladas através do hamiltoniano de Heisenberg, dado

por [75]

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

que leva em consideração apenas as contribuições da interação de troca entre primeiros vizinhos e o termo Zeeman. O termo de acoplamento  $J < 0$  (ferromagnético) é a integral de troca que favorece o alinhamento ferromagnético,  $\mu_0 = \frac{g}{2}\mu_B$  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,  $\vec{S}_j$  é o operador momento angular do íon no sítio  $j$  e  $H$  é o campo magnético aplicado. 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 o estado completamente ordenado dado por  $|0\rangle = \otimes_j |S_j\rangle$ , com  $|S_j\rangle$  representando um estado de componente  $z$  máximo:

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

### 3.1.1 Hamiltoniano bosônico

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  $a_j^\dagger, a_j$  podem ser definidos pela transformação de Holstein-Primakoff:

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

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

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

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

Das Eq. 3.2 e Eq. 3.3, podemos encontrar uma relação para  $S_j^z$ , uma vez que

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

$$\begin{aligned} S_j^x &= \frac{1}{2} (S_j^+ + S_j^-) \\ S_j^y &= \frac{1}{2i} (S_j^+ - S_j^-), \end{aligned} \quad (3.4)$$

obtemos

$$(S_j^z)^2 = S(S+1) - \frac{1}{2} (S_j^+ S_j^- + S_j^- S_j^+).$$

E das

$$\begin{aligned} S_j^+ S_j^- &= 2S \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} a_j a_j^\dagger \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} \\ S_j^- S_j^+ &= 2S a_j^\dagger \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} a_j, \end{aligned} \quad (3.5)$$

podemos escrever

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

Como, das relações de comutação, temos  $a_j^\dagger a_j = a_j a_j^\dagger - 1$ , 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,

$$(S_j^z)^2 = (S - a_j^\dagger a_j)^2 \quad (3.6)$$

desta forma, obtemos uma expressão exata para  $S_j^z$ :

$$S_j^z = S - a_j^\dagger a_j. \quad (3.7)$$

Vamos agora escrever os operadores  $a_j^\dagger, a_j$  em termos das variáveis de magnon (ou variáveis de ondas de spin)  $b_{\vec{k}}^\dagger, b_{\vec{k}}$ , através da transformada de Fourier, definida por:

$$b_{\vec{k}}^\dagger = N^{-1/2} \sum_j e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} a_j^\dagger \quad \text{e} \quad b_{\vec{k}} = N^{-1/2} \sum_j e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} a_j, \quad (3.8)$$

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

$$a_j^\dagger = N^{-1/2} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} b_{\vec{k}}^\dagger \quad \text{e} \quad a_j = N^{-1/2} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} b_{\vec{k}}. \quad (3.9)$$

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,

$$[b_{\vec{k}}, b_{\vec{k}'}^\dagger] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \quad (3.10)$$

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 magnon de vetor de onda  $\vec{k}$  no estado fundamental. É conveniente expressar as Eq. 3.2, Eq. 3.3 e Eq. 3.7 em termos destas variáveis de ondas de spin. Em particular, estamos interessados em estados de baixa energia do sistema, desta forma, 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

$$\left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} \simeq 1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{4S}. \quad (3.11)$$

Sendo assim, das Eq. 3.9 e Eq. 3.11, temos:

$$S_j^+ \simeq (2S)^{1/2} \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{4S}\right) a_j = (2S)^{1/2} \left(a_j - \frac{a_j^\dagger a_j^2}{4S}\right) \Rightarrow \quad (3.12)$$

$$\simeq \left(\frac{2S}{N}\right)^{1/2} \left[ \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} b_{\vec{k}} - (4SN)^{-1} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{k}''} e^{i(\vec{k}-\vec{k}'-\vec{k}'')\cdot\vec{r}_j} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'} b_{\vec{k}''} \right]. \quad (3.13)$$

Analogamente,

$$S_j^- \simeq \left(\frac{2S}{N}\right)^{1/2} \left[ \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} b_{\vec{k}}^\dagger - (4SN)^{-1} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{k}''} e^{i(\vec{k}+\vec{k}'-\vec{k}'')\cdot\vec{r}_j} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'}^\dagger b_{\vec{k}''} \right]. \quad (3.14)$$

Ainda

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

e

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

temos que

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

com

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

logo

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

Portanto

$$S_z = NS - \sum_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}}, \quad (3.15)$$

que é um resultado exato.

Usando as expressões Eq. 3.4, o hamiltoniano (Eq. 3.1) pode ser escrito em termos das variáveis de ondas de spin:

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

então, usando as transformações em variáveis de ondas de spin das Eq. 3.13, Eq. 3.14 e Eq. 3.15, escrevemos:

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

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

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

obtemos

$$\mathcal{H} = JNzS^2 - 2\mu_0 HNS + \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1, \quad (3.16)$$

onde,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 = & -\frac{JS}{N} \sum_{j, \vec{\delta}, \vec{k}, \vec{k}'} \left[ e^{-i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}_j} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{\delta}} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'}^\dagger + e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}_j} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{\delta}} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'} - e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}_j} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'} + \right. \\ & \left. - e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot (\vec{r}_j + \vec{\delta})} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'} \right] + \frac{2\mu_0 H}{N} \sum_{j, \vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}_j} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Portanto, somando sobre  $j$  e definindo

$$\gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\vec{\delta}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}}, \quad (3.18)$$

com  $z$  primeiros vizinhos, temos

$$\mathcal{H}_0 = -JzS \sum_{\vec{k}} \left[ \gamma_{\vec{k}} b_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger + \gamma_{-\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} - 2b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} \right] + 2\mu_0 H \sum_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}}. \quad (3.19)$$

Desta forma, se há um centro de simetria ( $\gamma_{\vec{k}} = \gamma_{-\vec{k}}$ ), da Eq. 3.10 podemos escrever

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

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

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\vec{k}} \left[ 2JzS(1 - \gamma_{\vec{k}}) + 2\mu_0 H \right] b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}}. \quad (3.20)$$

Note que o termo  $\mathcal{H}_1$  da expressão Eq. 3.16 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 baixa energia.

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

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\vec{k}} \hat{n}_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}}, \quad (3.21)$$

onde

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

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

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

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

A campo nulo a relação de dispersão é dada por

$$\omega_k = -4JS(1 - \cos ka), \quad (3.22)$$

ou seja, este modo (acústico) não apresenta gap. Na Fig. 28(a) está representado o resultado obtido através da onda de spin, neste caso não consideramos interação, ou seja, utilizamos o método da onda de spin livre. Na Fig. 28(b) apresentamos resultados

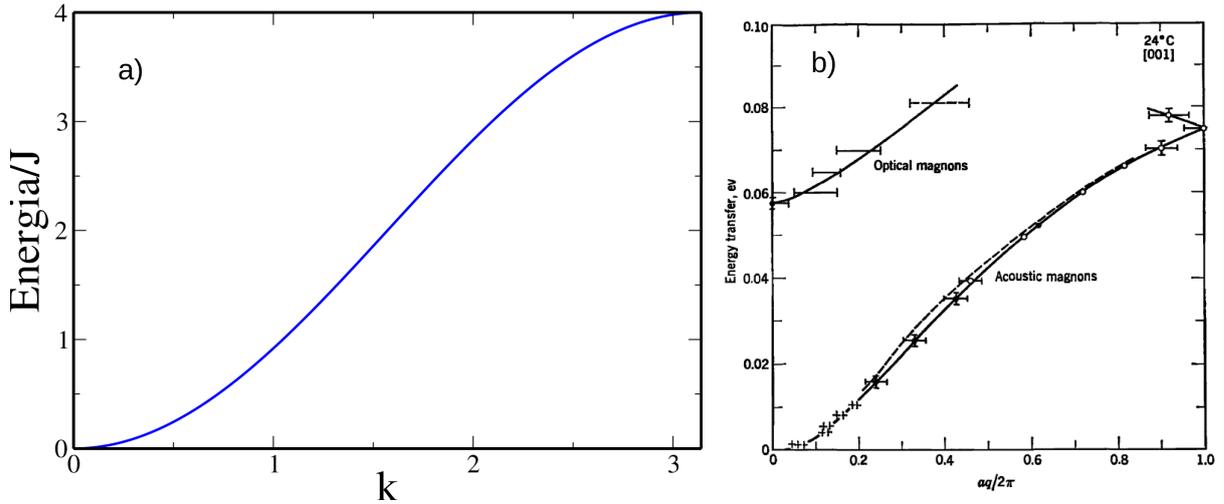


Figura 28 – a) Relação de dispersão de mágnons ferromagnéticos a campo nulo pelo método de ondas de spin. Relação de dispersão dos magnons ópticos e acústicos na magnetita, através do espalhamento inelástico de neutrons; retirada da Ref. [75].

experimentais da relação de dispersão dos mágnons ópticos e acústicos na magnetita [75]. Assumindo  $ka \ll 1$ , temos que

$$\omega_k = -2Jsa^2k^2 = Dk^2, \quad (3.23)$$

onde  $D = -2Jsa^2$  é a dureza do material, onde  $J < 0$  para o ferromaneto, Eq. 3.1. A energia interna de um gás de magnons 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  $x = \beta Dk^2$ ,

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

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

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

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

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

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

conhecida como lei de Bloch.

## 3.2 ANTIFERROMAGNETOS

Os antiferromagnetos são materiais magnéticos que não possuem magnetização espontânea em campo nulo, as interações magnéticas neste material favorecem o alinhamento antiparalelos dos momentos magnéticos. Neste caso considerar o hamiltoniano dado por [75]

$$\mathcal{H} = J \sum_{j,\delta} \vec{S}_{j+\delta} \vec{S}_j - g\mu_B \bar{H} \sum_j S_{aj}^z + g\mu_B \bar{H} \sum_j S_{bj}^z, \quad (3.24)$$

onde  $J > 0$  (antiferromagneto), uma vez que deve favorecer o alinhamento antiparalelo. Como a rede é bipartida, a configuração de spin do estado fundamental clássico 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  $\mu_B$  positivo.

### 3.2.1 Hamiltoniano bosônico

Para o hamiltoniano da Eq. 3.24, a transformação de Holstein-Primakoff é dada por

$$\begin{aligned} S_{aj}^+ &= (2S)^{1/2} \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} a_j; & S_{aj}^- &= (2S)^{1/2} a_j^\dagger \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} \\ S_{bl}^+ &= (2S)^{1/2} \left(1 - \frac{b_l^\dagger b_l}{2S}\right)^{1/2} b_l; & S_{bl}^- &= (2S)^{1/2} b_l^\dagger \left(1 - \frac{b_l^\dagger b_l}{2S}\right)^{1/2}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

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

$$S_{aj}^z = S - a_j^\dagger a_j \text{ e } S_{bl}^z = -S + b_l^\dagger b_l, \quad (3.26)$$

onde usamos a outra escolha de sinal permitida pela Eq. 3.6.

Vamos introduzir agora as variáveis de onda de spin, através da transformada de Fourier, dada por

$$\begin{aligned} c_k^\dagger &= N^{-1/2} \sum_j e^{-ikj} a_j^\dagger; & c_k &= N^{-1/2} \sum_j e^{ikj} a_j \\ d_k^\dagger &= N^{-1/2} \sum_j e^{ikj} a_j^\dagger; & d_k &= N^{-1/2} \sum_j e^{-ikj} a_j. \end{aligned} \quad (3.27)$$

De forma análoga à Sec. 3.1, temos

$$\begin{aligned} [c_{\vec{k}}, c_{\vec{k}'}] &= [d_{\vec{k}}, d_{\vec{k}'}] = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \\ [c_{\vec{k}}, c_{\vec{k}'}] &= [d_{\vec{k}}, d_{\vec{k}'}] = [c_{\vec{k}}^\dagger, c_{\vec{k}'}^\dagger] = [d_{\vec{k}}^\dagger, d_{\vec{k}'}^\dagger] = 0. \end{aligned} \quad (3.28)$$

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

$$\left\langle \frac{a_j^\dagger a_j}{S} \right\rangle \ll 1 \text{ e } \left\langle \frac{b_l^\dagger b_l}{S} \right\rangle \ll 1, \text{ então}$$

$$\left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} \simeq 1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{4S} \text{ e } \left(1 - \frac{b_l^\dagger b_l}{2S}\right)^{1/2} \simeq 1 - \frac{b_l^\dagger b_l}{4S},$$

portanto, para a subrede **A**, temos que

$$\begin{aligned} S_{aj}^+ &\simeq \left(\frac{2S}{N}\right)^{1/2} \left[ \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} c_{\vec{k}} + \dots \right]; \\ S_{aj}^- &\simeq \left(\frac{2S}{N}\right)^{1/2} \left[ \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} c_{\vec{k}}^\dagger + \dots \right]; \\ S_z^a &= \sum_j S_{aj}^z = -NS + \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

E, para a subrede **B**:

$$\begin{aligned} S_{bj}^+ &\simeq \left(\frac{2S}{N}\right)^{1/2} \left[ \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_l} d_{\vec{k}} + \dots \right]; \\ S_{bj}^- &\simeq \left(\frac{2S}{N}\right)^{1/2} \left[ \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_l} d_{\vec{k}}^\dagger + \dots \right]; \\ S_z^b &= \sum_l S_{bl}^z = NS - \sum_{\vec{k}} d_{\vec{k}}^\dagger d_{\vec{k}}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Sendo assim, o hamiltoniano da Eq. 3.24 em variáveis de magnons pode ser escrito, se há z vizinhos mais próximos

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

o termo bilinear é dado por

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

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

assumindo que há um centro de simetria.

Note que  $\mathcal{H}_0$  ainda não é diagonal. Então, para diagonalizar este hamiltoniano vamos fazer uma transformação de Bogoliubov [126], definida por:

$$\begin{aligned} \alpha_{\vec{k}} &= u_{\vec{k}} c_{\vec{k}} - v_{\vec{k}} d_{\vec{k}}^\dagger; \quad \alpha_{\vec{k}}^\dagger = u_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger - v_{\vec{k}} d_{\vec{k}} \\ \beta_{\vec{k}} &= u_{\vec{k}} d_{\vec{k}} - v_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger; \quad \beta_{\vec{k}}^\dagger = u_{\vec{k}} d_{\vec{k}}^\dagger - v_{\vec{k}} c_{\vec{k}}, \end{aligned} \quad (3.31)$$

cujas inversas são

$$\begin{aligned} c_{\vec{k}} &= u_{\vec{k}}\alpha_{\vec{k}} + v_{\vec{k}}\beta_{\vec{k}}^{\dagger}; & c_{\vec{k}}^{\dagger} &= u_{\vec{k}}\alpha_{\vec{k}}^{\dagger} + v_{\vec{k}}\beta_{\vec{k}} \\ d_{\vec{k}} &= v_{\vec{k}}\alpha_{\vec{k}}^{\dagger} + u_{\vec{k}}\beta_{\vec{k}}; & d_{\vec{k}}^{\dagger} &= v_{\vec{k}}\alpha_{\vec{k}} + u_{\vec{k}}\beta_{\vec{k}}^{\dagger}, \end{aligned} \quad (3.32)$$

onde

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

Portanto, a transformação de Bogoliubov pode ser parametrizada usando

$$u_{\vec{k}} = \cosh \theta_{\vec{k}} \text{ e } v_{\vec{k}} = \sinh \theta_{\vec{k}}. \quad (3.33)$$

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

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

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

$$\mathcal{H}_0 = \epsilon \sum_{\vec{k}} (c_{\vec{k}}^{\dagger}c_{\vec{k}} + d_{\vec{k}}^{\dagger}d_{\vec{k}}) + \sum_{\vec{k}} \lambda_{\vec{k}} (c_{\vec{k}}^{\dagger}d_{\vec{k}}^{\dagger} + c_{\vec{k}}d_{\vec{k}}) - N\epsilon \quad (3.34)$$

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 da Eq. 3.32

$$\begin{pmatrix} c_{\vec{k}} \\ d_{\vec{k}}^{\dagger} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} & v_{\vec{k}} \\ v_{\vec{k}} & u_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\vec{k}} \\ \beta_{\vec{k}}^{\dagger} \end{pmatrix}. \quad (3.35)$$

Desta forma, fazendo a transformação da Eq. 3.35, teremos:

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

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

Da Eq. 3.33, podemos escrever

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

impondo que os elementos não diagonais sejam nulos, obtemos os vínculos

$$\begin{aligned}\tanh 2\theta_{\vec{k}} &= -\frac{\lambda_{\vec{k}}}{\epsilon} \Rightarrow \cosh 2\theta_{\vec{k}} = \frac{\epsilon}{\omega_{\vec{k}}}; \\ \sinh 2\theta_{\vec{k}} &= -\frac{\lambda_{\vec{k}}}{\omega_{\vec{k}}}, \\ \omega_{\vec{k}} &= \sqrt{\epsilon^2 - \lambda_{\vec{k}}^2}.\end{aligned}\quad (3.36)$$

Assim,

$$\begin{aligned}\mathcal{T}_{\vec{k}} &= \begin{pmatrix} \omega_{\vec{k}} & 0 \\ 0 & \omega_{\vec{k}} \end{pmatrix}, \text{ portanto:} \\ \bar{\mathcal{H}}_0 &= \sum_{\vec{k}} \begin{pmatrix} \alpha_{\vec{k}}^\dagger & \beta_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_{\vec{k}} & 0 \\ 0 & \omega_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\vec{k}} \\ \beta_{\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix} \Rightarrow \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} [\alpha_{\vec{k}}^\dagger \alpha_{\vec{k}} + \beta_{\vec{k}}^\dagger \beta_{\vec{k}} + 1],\end{aligned}$$

desta forma

$$\mathcal{H}_0 = -2NJzS - 2N\mu_0\bar{H} + \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} [\alpha_{\vec{k}}^\dagger \alpha_{\vec{k}} + \beta_{\vec{k}}^\dagger \beta_{\vec{k}} + 1], \quad (3.37)$$

onde

$$\omega_{\vec{k}}^2 = (2JzS + 2\mu_0\bar{H})^2 - 4J^2z^2S^2\gamma_{\vec{k}}^2. \quad (3.38)$$

Que é a relação de dispersão para os magnons antiferromagnéticos.

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

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

ou seja, para  $S = 1/2$

$$\omega_k = 2J|\sin k|, \quad (3.39)$$

veja a Fig. 29(a). Em particular, note que apesar dos cálculos serem desenvolvidos do limite em que  $S \gg 1$ , resultados experimentais mostram que mesmo para cadeias de spin  $S = 1/2$ , o comportamento linear da relação de dispersão é mantido qualitativamente, conforme ilustra a Fig. 29(b).

No limite de longos comprimentos de onda podemos escrever que  $ka \ll 1$ , então

$$\omega_k = 2Jak, \quad (3.40)$$

ou seja, diferentemente do ferromagneto, as excitações de onda de spin do antiferromagneto exibem uma relação de dispersão linear no limite de  $k \rightarrow 0$ .

### 3.3 FERRIMAGNETOS ALTERNADOS ( $s, S$ )

Discutiremos nesta seção a metodologia analítica proposta neste trabalho utilizada nos cálculos das propriedades termodinâmicas dos ferrimagnetos alternados ( $s, S$ ) sob

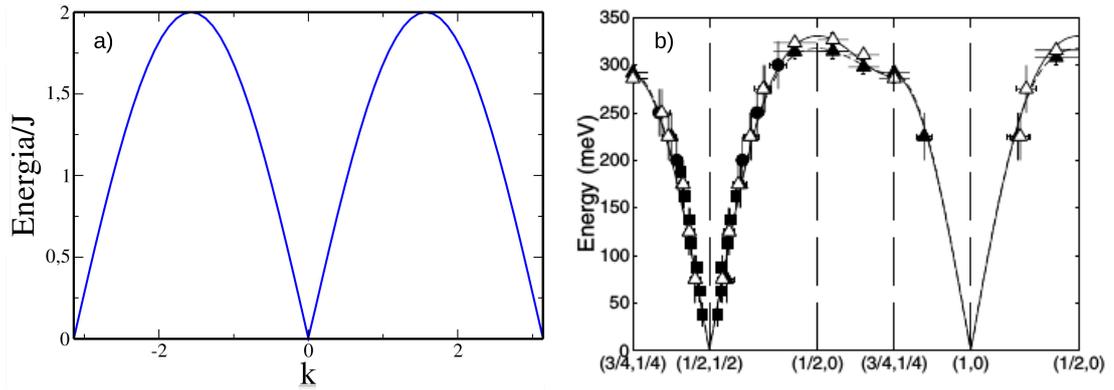


Figura 29 – a) Relação de dispersão em um antiferromagneto unidimensional com  $S = 1/2$  obtido pelo método ondas de spin. b) Relação de dispersão obtida experimentalmente do composto  $\text{LaCuO}_4$ , um antiferromagneto de spin  $S = 1/2$ ; retirada da Ref. [127].

um campo magnético aplicado. Nesses sistemas, o arranjo ferrimagnético de spins clássicos é a escolha natural do vácuo (FRIv) para estudar ferrimagnetos quânticos através da teoria de ondas de spins livres (FSW) [76] se procuramos estudar as excitações de mais baixa energia do estado fundamental do sistema. Dois tipos de excitações de magnons são obtidas: uma ferromagnética, que diminui o spin total do estado fundamental em uma unidade, e outra antiferromagnética, aumentando o spin do estado fundamental em uma unidade. Em particular, a excitação antiferromagnética apresenta um *gap*  $\Delta$  finito, que implica em platôs de magnetização em  $m = S - s$  e  $T = 0$ . De fato, de acordo com o teorema de Lieb e Mattis [46], o estado fundamental do modelo de Heisenberg com interações de superexchange antiferromagnéticas em uma rede bipartida é dada por

$$S = |S_A - S_B|,$$

onde

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

$s_i$  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  $B$ . Portanto, cadeias unidimensionais com spins alternados distintos,  $s_A$  e  $s_B$ , terão o estado fundamental com spin

$$S = \frac{N|s_A - s_B|}{2}. \quad (3.41)$$

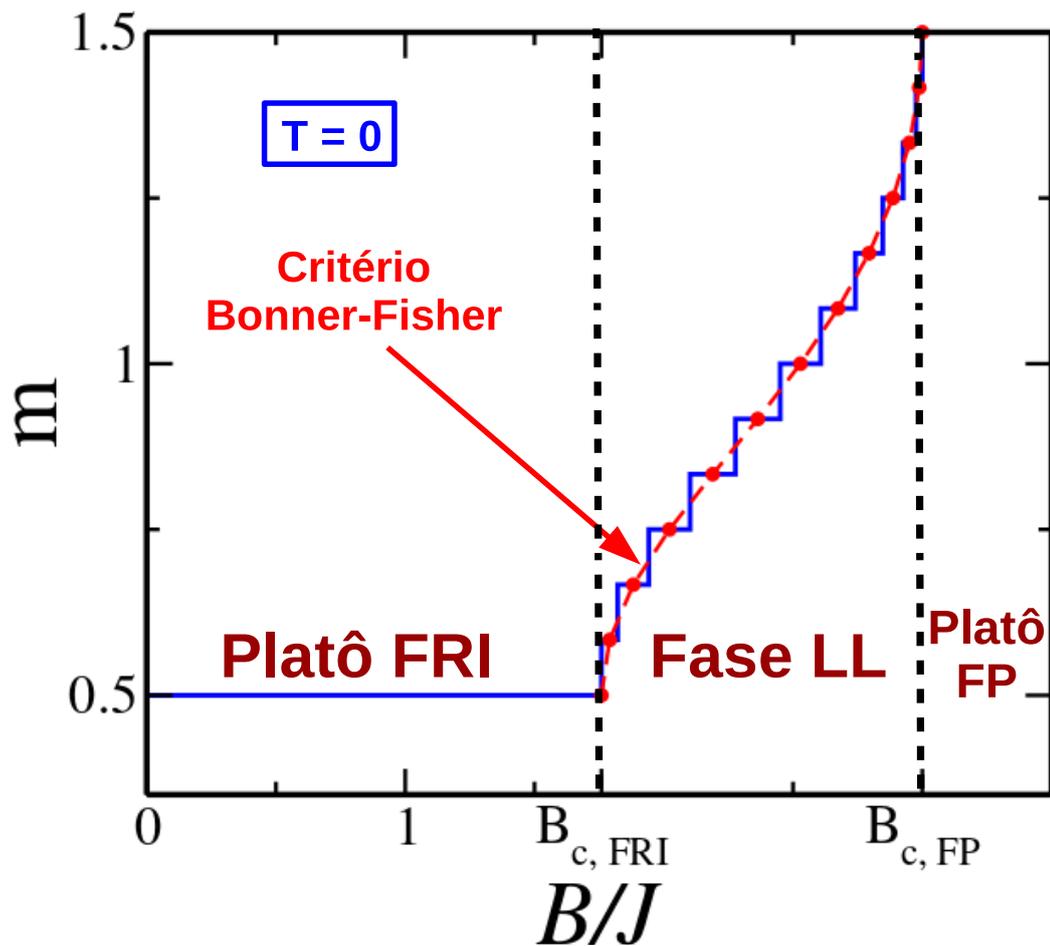


Figura 30 – Magnetização por célula unitária  $m$  em função do campo magnético  $B$ , em  $T = 0$ , para um sistema de spins alternados com  $s = 1/2$  e  $S = 1$  com  $L = 24$  sítios, através do método de Lanczos de diagonalização exata. Os pontos representados por ( $\bullet$ ) são os pontos esperados para a curva no limite termodinâmico, obtida através do critério de Bonner e Fisher [128]. Os valores dos campos críticos são dados por  $B = B_{c,FRI} = 1.76$  e  $B = B_{c,FP} = 3.00$ .

No entanto, na aproximação linear (FSW) para o estado ferrimagnético, flutuações quânticas são subestimadas, obtendo resultados ruins para o valor do *gap* antiferromagnético e outras quantidades, tal como a média dos spins por sítio. Por outro lado quando essas flutuações são levadas em consideração, os resultados são melhorados de forma relevante [70].

Na Fig. 30 apresentamos a curva da magnetização em função do campo magnético  $B$  em  $T = 0$ , calculada através do método de Lanczos de diagonalização exata para  $S = 1/2$  e  $S = 1$ . O *gap* do modo antiferromagnético é responsável por um platô na curva de magnetização no limite termodinâmico e a magnetização começa a mudar em relação ao seu valor do estado fundamental,  $m = 1/2$ , para campos maiores que  $B = B_{c,FRI} = 1.76$ , onde o sistema entra numa fase sem *gap* chamada líquido de Luttinger (LL), com decaimento de lei de potência das correlações transversais. A fase sem *gap* LL

termina em  $B = B_{c,FP} = 3.00$ : o sistema se torna totalmente polarizado (FP) e excitações de baixa energia ferromagnéticas. As excitações do vácuo totalmente polarizado (FPv), ambas carregando um spin  $-1$ , podem ser obtidas exatamente.

Nessa perspectiva, discutiremos nessa seção a metodologia analítica proposta para estudar as propriedades magnéticas de ferrimagnetos alternados ( $s, S$ ) sob um campo magnético aplicado: a teoria de ondas de spin a partir do vácuo ferrimagnético (ISW-FRIv) e a teoria de ondas de spin a partir do vácuo totalmente polarizado (FSW-FPv).

### 3.3.1 Teoria de ondas de spin: vácuo ferrimagnético

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

$$\mathcal{H} = J \sum_j (\vec{S}_j \cdot \vec{s}_j + \vec{s}_j \cdot \vec{S}_{j+1}) - g\mu_B H \sum_j (S_j^z + s_j^z), \quad (3.42)$$

onde o número total de células unitárias é  $N$  e  $H$  é o campo magnético aplicado. Vamos calcular [73, 77] as principais correções do vácuo, representado na Fig. 31,

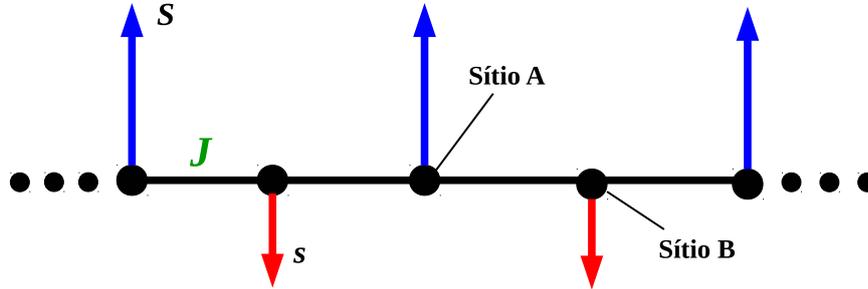


Figura 31 – Representação esquemática do vácuo ferrimagnético clássico (FRIv) da cadeia linear de spins mistos ( $S, s$ ), de spins com componentes  $-s$  e  $S$ , na direção  $z$ , em uma cadeia com interações discutidas pelo hamiltoniano da Eq. 3.42.

onde as componentes  $z$  dos spins são respectivamente  $S$  e  $-s$ . A transformação de Holstein-Primakoff para o estado clássico FRIv é dada por:

$$S_j^z = S - a_j^\dagger a_j; \quad S_j^+ = (2S)^{1/2} \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} a_j; \quad S_j^- = (2S)^{1/2} a_j^\dagger \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} \quad (3.43)$$

e

$$s_j^z = -s + b_j^\dagger b_j; \quad s_j^+ = (2s)^{1/2} b_j^\dagger \left(1 - \frac{b_j^\dagger b_j}{2s}\right)^{1/2}; \quad s_j^- = (2s)^{1/2} \left(1 - \frac{b_j^\dagger b_j}{2s}\right)^{1/2} b_j \quad (3.44)$$

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 Sec. 3.1 e Sec. 3.2, teremos

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(\text{ISW-FRIv})} &= J \sum_j \left\{ (S - a_j^\dagger a_j) (-s + b_j^\dagger b_j) + \sqrt{sS} \left[ \left( a_j - \frac{a_j^\dagger a_j^2}{4S} \right) \left( b_j - \frac{b_j^\dagger b_j^2}{4s} \right) + \right. \right. \\ &+ \left. \left( a_j^\dagger - \frac{a_j^2 a_j}{4S} \right) \left( b_j^\dagger - \frac{b_j^2 b_j}{4s} \right) \right] + \sqrt{sS} \left[ \left( b_j^\dagger - \frac{b_j^2 b_j}{4s} \right) \left( a_{j+1}^\dagger - \frac{(a_{j+1}^\dagger)^2 a_{j+1}}{4S} \right) + \right. \\ &+ \left. \left. \left( b_j - \frac{b_j^\dagger b_j^2}{4s} \right) \left( a_{j+1} - \frac{a_{j+1}^\dagger a_{j+1}^2}{4S} \right) \right] + (-s + b_j^\dagger b_j) (S - a_{j+1}^\dagger a_{j+1}) \right\} + \\ &- B \sum_j (S - s + b_j^\dagger b_j - a_j^\dagger a_j), \end{aligned} \quad (3.45)$$

portanto, podemos escrever

$$\mathcal{H}^{(\text{ISW-FRIv})} = E_{\text{class}}^{(\text{FRIv})} + \mathcal{H}_0^{(\text{FRIv})} + \mathcal{H}_1^{(\text{FRIv})} + \mathcal{O}(S^{-1}), \quad \text{onde} \quad (3.46)$$

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

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

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

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp[-ik(j - 1/4)] a_k \quad \text{e} \quad b_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp[ik(j + 1/4)] b_k, \quad (3.47)$$

obtemos a seguinte expressão:

$$\mathcal{H}_0^{(\text{FRIv})} = 2J \sum_k \left[ s a_k^\dagger a_k + S b_k^\dagger b_k + \sqrt{sS} \cos\left(\frac{k}{2}\right) (a_k b_k + a_k^\dagger b_k^\dagger) \right] + B \sum_k (a_k^\dagger a_k - b_k^\dagger b_k). \quad (3.48)$$

Para diagonalizar a expressão 3.48, considere a transformação de Bogoliubov definida por

$$a_k = \cosh \theta_k \alpha_k - \sinh \theta_k \beta_k^\dagger \quad \text{e} \quad b_k = \cosh \theta_k \beta_k - \sinh \theta_k \alpha_k^\dagger, \quad (3.49)$$

com

$$\tanh 2\theta_k = 2 \frac{\sqrt{sS}}{s + S} \cos\left(\frac{k}{2}\right), \quad (3.50)$$

tal que

$$\begin{aligned}\sinh^2 \theta_k &= -1/2 + \frac{(S+s)}{2\omega_k^{(\text{FRIv})}} \\ \cosh^2 \theta_k &= 1/2 + \frac{(S+s)}{2\omega_k^{(\text{FRIv})}},\end{aligned}\quad (3.51)$$

onde

$$\omega_k^{(\text{FRIv})} = J\sqrt{(S-s)^2 + 4sS\sin^2\left(\frac{k}{2}\right)}.\quad (3.52)$$

Substituindo a Eq. 3.49 na Eq. 3.48, obtemos:

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

sendo assim, das Eq. 3.50 e Eq. 3.51, podemos escrever

$$\mathcal{H}_0^{(\text{FRIv})} = \sum_k \left[ \omega_{k,-}^{(\text{FRIv})} \alpha_k^\dagger \alpha_k + \omega_{k,+}^{(\text{FRIv})} \beta_k^\dagger \beta_k + \epsilon_{0k} \right],\quad (3.53)$$

onde

$$\omega_{k,-}^{(\text{FRIv})} = J(S-s) + B + J\omega_k^{(\text{FRIv})}\quad (3.54)$$

$$\omega_{k,+}^{(\text{FRIv})} = J(S-s) - B + J\omega_k^{(\text{FRIv})}\quad (3.55)$$

são as energias dos modos de onda de spin e  $\epsilon_{0k} = -J(S+s) + \omega_k^{(\text{FRIv})}$  é a energia de ponto zero. A soma em  $k$  da energia de ponto zero  $\epsilon_{0k}$  na Eq. 3.53 é a correção em ordem  $O(S^1)$  da energia do estado fundamental ( $E_g^{(\text{FSW-FRIv})}$ ), a saber

$$E_0^{(\text{FRIv})} = J \sum_k \epsilon_{0k} \rightarrow E_0 = J \sum_k \left[ \omega_k - (S+s) \right],\quad (3.56)$$

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 livre (FSW) desenvolvida a partir do vácuo FRI nos fornece o valor  $E_g^{(\text{FSW-FRIv})} = E_{\text{class}}^{(\text{FRIv})} + E_0 \simeq -1.437J$ , para a energia do estado fundamental, onde o valor exato é  $-1.454J$  [70, 79].

A campo nulo o modo de mais baixa energia ( $\omega_{k,-}^{(\text{FRIv})}$ ) 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  $J$ :

$$\Delta_{sS}^{(\text{FRIV})} = \left[ \omega_{k,+}^{(\text{FRIV})}(k=0) - \omega_{k,-}^{(\text{FRIV})}(k=0) \right] = 2J(S-s) \rightarrow \Delta = J, \quad (3.57)$$

que está consideravelmente distante da estimativa numérica de  $1.759J$  [70, 79]. Na Fig.

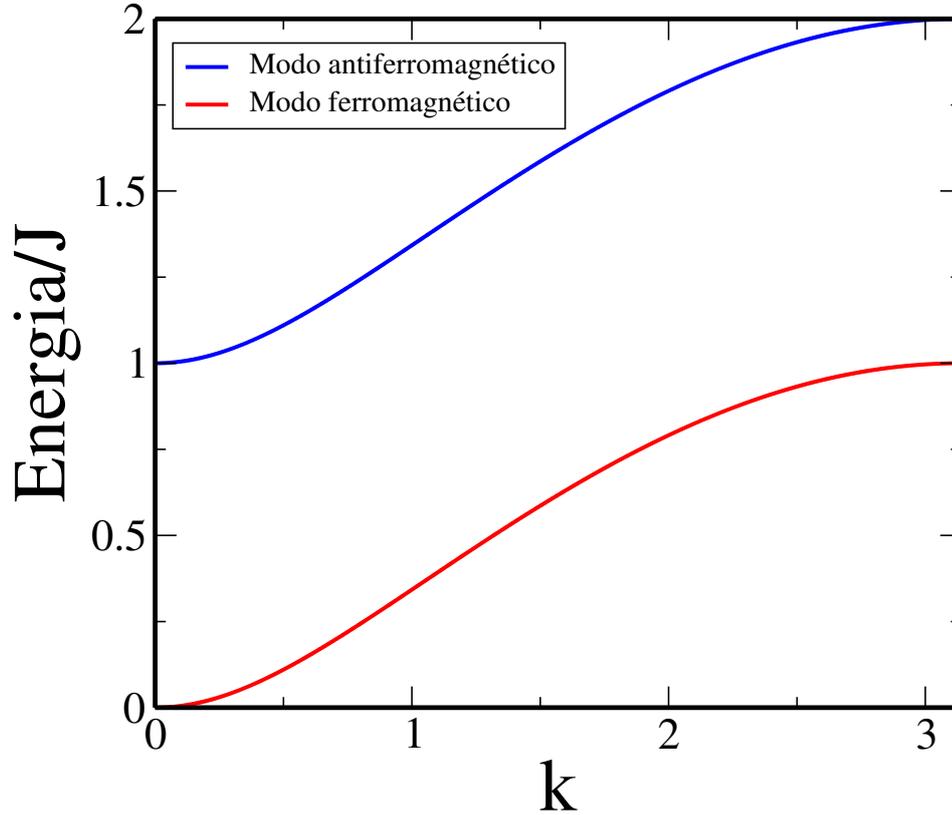


Figura 32 – Os dois ramos de ondas de spin,  $\omega_{k,+}^{(\text{FRIV})}$  (antiferromagnético) e  $\omega_{k,-}^{(\text{FRIV})}$  (ferromagnético), em unidades de  $J$ , para um sistema de spins alternados com  $s = 1/2$  e  $S = 1$ , obtidos através da teoria de ondas de spin livres a partir do vácuo ferrimagnético.

32 representamos graficamente as relações de dispersão dos modos ferromagnético (sem gap), carregando um spin  $\Delta S^z = -1$ , e antiferromagnético (com gap), carregando um spin  $\Delta S^z = +1$ , através da teoria FSW sem campo magnético a partir do vácuo ferrimagnético (FRIV).

Agora vamos considerar as contribuições relevantes de  $\mathcal{H}_1^{(\text{FRIV})}$  às relações de dispersão, bem como à energia do estado fundamental. Da Eq. 3.45, temos que

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1^{(\text{FRIV})} = -J \sum_j \left\{ \frac{1}{4} \left[ \sqrt{\frac{S}{s}} (a_j + a_{j+1}) b_j^\dagger b_j^2 + \sqrt{\frac{s}{S}} a_j^\dagger a_j^2 (b_j + b_{j-1}) + \sqrt{\frac{S}{s}} (a_j^\dagger + a_{j+1}^\dagger) \times \right. \right. \\ \left. \left. \times b_j^{\dagger 2} b_j + \sqrt{\frac{s}{S}} a_j^{\dagger 2} a_j (b_j^\dagger + b_{j-1}^\dagger) \right] + (a_j^\dagger a_j + a_{j+1}^\dagger a_{j+1}) b_j^\dagger b_j \right\}. \quad (3.58) \end{aligned}$$

Entretanto, empregando o teorema de Wick, podemos escrever  $\mathcal{H}_1^{(\text{FRIV})}$  como

$$\mathcal{H}_1^{(\text{FRIV})} = E_1^{(\text{FRIV})} - J \sum_k \left( \delta\omega_{k,-}^{(\text{FRIV})} \alpha_k^\dagger \alpha_k + \delta\omega_{k,+}^{(\text{FRIV})} \beta_k^\dagger \beta_k \right) + \mathcal{H}_{\text{irrel}} + \mathcal{H}_{\text{quart}}, \quad (3.59)$$

onde  $\mathcal{H}_{\text{irrel}}$  contém termos irrelevantes do tipo  $\alpha_k \beta_k$  e  $\mathcal{H}_{\text{quart}}$  contém termos residuais de interações de dois corpos; desprezaremos ambos [70, 73]. Os termos  $E_1^{(\text{FRIV})}$  e  $\delta\omega_{k,\pm}^{(\text{FRIV})}$ , 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 (Eq. 3.47) da Eq. 3.58, temos

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

da transformação de Bogoliubov (Eq. 3.49), podemos escrever  $\mathcal{H}_1^{(\text{FRIV})}$  na forma da Eq. 3.59, tal que

$$\begin{aligned} \delta\omega_{k,-}^{(\text{FRIV})} = \frac{2}{N} \sum_k \sinh^2 \theta_k \left( \cosh^2 \theta_k + \sinh^2 \theta_k \right) - \frac{2}{N\sqrt{sS}} \sum_k \sinh^3 \theta_k \cosh \theta_k (S+s) \cos(k/2) + \\ \frac{1}{N\sqrt{sS}} \sum_k \sinh \theta_k \cosh \theta_k \cos(k/2) \left( S \sinh^2 \theta_k + s \cosh^2 \theta_k - \frac{2\sqrt{sS}}{\cos(k/2)} \sinh \theta_k \cosh \theta_k \right) \end{aligned} \quad (3.60)$$

$$\begin{aligned} \delta\omega_{k,+}^{(\text{FRIV})} = \frac{2}{N} \sum_k \sinh^2 \theta_k \left( \cosh^2 \theta_k + \sinh^2 \theta_k \right) - \frac{2}{N\sqrt{sS}} \sum_k \sinh^3 \theta_k \cosh \theta_k (S+s) \cos(k/2) + \\ - \frac{1}{N\sqrt{sS}} \sum_k \sinh \theta_k \cosh \theta_k \cos(k/2) \left( S \cosh^2 \theta_k + s \sinh^2 \theta_k - \frac{2\sqrt{sS}}{\cos(k/2)} \sinh \theta_k \cosh \theta_k \right). \end{aligned} \quad (3.61)$$

Definindo as quantidades

$$\Gamma_1 = \frac{1}{N} \sum_k \sinh^2 \theta_k \text{ e } \Gamma_2 = \frac{1}{N} \sum_k \cos(k/2) \sinh \theta_k \cosh \theta_k, \quad (3.62)$$

que no limite termodinâmico, com  $S = 1$  e  $s = 1/2$ , são respectivamente, 0.305 e 0.478, podemos reescrever as Eq. 3.60 e Eq. 3.61, como

$$\begin{aligned} \delta\omega_{k,-}^{(\text{FRIV})} &= 2\Gamma_1 \left[ \cosh^2 \theta_k + \sinh^2 \theta_k - \sinh \theta_k \cosh \theta_k \frac{(S+s)}{\sqrt{sS}} \cos(k/2) \right] + \\ &- \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \left( S \sinh^2 \theta_k + s \cosh^2 \theta_k - \frac{\sqrt{2sS}}{\cos(k/2)} \sinh \theta_k \cosh \theta_k \right) \\ \delta\omega_{k,+}^{(\text{FRIV})} &= 2\Gamma_1 \left[ \cosh^2 \theta_k + \sinh^2 \theta_k - \sinh \theta_k \cosh \theta_k \frac{(S+s)}{\sqrt{sS}} \cos(k/2) \right] + \\ &- \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \left( S \cosh^2 \theta_k + s \sinh^2 \theta_k - \frac{\sqrt{2sS}}{\cos(k/2)} \sinh \theta_k \cosh \theta_k \right). \end{aligned} \quad (3.63)$$

Desta forma, utilizando a Eq. 3.50 obtemos:

$$\begin{aligned}\delta\omega_{k,-}^{(\text{FRIv})} &= 2\Gamma_1 \frac{(S+s)}{\omega_k^{(\text{FRIv})}} \sin^2(k/2) - \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \left\{ \frac{1}{\omega_k^{(\text{FRIv})}} [(S-s)^2] - (S-s) \right\}; \\ \delta\omega_{k,+}^{(\text{FRIv})} &= 2\Gamma_1 \frac{(S+s)}{\omega_k^{(\text{FRIv})}} \sin^2(k/2) - \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \left\{ \frac{1}{\omega_k^{(\text{FRIv})}} [(S-s)^2] + (S-s) \right\}.\end{aligned}\quad (3.64)$$

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

$$\begin{aligned}\delta\omega_{k,-}^{(\text{FRIv})} &= 2\Gamma_1 \frac{(S+s)}{\omega_k^{(\text{FRIv})}} \sin^2(k/2) - \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \left\{ \frac{1}{\omega_k^{(\text{FRIv})}} [(S-s)^2 + 4sS \sin^2(k/2)] - (S-s) \right\} + \\ &+ 4\Gamma_2 \sqrt{sS} \frac{\sin^2(k/2)}{\omega_k^{(\text{FRIv})}} = 2\Gamma_1 \frac{(S+s)}{\omega_k^{(\text{FRIv})}} \sin^2(k/2) - \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} [\omega_k^{(\text{FRIv})} - (S-s)] + \\ &+ 4\Gamma_2 \sqrt{sS} \frac{\sin^2(k/2)}{\omega_k^{(\text{FRIv})}}\end{aligned}\quad (3.65)$$

$$\begin{aligned}\delta\omega_{k,+}^{(\text{FRIv})} &= 2\Gamma_1 \frac{(S+s)}{\omega_k^{(\text{FRIv})}} \sin^2(k/2) - \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \left\{ \frac{1}{\omega_k^{(\text{FRIv})}} [(S-s)^2 + 4sS \sin^2(k/2)] + (S-s) \right\} + \\ &+ 4\Gamma_2 \sqrt{sS} \frac{\sin^2(k/2)}{\omega_k^{(\text{FRIv})}} = 2\Gamma_1 \frac{(S+s)}{\omega_k^{(\text{FRIv})}} \sin^2(k/2) - \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} [\omega_k^{(\text{FRIv})} + (S-s)] + \\ &+ 4\Gamma_2 \sqrt{sS} \frac{\sin^2(k/2)}{\omega_k^{(\text{FRIv})}}.\end{aligned}\quad (3.66)$$

Sendo assim, as correções dos modos ferromagnético e antiferromagnético são, respectivamente,

$$\delta\omega_{k,-}^{(\text{FRIv})} = 2\Gamma_1 \frac{(S+s)}{\omega_k^{(\text{FRIv})}} \sin^2(k/2) - \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} [\omega_k - (S-s)];\quad (3.67)$$

$$\delta\omega_{k,+}^{(\text{FRIv})} = 2\Gamma_1 \frac{(S+s)}{\omega_k^{(\text{FRIv})}} \sin^2(k/2) - \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} [\omega_k + (S-s)].\quad (3.68)$$

Portanto, a correção  $E_1^{(\text{FRIv})}$  será:

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

ou seja,

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

sendo assim, finalmente teremos

$$E_1^{(\text{FRIV})} = -2JN \left[ \Gamma_1^2 + \Gamma_2^2 - \left( \sqrt{S/s} + \sqrt{s/S} \right) \Gamma_1 \Gamma_2 \right], \quad (3.69)$$

que no limite termodinâmico é dada por  $E_1^{(\text{FRIV})} = -0.022J$  [70, 73].

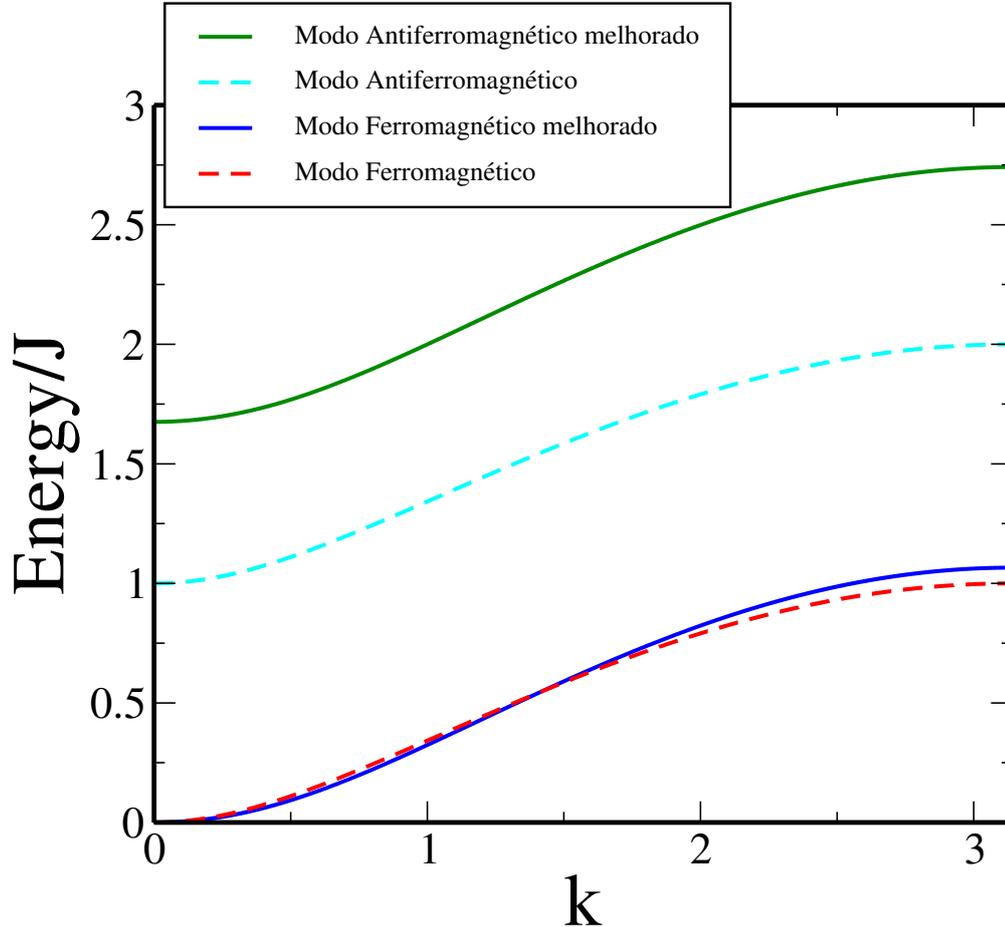


Figura 33 – Relações de dispersão dos estados de menores energias. Uma comparação entre a teoria ondas de spin não interagente com o cálculo melhorado levando em consideração interações entre as ondas de spin.

Até  $O(S^{-1})$  podemos escrever o hamiltoniano do sistema como

$$\mathcal{H}^{(\text{ISW-FRIV})} \simeq E_g^{(\text{FRIV})} + \sum_k \left( \tilde{\omega}_{k,-}^{(\text{FRIV})} \alpha_k^\dagger \alpha_k + \tilde{\omega}_{k,+}^{(\text{FRIV})} \beta_k^\dagger \beta_k \right), \quad (3.70)$$

onde

$$\tilde{\omega}_{k,\sigma}^{(\text{FRIV})} = \omega_{k,\sigma}^{(\text{FRIV})} - J\delta\omega_{k,\sigma}^{(\text{FRIV})}, \quad (3.71)$$

com  $\sigma = \pm$ , e

$$E_g^{(\text{FRIV})} = E_{\text{class}}^{(\text{FRIV})} + E_0^{(\text{FRIV})} + E_1^{(\text{FRIV})}. \quad (3.72)$$

Na Fig. 33 apresentamos os ramos ferromagnético (Eq. 3.67 com  $\sigma = -$ ) e antiferromagnético (Eq. 3.68 com  $\sigma = +$ ) corrigidos, como função de  $k$  para  $(S, s) =$

$(1, 1/2)$ , a campo nulo, além daqueles obtidos na aproximação de ondas de spin livres. Encontramos que o modo antiferromagnético é corrigido de forma relevante. Entretanto, a largura de banda dos dois ramos, que são exatamente a mesma dentro da teoria de ondas de spin não interagentes, agora são distintos, devido às interações. O gap  $\Delta_{sS}^{(\text{FSW-FRIv})} = J$  é substituído por  $\Delta_{sS}^{(\text{ISW-FRIv})} = (1 - 2\Gamma_2)J \simeq 1.676J$ , que é muito mais próximo do valor exato  $1.759J$  [79]. A energia do estado fundamental  $E_g$  é refinada:  $E_{\text{class}}^{(\text{FRIv})} + E_0^{(\text{FRIv})} \simeq -1.437J$ , enquanto que  $E_{\text{class}}^{(\text{FRIv})} + E_0^{(\text{FRIv})} + E_1^{(\text{FRIv})} \simeq -1.459J$ , onde o valor exato é  $-1.454J$ .

### 3.3.2 Teoria de ondas de spin: vácuo totalmente polarizado

Agora, discutiremos a teoria de ondas de spin do vácuo totalmente polarizado (FSW-FPv), ilustrado na Fig. 34. Para escrever o hamiltoniano da Eq. 3.42 em variáveis bosônicas usamos a transformação de Holstein-Primakoff, que neste caso é dada por

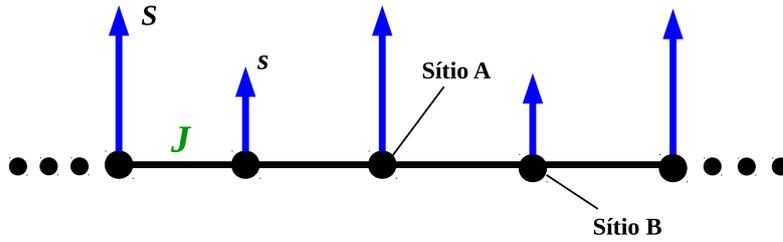


Figura 34 – O vácuo clássico totalmente polarizado (FPv) da cadeia  $(S, s)$ .

$$\begin{aligned}
 S_j^z &= S - a_j^\dagger a_j; & S_j^+ &= (2S)^{1/2} \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} a_j; & S_j^- &= (2S)^{1/2} a_j^\dagger \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} \\
 s_j^z &= s - b_j^\dagger b_j; & s_j^+ &= (2s)^{1/2} \left(1 - \frac{b_j^\dagger b_j}{2s}\right)^{1/2} b_j; & s_j^- &= (2s)^{1/2} b_j^\dagger \left(1 - \frac{b_j^\dagger b_j}{2s}\right)^{1/2}, \quad (3.73)
 \end{aligned}$$

com os dois magnons baixando a magnetização do sítio em uma unidade.

Então, podemos escrever o hamiltoniano na forma

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}^{(\text{FSW-FPv})} &= J \sum_j \left\{ (S - a_j^\dagger a_j)(s - b_j^\dagger b_j) + \sqrt{sS} \left[ \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{4S}\right) a_j b_j^\dagger \left(1 - \frac{b_j^\dagger b_j}{4s}\right) + \right. \right. \\
 &+ a_j^\dagger \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{4S}\right) \left(1 - \frac{b_j^\dagger b_j}{4s}\right) b_j \left. \right] + \sqrt{sS} \left[ \left(1 - \frac{b_j^\dagger b_j}{4s}\right) b_j a_{j+1}^\dagger \left(1 - \frac{a_{j+1}^\dagger a_{j+1}}{4S}\right) + \right. \\
 &+ b_j^\dagger \left(1 - \frac{b_j^\dagger b_j}{4s}\right) \left(1 - \frac{a_{j+1}^\dagger a_{j+1}}{4S}\right) a_{j+1} \left. \right] + (s - b_j^\dagger b_j)(S - a_{j+1}^\dagger a_{j+1}) \left. \right\} + \\
 &- B \sum_j (S + s - b_j^\dagger b_j - a_j^\dagger a_j). \quad (3.74)
 \end{aligned}$$

sendo assim,

$$\mathcal{H}^{(\text{FSW-FPv})} = E_{\text{class}}^{(\text{FPv})} + \mathcal{H}^{(\text{FPv})} + \mathcal{H}_1^{(\text{FPv})} + \mathcal{O}(S^{-1}) \quad (3.75)$$

onde

$$E_{\text{class}}^{(\text{FPv})} = 2JNsS - B(S + s)N \quad (3.76)$$

e

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0^{(\text{FPv})} = & J \sum_j \left\{ -s(a_j^\dagger a_j + a_{j+1}^\dagger a_{j+1}) - 2Sb_j^\dagger b_j + \right. \\ & + \sqrt{sS} \left[ (a_j + a_{j+1})b_j^\dagger + (a_j^\dagger + a_{j+1}^\dagger)b_j \right] + \\ & \left. + B \sum_j (a_j^\dagger a_j + b_j^\dagger b_j) \right\} \end{aligned} \quad (3.77)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1^{(\text{FPv})} = & -J \sum_j \left\{ \frac{1}{4} \left[ \sqrt{\frac{S}{s}} (a_j^\dagger + a_{j+1}^\dagger) b_j^\dagger b_j^2 + \sqrt{\frac{s}{S}} a_j^\dagger a_j^2 \times \right. \right. \\ & \times (b_j^\dagger + b_{j-1}^\dagger) + \sqrt{\frac{S}{s}} (a_j + a_{j+1}) b_j^{\dagger 2} b_j + \sqrt{\frac{s}{S}} \times \\ & \left. \left. \times a_j^{\dagger 2} a_j (b_j + b_{j-1}) \right] + (a_j^\dagger a_j + a_{j+1}^\dagger a_{j+1}) b_j^\dagger b_j \right\}. \end{aligned} \quad (3.78)$$

Aqui consideraremos apenas os magnons sem interação (livres), ou seja, diagonalizaremos apenas  $\mathcal{H}_0^{(\text{FPv})}$  e desprezaremos  $\mathcal{H}_1^{(\text{FPv})}$ .

Desta forma, fazendo a transformada de Fourier (parâmetro de rede  $a = 1$ ) dos operadores bosônicos

$$\begin{aligned} a_j &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp[ik(j - 1/4)] a_k \\ b_j &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp[ik(j + 1/4)] b_k \end{aligned} \quad (3.79)$$

e usando a transformação de Bogoliubov

$$\begin{aligned} a_k^\dagger &= \cos \theta_k \alpha_k^\dagger - \sin \theta_k \beta_k^\dagger \\ b_k^\dagger &= \cos \theta_k \beta_k^\dagger + \sin \theta_k \alpha_k^\dagger, \end{aligned} \quad (3.80)$$

obtemos:

$$\mathcal{H}^{(\text{FSW-FPv})} = E_{\text{class}}^{(\text{FPv})} + \sum_k \left[ \omega_{k,1}^{(\text{FPv})} \alpha_k^\dagger \alpha_k + \omega_{k,0}^{(\text{FPv})} \beta_k^\dagger \beta_k \right], \quad (3.81)$$

onde

$$\omega_{k,1}^{(\text{FPv})} = -J(S + s) + B + J\omega_k^{(\text{FPv})} \quad (3.82)$$

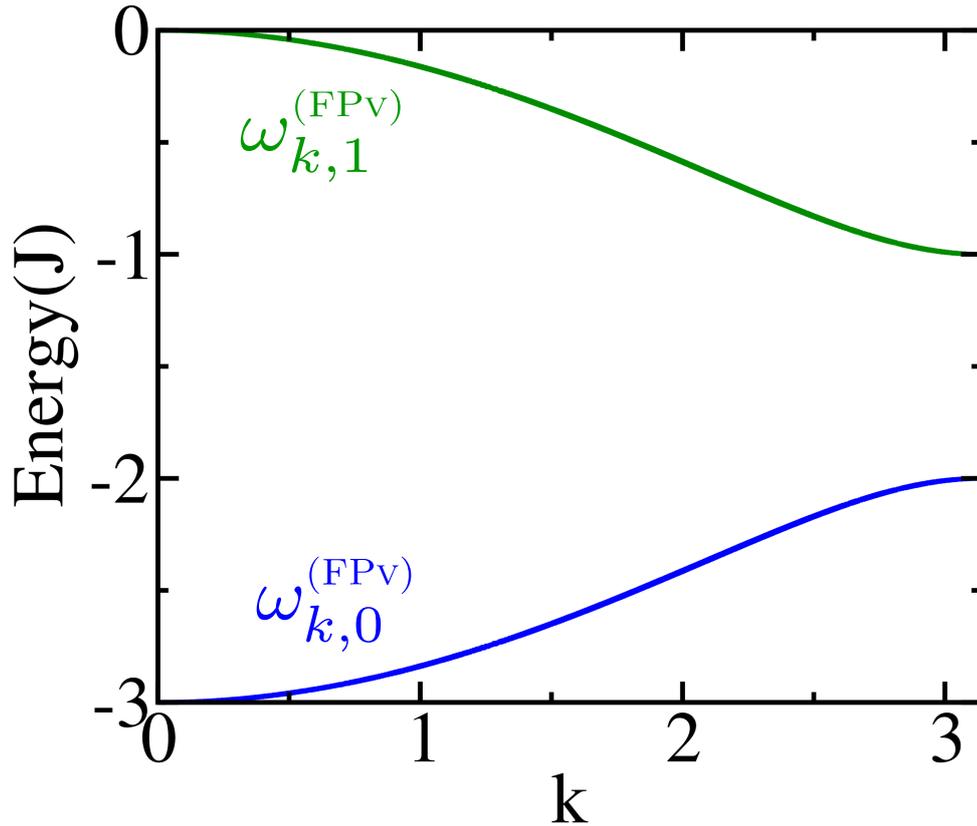


Figura 35 – Os dois ramos de ondas de spin,  $\omega_{k,0}^{(\text{FPv})}$  (ferromagnético) e  $\omega_{k,1}^{(\text{FPv})}$  (ferromagnético), em unidades de  $J$ , para um sistema de spins alternados com  $s = 1/2$  e  $S = 1$ , obtidos através da teoria de ondas de spin livres a partir do vácuo ferromagnético.

$$\omega_{k,0}^{(\text{FPv})} = -J(S + s) + B - J\omega_k^{(\text{FPv})} \quad (3.83)$$

são as relações de dispersão das excitações do vácuo FP. Além disso, a fim de desprezar termos não lineares do tipo,  $\alpha_k^\dagger \beta_k$ , e complexo conjugado, utilizamos a restrição

$$\tan 2\theta_k = 2 \frac{\sqrt{sS}}{S-s} \cos\left(\frac{k}{2}\right), \quad (3.84)$$

tal que

$$\begin{aligned} \cos^2 \theta_k &= \frac{1}{2} + \frac{S-s}{2\omega_k^{(\text{FPv})}} \\ \sin^2 \theta_k &= \frac{1}{2} - \frac{S-s}{2\omega_k^{(\text{FPv})}}. \end{aligned} \quad (3.85)$$

com

$$\omega_k^{(\text{FPv})} = \sqrt{(S-s)^2 + 4sS \cos^2\left(\frac{k}{2}\right)}. \quad (3.86)$$

Na Fig. 35 esboçamos graficamente as relações de dispersão dos modos de onda de spin, ambos carregando um spin  $\Delta S^z = -1$ , obtidos através da teoria FSW sem campo magnético a partir do vácuo totalmente polarizado (FPv).

### 3.3.3 Termodinâmica

Quando ferromagnetos unidimensionais são estudados através da teoria FSW em temperaturas finitas, a magnetização diverge em campo nulo para qualquer valor de  $T$  [106, 119, 120]. Takahashi [68, 69] modificou a teoria impondo uma restrição na magnetização em campo nulo e um potencial químico efetivo na distribuição térmica dos bósons. Essa teoria, chamada de ondas de spin modificada descreve muito bem a termodinâmica em baixa temperatura de ferromagnetos unidimensionais e foi adaptada a outros sistemas com sucesso, incluindo cadeias ferrimagnéticas [71]. No caso de ferrimagnetos, a introdução da restrição de magnetização nas distribuições bosônicas com relação de dispersão linear fornece uma excelente descrição do comportamento em baixa temperatura. A descrição do regime intermediário de temperaturas pode ser melhorada mudando a restrição [70, 71, 73, 74].

Em temperaturas finitas, substituímos  $\alpha_k^\dagger \alpha_k$  e  $\beta_k^\dagger \beta_k$  do Hamiltoniano de ondas de spin da Eq. 4.13 por  $\tilde{n}_k^-$  e  $\tilde{n}_k^+$ , respectivamente, onde

$$\tilde{n}_k^\pm \equiv \sum_{n^-, n^+} n^\pm P_k(n^-, n^+) \quad (3.87)$$

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

$$\sum_{n^-, n^+} P_k(n^-, n^+) = 1 \quad (3.88)$$

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

$$U = -\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta} \quad \text{e} \quad S = -k_B \sum_k \sum_{n^-, n^+} P_k(n^-, n^+) \ln P_k(n^-, n^+), \quad (3.89)$$

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

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{k, n^-, n^+\}} \exp[-\beta \mathcal{H}\{k, n^-, n^+\}]. \quad (3.90)$$

Sendo assim, uma vez que

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

$$\Rightarrow U = E_g + \sum_k (\tilde{n}_k^- \tilde{\omega}_k^- + \tilde{n}_k^+ \tilde{\omega}_k^+), \quad (3.91)$$

podemos escrever a energia livre a campo nulo, usando a entropia  $S$  e a expressão da Eq. 3.91 para a energia interna, da forma geral

$$F = E_g + \sum_k (\tilde{n}_k^- \tilde{\omega}_k^- + \tilde{n}_k^+ \tilde{\omega}_k^+) + k_B T \sum_k \sum_{n^-, n^+} P_k(n^-, n^+) \ln P_k(n^-, n^+). \quad (3.92)$$

Vamos agora minimizar a energia livre com respeito a  $P_k(n^-, n^+)$  sob a restrição de Takahashi, em particular, usaremos também a restrição trivial da Eq. 3.88. A restrição introduzida por Takahashi [68, 125] é que a magnetização a campo nulo é zero. Esta restrição funciona muito bem, especialmente para ferromagnetos, servindo para controlar o número de bósons de Holstein-Primakoff. Aplicando a mesma restrição neste modelo

$$M = \langle S^z + s^z \rangle = 0, \quad (3.93)$$

obtemos

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

logo, podemos escrever a restrição da forma

$$\sum_k \sum_{\sigma=\pm} \sigma \tilde{n}_k^{-\sigma} = N(S - s). \quad (3.94)$$

Desta maneira, iremos minimizar a energia livre pelo método dos multiplicadores de Lagrange usando as restrições, Eq. 3.94 e Eq. 3.88. Então, introduziremos  $N + 1$  multiplicadores  $\mu_k$ 's e  $\mu$  e minimizaremos a quantidade  $\bar{F}$ , dada por

$$\bar{F} = F - \sum_k \mu_k \sum_{n^-, n^+} P_k(n^-, n^+) - \mu \sum_k \sum_{\sigma=\pm} \sigma \tilde{n}_k^{-\sigma}. \quad (3.95)$$

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

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

assim

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

portanto podemos escrever

$$P_k = \exp(\beta\mu_k - 1) \exp[-\beta n^-(\tilde{\omega}_k^- - \mu)] \exp[-\beta n^+(\tilde{\omega}_k^+ + \mu)]. \quad (3.96)$$

Entretanto, da Eq. 3.88

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

desta forma

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

logo

$$\begin{aligned} P_k &= (1 - \exp[-\beta(\tilde{\omega}_k^- - \mu)])(1 - \exp[-\beta(\tilde{\omega}_k^+ + \mu)]) \times \\ &\times \exp[-\beta n^-(\tilde{\omega}_k^- - \mu)] \exp[-\beta n^+(\tilde{\omega}_k^+ + \mu)]. \end{aligned} \quad (3.97)$$

Assim, usando as Eq. 3.92 e Eq. 3.97, podemos escrever a energia livre como:

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

então

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

Portanto, utilizando a Eq. 3.94, podemos escrever a expressão para a energia livre do sistema como

$$F = E_g + \mu(S - s)N - k_B T \sum_k \sum_{\sigma=\pm} \ln(1 + \tilde{n}_k^\sigma), \quad (3.98)$$

com

$$\tilde{n}_k^\sigma = \frac{1}{\exp[\beta(\tilde{\omega}_k^\sigma + \sigma\mu)] - 1} \quad (3.99)$$

onde  $\mu$  é o multiplicador de Lagrange (potencial químico) devido à condição 3.94.

### 3.3.4 Efeitos do Campo Magnético

A cadeia ferrimagnética de spins mistos ( $s, S$ ) exhibe dois platôs na curva de magnetização em função de  $B$ , em  $T = 0$ , ver Fig. 30. Estes platôs são limitados por dois pontos críticos quânticos ( $B = B_{c,FRI}$  e  $B_{c,FP}$ ), os quais repercutem [1, 6, 13, 129] nas propriedades físicas do sistema em baixa temperatura [66, 130].

Nesta seção vamos discutir a metodologia analítica que utilizamos para obter as propriedades térmicas de cadeias ferrimagnéticas alternadas de spins ( $s, S$ ) com um campo magnético aplicado.

#### Teoria ISW-FRIv

Como discutido anteriormente, devido à ordem ferrimagnética do estado fundamental, há dois tipos de excitações elementares (Fig. 33): 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 do vácuo FRI, são dadas por Eq. 3.71

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_{k,\sigma}^{(\text{FRIv})} &= \sigma J(S-s) - \sigma B + J\sqrt{(S-s)^2 + 4sS\sin^2\left(\frac{k}{2}\right)} - \frac{2J\Gamma_1(S+s)\sin^2(k/2)}{\sqrt{(S-s)^2 + 4sS\sin^2\left(\frac{k}{2}\right)}} + \\ &+ \frac{J\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \left[ \sqrt{(S-s)^2 + 4sS\sin^2\left(\frac{k}{2}\right)} + \sigma(S-s) \right]. \end{aligned}$$

Para longos comprimentos de onda podemos escrever que

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_{k,\sigma}^{(\text{FRIv})}(k \rightarrow 0) &= \sigma J(S-s) - \sigma B + J(S-s) \left[ 1 + \frac{sS}{(S-s)^2} k^2 \right]^{1/2} - \frac{J\Gamma_1(S+s)}{2(S-s)} k^2 \times \\ &\times \left[ 1 + \frac{sS}{(S-s)^2} k^2 \right]^{-1/2} + \frac{J\Gamma_2(S-s)}{\sqrt{sS}} \left\{ \left[ 1 + \frac{sS}{(S-s)^2} k^2 \right]^{1/2} + \sigma \right\} \end{aligned}$$

ou seja,

$$\tilde{\omega}_{k,\sigma}^{(\text{FRIv})} \approx \varepsilon_k^{(\text{FRIv})} + \Delta_{sS,\sigma}^{(\text{FRIv})} - \sigma B. \quad (3.100)$$

Sendo assim, a excitação de mais baixa energia das partículas pode ser aproximada por uma relação de dispersão não relativística, onde  $\varepsilon_k^{(\text{FRIv})} = \frac{\gamma}{2} k^2$ ,  $\gamma$  é a curvatura de banda, e  $v_0 = \sqrt{\gamma \Delta_{sS,\sigma}^{(\text{FRIv})}}$  corresponde à velocidade da onda de spin. A curvatura de banda e o *gap*  $\Delta_{sS,\sigma}^{(\text{ISW-FRIv})}$  são dados por

$$\gamma = \frac{2sS}{(S-s)} \left[ 1 - \frac{\Gamma_1(S+s)}{2sS} + \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \right] \quad (3.101)$$

e

$$\Delta_{sS,\sigma}^{(\text{ISW-FRIv})} = J(S-s)(1+\sigma) \left[ 1 + \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \right]. \quad (3.102)$$

Note que, para  $\sigma = -$ , o ramo de excitação ( $\tilde{\omega}_{k,-}^{(\text{FRIV})}$ ) é sem *gap* ( $\Delta_{sS,-}^{(\text{FRIV})} = 0$ ), este é o modo ferromagnético (F). Enquanto que, para  $\sigma = +$ , o ramo ( $\tilde{\omega}_{k,\sigma}^{(\text{FRIV})}$ ) apresenta um *gap* finito  $\Delta = \Delta_{sS,+}^{(\text{ISW-FRIV})}$ , este é o modo antiferromagnético (AF), onde

$$\Delta = 2J(S - s) \left[ 1 + \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \right]. \quad (3.103)$$

Na presença de um campo magnético  $B$  o modo F adquire um *gap*  $\Delta_F(B) = B$ . Além disso, com o aumento de  $B$ , o *gap* do modo AF decresce linearmente com  $B$ ,  $\Delta_{AF}(B) = \Delta - B$ . Para  $B = B_m = \Delta/2 = 0.838J$  seu *gap* é igual ao do modo ferromagnético. Em  $B = \Delta \equiv B_{c,\text{FRI}}^{(\text{ISW-FRIV})}$  o *gap* do modo AF se anula, e o modo de excitação de mais baixa energia é o modo AF. Neste regime, uma baixa densidade de magnons é encontrada no sistema [23, 131] e sua distribuição térmica efetiva é mapeada exatamente em uma teoria de férmions livres ou bósons de núcleo duro (HCB) [60, 132–135]. Assim, os magnons ocuparão estados de partículas individuais com  $k \rightarrow 0$  e com relação de dispersão dada pela Eq. 3.100. No regime de alta diluição,  $B \approx B_{c,\text{FRI}}^{(\text{FRIV})}$ , o sistema ainda pode ser aproximado pela teoria HCB uma vez que as interações residuais são proporcionais a  $B - B_{c,\text{FRI}}^{(\text{ISW-FRIV})}$ .

Portanto, a densidade de magnons antiferromagnéticos (modo AF) será dada pela distribuição de Fermi

$$\tilde{n}_{k,+}^{(\text{FRIV})} = \frac{1}{e^{\beta \tilde{\omega}_{k,+}^{(\text{FRIV})}} + 1}, \quad (3.104)$$

enquanto que para o modo F usamos  $\tilde{n}_{k,-}^{(\text{FRIV})}$  dado pela Eq. 3.99

$$\tilde{n}_{k,-}^{(\text{FRIV})} = \frac{1}{e^{\beta(\tilde{\omega}_{k,-}^{(\text{FRIV})} - \mu)} - 1}. \quad (3.105)$$

Sendo assim, iremos calcular, por exemplo, a magnetização do sistema, através da teoria ISW-FRIV utilizando a expressão:

$$m = (S - s) + \frac{1}{N} \sum_k \sum_{\sigma=\pm} \sigma \tilde{n}_{k,\sigma}^{(\text{FRIV})}. \quad (3.106)$$

### Teoria FSW-FPv

Como mostrado na Fig. 30 o campo magnético alcança o valor de saturação em  $B = B_{c,\text{FP}}$  o sistema se torna totalmente polarizado (FP) e apresenta excitações de baixa energia ferromagnéticas. Os modos de ondas de spin do estado FP, ambos baixando o spin total do estado fundamental em uma unidade, foram obtidos partindo de um estado ordenado distinto, a saber: todos os spins *up* (Fig. 34). Assim, na presença de um campo magnético  $B > B_{c,\text{FP}}$ , a relação de dispersão do modo de mais baixa energia é dada pela Eq. 3.83, assim

$$\omega_{k,0}^{(\text{FPv})} = -J(S + s) - J\sqrt{(S - s)^2 + 4sS \cos^2 k/2} + B. \quad (3.107)$$

Sendo assim, no limite em que  $k \rightarrow 0$ , temos:

$$\begin{aligned} \omega_{k,0}^{(\text{FPv})}(k \rightarrow 0) &\approx -J(S+s) - J(S-s) \left[ 1 + \frac{4sS}{(S-s)^2} (1 - k^2/4) \right]^{1/2} + B \Rightarrow \\ &\approx -J(S+s) - J(S-s) \left[ 1 + \frac{4sS}{(S-s)^2} - \frac{2sS}{(S-s)^2} k^2 \right]^{1/2} + B \Rightarrow \\ &\approx -J(S-s) \left[ 1 + \frac{4sS}{(S-s)^2} \right]^{1/2} + \frac{2JsS}{(S-s)} \left[ 1 + \frac{4sS}{(S-s)^2} \right]^{-1/2} k^2 - J(S+s) + B, \end{aligned}$$

desta forma, podemos escrever

$$\omega_{k,0}^{(\text{FPv})}(k \rightarrow 0) \approx \varepsilon_k^{(\text{FPv})} + B - \Delta_{sS,0}^{(\text{FSW-FPv})}, \quad (3.108)$$

onde  $\varepsilon_k^{(\text{FPv})} = J\tilde{\gamma}k^2/2$  e  $\Delta_{sS,0}^{(\text{FSW-FPv})} = 2J(S+s)$ , com  $\tilde{\gamma} = 4sS/(s+S)$ .

Este gap se anula no ponto  $B = \Delta_{sS,0}^{(\text{FSW-FPv})} = B_{c,FP}^{(\text{FSW-FPv})}$ , que é o valor do campo crítico de saturação e é um resultado exato. Assim, como no caso anterior, para o campo crítico  $B = B_{c,FP}^{(\text{FSW-FPv})}$  o sistema sofre uma transição de fase quântica e neste ponto o sistema é exatamente mapeado numa teoria HCB. Além disso, no limite de forte diluição, ou seja, para  $B \approx B_{c,FP}^{(\text{FSW-FPv})}$ , há uma baixa densidade de magnons condensados [23, 131], assim de maneira similar ao caso do campo crítico  $B_{c,FRI}^{(\text{ISW-FRIv})}$ , a estatística que melhor descreve a distribuição de magnons no sistema nesta região é a estatística de Fermi [23], ou seja, a densidade de magnons para o modo de mais baixa energia, pode ser escrita como uma distribuição fermiônica:

$$n_{k,0}^{(\text{FPv})} = \frac{1}{e^{\beta\tilde{\omega}_{k,0}^{(\text{FPv})}} + 1}, \quad (3.109)$$

enquanto que para o outro modo usamos  $\tilde{n}_{k,1}^{(\text{FPv})}$  dado pela Eq. 3.99

$$n_{k,1}^{(\text{FRIv})} = \frac{1}{e^{\beta(\tilde{\omega}_{k,1}^{(\text{FPv})} - \mu)} - 1}. \quad (3.110)$$

Desta forma, iremos calcular a magnetização do sistema através da teoria FSW-FPv utilizando a expressão

$$m = (S+s) - \frac{1}{N} \sum_k \sum_{\eta=0,1} n_{k,\eta}^{(\text{FRIv})}. \quad (3.111)$$

### 3.3.5 Magnetizações locais: teoria FSW-FRIv

A cadeia linear de spins alternados ( $s, S$ ) é formada por duas subredes: uma subrede com spins  $S$  (subrede **A**) e outra com spins  $s$  (subrede **B**), onde

$$\begin{aligned} S_j^z &= S - a_j^\dagger a_j \\ s_j^z &= -s + b_j^\dagger b_j. \end{aligned} \quad (3.112)$$

Sendo assim, os valores esperados das magnetizações das subredes **A** e **B**, são dados, respectivamente, por

$$\begin{aligned}\langle S^z \rangle &= S - \left\langle \sum_k a_k^\dagger a_k \right\rangle \\ \langle s^z \rangle &= -s + \left\langle \sum_k b_k^\dagger b_k \right\rangle.\end{aligned}\quad (3.113)$$

Além disso, através das transformações de Bogoliubov, podemos escrever para a subrede **A**:

$$a_k^\dagger a_k = \alpha_k^\dagger \alpha_k \cosh^2 \theta_k + \beta_k \beta_k^\dagger \sinh^2 \theta_k + \text{off-diagonal terms}.$$

Uma vez que em  $B = 0$  e  $T = 0$  as duas bandas estão vazias, podemos escrever que  $\beta_k^\dagger \beta_k = 0$  e  $\alpha_k^\dagger \alpha_k = 0$ , portanto

$$\langle S^z \rangle = S + 1/2 - \frac{S + s}{2} \sum_k \frac{1}{\omega_k^{(\text{FRIV})}} \quad (3.114)$$

onde,  $\omega_k^{(\text{FRIV})}$  é dada por

$$\omega_k^{(\text{FRIV})} = \sqrt{(S - s)^2 + 4sS \sin^2 k/2}.$$

Aqui, usamos também a Eq. 3.51.

Para a subrede **B**, podemos escrever que

$$b_k^\dagger b_k = \alpha_k^\dagger \alpha_k \sinh^2 \theta_k + \beta_k \beta_k^\dagger \cosh^2 \theta_k + \text{off-diagonal terms},$$

de forma análoga à subrede **A**,  $\beta_k^\dagger \beta_k = 0$  e  $\alpha_k^\dagger \alpha_k = 0$ , logo

$$\langle s^z \rangle = -s + 1/2 + \frac{S + s}{2} \sum_k \frac{1}{\omega_k^{(\text{FRIV})}}. \quad (3.115)$$

No limite termodinâmico, com  $S = 1$  e  $s = 1/2$ , temos que  $\langle S^z \rangle = 0.695$  e  $\langle s^z \rangle = -0.195$ , que são resultados razoáveis em relação aos valores exatos obtidos através do DMRG, que foram de 0.792 e  $-0.292$ , respectivamente [76, 77].

### 3.3.6 Magnetizações locais: teoria FSW-FPv

Para o caso do vácuo totalmente polarizado (FPv), temos:

$$\begin{aligned}S_j^z &= S - a_j^\dagger a_j \\ s_j^z &= s - b_j^\dagger b_j.\end{aligned}\quad (3.116)$$

Desta forma, o valor esperado da magnetização da subrede **A** é dado por

$$\langle S^z \rangle = S - \left\langle \sum_k a_k^\dagger a_k \right\rangle, \quad (3.117)$$

logo, das transformações de Bogoliubov, temos que

$$a_k^\dagger a_k = \alpha_k^\dagger \alpha_k \cos^2 \theta_k + \beta_k^\dagger \beta_k \sin^2 \theta_k + \text{off-diagonal terms.}$$

Neste caso, em  $B = 0$  e  $T = 0$  apenas a banda de mais baixa energia está ocupada, assim,  $\beta_k^\dagger \beta_k = 1$ , o que nos permite escrever

$$\langle S^z \rangle = S - \sin^2 \theta_k.$$

Sendo assim, da Eq. 3.85, temos, portanto

$$\langle S^z \rangle = S - 1/2 + \frac{S-s}{2} \sum_k \frac{1}{\omega_k^{(\text{FPv})}}. \quad (3.118)$$

onde,  $\omega_k^{(\text{FPv})}$  é dada por

$$\omega_k^{(\text{FPv})} = \sqrt{(S-s)^2 + 4sS \cos^2 k/2}.$$

No limite termodinâmico, para  $S = 1$  e  $s = 1/2$ , temos que  $\langle S^z \rangle = 0.768$ . Obtendo um excelente resultado em relação ao valor exato obtido através do DMRG, que foi de 0.792 [76, 77].

De maneira análoga podemos calcular o valor esperado da magnetização da subrede **B**. Assim, como

$$\langle s^z \rangle = s - \left\langle \sum_k b_k^\dagger b_k \right\rangle,$$

e das transformações de Bogoliubov

$$b_k^\dagger b_k = \alpha_k^\dagger \alpha_k \sin^2 \theta_k + \beta_k^\dagger \beta_k \cos^2 \theta_k + \text{termos não-diagonais.}$$

Adicionalmente, de forma análoga ao que foi feito para a subrede **A**, em  $B = 0$  e  $T = 0$  apenas a banda de mais baixa energia está ocupada, ou seja,  $\beta_k^\dagger \beta_k = 1$ . Então, com o uso da Eq. 3.85, podemos escrever

$$\langle s^z \rangle = s - 1/2 - \frac{S-s}{2} \sum_k \frac{1}{\omega_{k,0}^{(\text{FPv})}}. \quad (3.119)$$

Portanto, no limite termodinâmico, para  $S = 1$  e  $s = 1/2$ , temos que  $\langle s^z \rangle = -0.268$ . O valor exato é  $-0.292$  [76, 77].

O que de maneira geral se apresenta melhor que a teoria livre partindo do vácuo ferrimagnético. Uma vez que, no caso da cadeia com  $S = 1$  e  $s = 1/2$ , as diferenças dos resultados obtidos através dos dois métodos em relação aos valores exatos obtidos pelo DMRG são de aproximadamente 12% para  $\langle S^z \rangle$  e 33% para  $\langle s^z \rangle$ , a partir do vácuo FRI. Enquanto que a partir do vácuo FP, essas diferenças são de 3% e 8%, respectivamente.

## 4 DIAGRAMA DE FASES DA CADEIA FERRIMAGNÉTICA DE SPINS MISTOS (1/2, 1)

Neste capítulo, vamos aplicar a teoria de ondas de spin interagentes (ISW) usando um vácuo ferrimagnético (ISW-FRIv) para  $B \neq 0$  e  $T \neq 0$ , com a teoria modificada das ondas de spin (restrição de Takahashi), e a teoria das ondas de spin livres partindo de um vácuo totalmente polarizado (FWS-FPv), também para  $B \neq 0$  e  $T \neq 0$ , para ferrimagnetos de Heisenberg alternados, como por exemplo, a cadeia linear de spins mistos [136] e compararemos aos resultados obtidos com o Monte Carlo quântico (QMC). Esboçaremos todo o diagrama de fases  $T$  vs.  $B$  do sistema em baixas temperaturas, com as linhas de crossover em  $T$  finito que delimitam os regimes de platô e o regime do Líquido de Luttinger (LL), além do crossover que separa uma região onde as excitações são predominantemente do estado clássico ferrimagnético da região onde as excitações são predominantemente provenientes do estado clássico totalmente polarizado.

### 4.1 CURVAS DE MAGNETIZAÇÃO E SUSCEPTIBILIDADE: QMC

Na Fig. 36, mostramos resultados do QMC para  $m(B)$  da cadeia (1/2, 1) no regime de baixas temperaturas. Em  $T = 0$ ,  $m(B)$  apresenta dois platôs de magnetização: o platô ferrimagnético (FRI) em  $m_{FRI} = (S - s)$  e o platô totalmente polarizado (FP) em  $m_{FP} = (s + S)$ . Em particular, em  $T = 0$ ,  $m = m_{FRI}$  para  $B = 0$ , com um modo de Goldstone sem *gap*, induzido pela quebra espontânea da invariância de rotação do modelo. Há transições de fases quânticas nos pontos finais dos platôs:  $B = B_{c,FRI}$  e  $B = B_{c,FP}$ , respectivamente, que têm os valores  $B_{c,FRI} = 1.76J$  e  $B_{c,FP} = 3.00J$  para a cadeia (1/2, 1). Nos campos críticos, dos campos magnéticos  $B < B_{c,FRI}$  (quando  $B \rightarrow B_{c,FRI}$ ), ou dos campos magnéticos (quando  $B > B_{c,FP}$ ), há uma transição de uma fase de platô com *gap* à fase do Líquido de Luttinger (LL) sem *gap*. Na fase LL, as excitações têm uma relação de dispersão,  $\omega \sim q$ , e apresentam correlações críticas de spin do tipo lei de potência. Exatamente nos pontos críticos, as excitações têm uma relação de dispersão clássica ( $\omega \sim q^2$ ) e no limite de alta diluição pode ser representado pelo modelo de bósons de núcleo duro (HCB) ou modelo de férmions sem spin. Então, a magnetização e a susceptibilidade,

$$\begin{aligned} m &\sim \sqrt{|B - B_c|} \\ \chi &= \partial m / \partial B \sim 1 / \sqrt{|B - B_c|}, \end{aligned} \quad (4.1)$$

têm comportamento do tipo raiz quadrada e divergente, respectivamente (ver Eq. 4.1), quando  $B \rightarrow B_c$ .

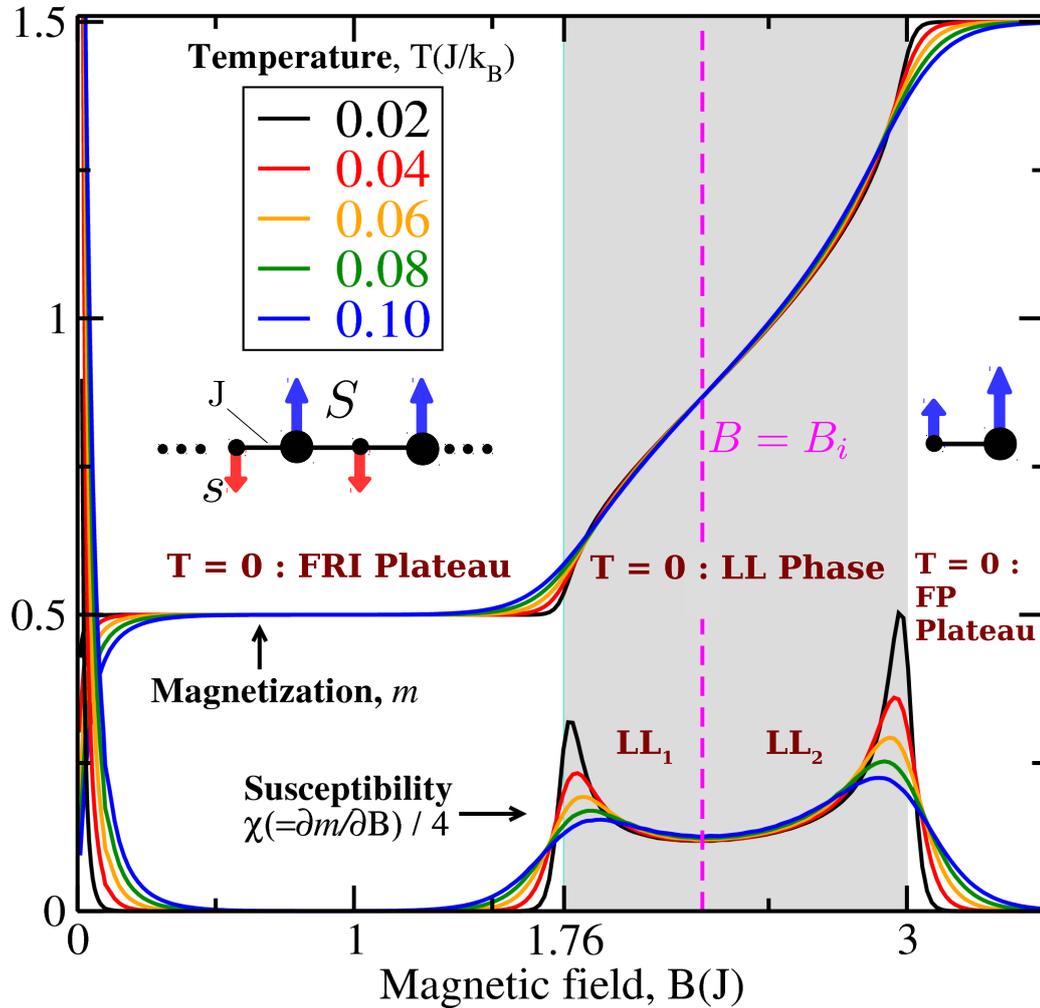


Figura 36 – Platôs de magnetização, fase de líquido de Luttinger e crossovers: resultados obtidos o método de Monte Carlo quântico. Magnetização por célula  $m$  e a susceptibilidade  $\chi = \partial m / \partial B$  como função do campo magnético  $B$  para uma cadeia de spins mistos ( $s = 1/2$ ,  $S = 1$ ) com  $N = 256$  células unitárias com seus valores de temperatura  $T$  indicados. Os pontos críticos quânticos dos platôs ferrimagnético (FRI) e totalmente polarizado (FP) são  $B_{c,FRI} = 1.76$  J e  $B_{c,FP} = 3$  J, respectivamente. A presença dos platôs FRI e FP, e a região do líquido de Luttinger (LL) é uma característica comum para todos os valores  $s$  e  $S$ , com  $S > s$ . Quando  $T \rightarrow 0$ ,  $\chi \rightarrow \infty$  nos valores críticos de  $B$ ; para  $T \gtrsim 0$ , máximos locais no gráfico de  $\chi$  marca o crossover do regime LL para o regime crítico quântico. Os mínimos locais no gráfico de  $\chi$  (linha tracejada) entre  $B_{c,FRI}$  e  $B_{c,FP}$  separa a região LL em duas partes: uma com excitações do estado FRI, LL<sub>1</sub>; e outra com excitações do estado FP, LL<sub>2</sub>.

Para  $T$  finito, mas  $T \rightarrow 0$ , a magnetização é nula para  $B = 0$  visto que o sistema é unidimensional. As excitações magnéticas com *gap* são termicamente ativadas e a largura

dos platôs é reduzida com o aumento da temperatura. A curva da susceptibilidade mostra máximos locais com amplitudes diferentes nos campos magnéticos de valores  $B \approx B_{c,FRI}$  e  $B \approx B_{c,FP}$ , marcando o crossover entre o regime LL onde as excitações tem um comportamento linear  $\omega \sim q$ , ver Sec. 2.4, e o regime crítico quântico no qual  $\omega \sim q^2$ . Nós podemos definir o mínimo local na curva  $\chi$ , em  $B \equiv B_i$ , que marca um crossover entre a região onde as excitações são predominantemente do estado FRI, denotado por  $LL_1$  na Fig. 36, e onde as excitações são predominantemente do estado FP, denotado por  $LL_2$  na Fig. 36. Em particular, para  $B \approx B_i$ , a curva de magnetização tem seu valor e comportamento mais robusto à medida que a temperatura aumenta, mostrando que a fase LL é mais robusta para  $B \approx B_i$ .

## 4.2 TEORIA ISW-FRIv

A teoria de ondas de spin de Holstein-Primakoff é desenvolvida do estado fundamental clássico (FRIv) mostrado na Fig. 31, que tem energia  $E_{class}^{(FRIv)} = -2JNsS - B(S - s)N$ . Os operadores bosônicos  $a_j$  ( $a_j^\dagger$ ) e  $b_j$  ( $b_j^\dagger$ ), associados aos sítios  $A$  e  $B$ , respectivamente, tem as seguintes relações com os operadores de spin (transformação de Holstein-Primakoff):

$$S_j^+ = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} a_j, \text{ and } S_j^z = S - a_j^\dagger a_j; \quad (4.2)$$

$$s_j^+ = b_j^\dagger \sqrt{2s} \left(1 - \frac{b_j^\dagger b_j}{2s}\right)^{1/2}, \text{ e } s_j^z = b_j^\dagger b_j - s. \quad (4.3)$$

Escrevemos o hamiltoniano (Eq. 3.42) em termos desses operadores bosônicos, expandindo até a ordem quadrática, fazendo a transformada de Fourier e fazendo a seguinte transformação de Bogoliubov [76, 77]:

$$a_k = \alpha_k \cosh \theta_k - \beta_k^\dagger \sinh \theta_k,$$

$$b_k = \beta_k \cosh \theta_k - \alpha_k^\dagger \sinh \theta_k, \quad (4.4)$$

$$\tanh 2\theta_k = 2 \frac{\sqrt{sS}}{s+S} \cos\left(\frac{k}{2}\right), \quad (4.5)$$

onde  $k$  é o vetor de onda da rede, o Hamiltoniano de ondas de spins não interagentes é dado por (para cálculos detalhados ver Sec. 3.3)

$$\mathcal{H}^{(FSW-FRIv)} = E_0 + \sum_k \left[ \omega_{k,-}^{(FRIv)} \alpha_k^\dagger \alpha_k + \omega_{k,+}^{(FRIv)} \beta_k^\dagger \beta_k \right]. \quad (4.6)$$

Os mágnons ferromagnéticos e antiferromagnéticos são

$$\omega_{k,\sigma}^{(FRIv)} = \sigma J(S - s) - \sigma B + J\omega_k^{(FRIv)}, \quad (4.7)$$

com  $\sigma = \pm, e$

$$\omega_k^{(\text{FRIv})} = \sqrt{(S - s)^2 + 4sS \sin^2\left(\frac{k}{2}\right)}, \quad (4.8)$$

enquanto a energia do estado fundamental é

$$E_0^{(\text{FRIv})} = J \sum_k \left[ \omega_k^{(\text{FRIv})} - (S + s) \right]. \quad (4.9)$$

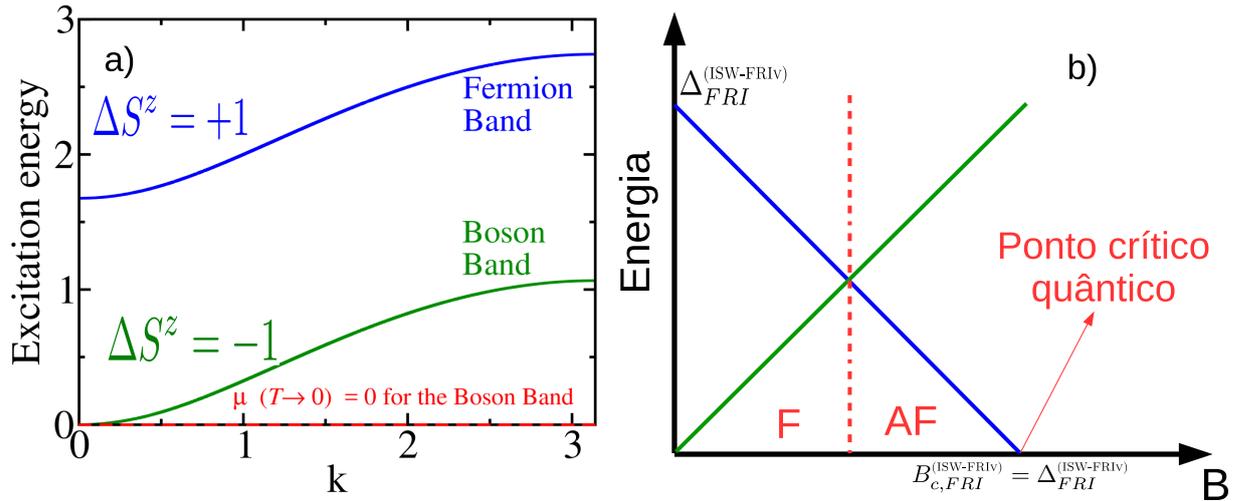


Figura 37 – Relações de dispersão corrigidas através do método de onda de spin interagente (ISW) a partir do vácuo ferrimagnético (FRIv) - energia dos modos dispersivos em função do campo magnético. a) Relações de dispersão para a cadeia ( $s = 1/2$ ,  $S = 1$ ) com  $B = 0$ . Há magnons ferromagnéticos e anti-ferromagnéticos, que carregam spin  $\Delta S^z = -1$  e  $\Delta S^z = 1$ , respectivamente. Os valores dos campos críticos são  $B_{c,FRI}^{(\text{ISW-FRIv})} = 1.68J$  e  $B_{c,FP}^{(\text{ISW-FRIv})} = 2.74J$ . b) Devido ao termo de Zeeman ( $-BS^z$ ) o *gap* do modo antiferromagnético (AF) diminui linearmente, uma vez que para este modo  $\Delta S^z = +1$ , enquanto que o *gap* do modo ferromagnético aumenta linearmente, pois para este modo  $\Delta S^z = -1$ . Há um cruzamento dos modos de onda de spin (indicado por uma linha tracejada). O *gap* do modo AF se torna nulo no ponto crítico quântico  $B_{c,FRI}^{(\text{ISW-FRIv})}$ .

O modo  $\omega_{k,-}^{(\text{FRIv})}$  carrega um spin  $\Delta S^z = -1$ , tendo onda de spin de natureza ferromagnética, sem *gap* para o valor  $B = 0$ ; enquanto o modo  $\omega_{k,+}^{(\text{FRIv})}$  carrega um spin  $\Delta S^z = +1$ , tendo uma onda de spin de natureza antiferromagnética e um *gap* de  $\Delta = 2J(S - s)$  em  $B = 0$ . Para a cadeia ( $s = 1/2$ ,  $S = 1$ ) [76, 77], por exemplo,  $\Delta = 1$ , apesar do valor exato ser  $1.76J$ ; enquanto  $\langle S^z \rangle = 0.695$  e  $\langle s^z \rangle = -0.195$  em  $T = 0$  (para cálculos detalhados ver Sec. 3.3.5), com os valores exatos [76, 77]:  $\langle S^z \rangle = 0.792$  and  $\langle s^z \rangle = -0.292$ .

As relações de dispersão podem ser melhoradas se interações entre os magnons são consideradas. As relações de dispersão corrigidas [70], mostradas na Fig. 37(a), são

(para cálculos detalhados ver Sec. 3.3.1):

$$\tilde{\omega}_{k,\sigma}^{(\text{FRIv})} = \omega_{k,\sigma}^{(\text{FRIv})} - J\delta\omega_{k,\sigma}^{(\text{FRIv})}, \quad (4.10)$$

onde

$$\delta\omega_{k,\sigma}^{(\text{FRIv})} = 2\Gamma_1 \frac{(S+s)}{\omega_k^{(\text{FRIv})}} \sin^2(k/2) - \frac{\Gamma_2}{\sqrt{sS}} \left[ \omega_k^{(\text{FRIv})} + \sigma(S-s) \right],$$

com

$$\Gamma_1 = \frac{1}{N} \sum_k \sinh^2 \theta_k, \text{ and} \quad (4.11)$$

$$\Gamma_2 = \frac{1}{N} \sum_k \cos(k/2) \sinh \theta_k \cosh \theta_k. \quad (4.12)$$

Até a ordem  $\mathcal{O}(S^0)$ , o Hamiltoniano é dado por

$$\mathcal{H}^{(\text{ISW-FRIv})} = E_g + \sum_k \left( \tilde{\omega}_{k,-}^{(\text{FRIv})} \alpha_k^\dagger \alpha_k + \tilde{\omega}_{k,+}^{(\text{FRIv})} \beta_k^\dagger \beta_k \right), \quad (4.13)$$

onde

$$E_g^{(\text{FRIv})} = E_{class}^{(\text{FRIv})} + E_0^{(\text{FRIv})} + E_1^{(\text{FRIv})}, \quad (4.14)$$

com

$$E_1^{(\text{FRIv})} = -2JN \left[ \Gamma_1^2 + \Gamma_2^2 - \left( \sqrt{S/s} + \sqrt{s/S} \right) \Gamma_1 \Gamma_2 \right]. \quad (4.15)$$

Em  $T = 0$ , a magnetização como uma função de  $B$ , mostrada na Fig. 36 para a cadeia ( $s = 1/2$ ,  $S = 1$ ), pode ser entendida a partir desses magnons ferromagnéticos ( $\Delta S^z = -1$ ) e antiferromagnéticos ( $\Delta S^z = 1$ ). Para  $B = 0$ , as duas bandas estão vazias e a magnetização é a ferrimagnética. Na Fig. 37(b) mostramos que aumentando o valor do campo magnético, a banda ferromagnética adquire um *gap* que aumenta linearmente com  $B$ , enquanto que o *gap* do modo antiferromagnético decresce linearmente com  $B$ . Note, em particular, que o modo ferromagnético é vazio para qualquer valor de  $B$ . Em  $B = B_{c,\text{FRI}}^{(\text{ISW-FRIv})}/2 = \Delta_{\text{FRI}}^{(\text{ISW-FRIv})}/2$ , o modo  $k = 0$  da banda antiferromagnética é o estado de menor energia, e em  $B = B_{c,\text{FRI}}^{(\text{ISW-FRIv})} = \Delta_{\text{FRI}}^{(\text{ISW-FRIv})}$ , o *gap* deste modo é nulo. O valor de  $B_{c,\text{FRI}}^{(\text{ISW-FRIv})}$  é

$$B_{c,\text{FRI}}^{(\text{ISW-FRIv})} = \tilde{\omega}_{0,+}^{(\text{FRIv})} = 2(S-s) \left( 1 + \frac{1}{\sqrt{sS}} \Gamma_2 \right) J. \quad (4.16)$$

Em particular, para a cadeia ( $s = 1/2$ ,  $S = 1$ ), com  $\Gamma_1 = 0.305$  e  $\Gamma_2 = 0.478$ ,  $B_{c,\text{FRI}}^{(\text{ISW-FRIv})} = 1.68J$ , que é muito mais próximo do valor exato ( $1.76J$ ).

A magnetização para  $B > \Delta_{\text{FRI}}^{(\text{ISW-FRIv})}$  é obtida considerando os magnons antiferromagnéticos como bósons de núcleo duro (HCB) [40] ou férmions sem spin. A magnetização aumenta com  $B$  quando a banda antiferromagnética é preenchida e satura quando o nível de Fermi alcança o limite da banda, em  $k = \pi$ . O campo de saturação é

$$B_{c,\text{FP}}^{(\text{ISW-FRIv})} = \tilde{\omega}_{\pi,+}^{(\text{FRIv})} = 2 \left( S - \Gamma_1 + \sqrt{\frac{S}{s}} \Gamma_2 \right) J, \quad (4.17)$$

que para a cadeia ( $s = 1/2$ ,  $S = 1$ ) é  $B_{c,FP}^{(ISW-FRIv)} = 2.74$ , distante do valor exato  $3J$ , mas muito melhor do que o resultado de  $2J$  obtido através da onda de spin livre.

### 4.2.1 Termodinâmica

Para  $T > 0$ , os modos ferromagnético e antiferromagnético são ocupados conforme as distribuições de Bose-Einstein ( $n_{k,-}^{(FRIv)}$ ) e Fermi-Dirac ( $n_{k,+}^{(FRIv)}$ ), respectivamente, como indicado na Fig. 37(a). A magnetização, por exemplo, é dado por

$$m(T, B) = (S - s) + \frac{1}{N} \sum_k (n_{k,+}^{(FRIv)} - n_{k,-}^{(FRIv)}). \quad (4.18)$$

Notamos, no entanto, que com  $T > 0$  e  $B = 0$ , a banda ferromagnética será termicamente ativada e  $m \rightarrow -\infty$  quando  $T$  aumenta. Esse problema surge também em uma cadeia unidimensional ferromagnética e foi superado por Takahashi [68, 125], no regime de baixas temperaturas, através da introdução de um potencial químico efetivo  $\mu$  na distribuição bosônica e uma restrição  $m(B = 0, T) = 0$ . Uma estratégia similar foi aplicada a sistemas unidimensionais ferrimagnéticos [71] e bons resultados foram obtidos no regime de baixa temperatura. O regime intermediário de temperatura, onde o mínimo na curva da susceptibilidade *versus*  $T$  em ferrimagnetos [43] é observado, pode ser mais precisamente descrito se outros vínculos são considerados [70, 73, 74].

Aqui, para  $B = 0$ , usamos a restrição

$$m(T, B = 0) = 0, \quad (4.19)$$

uma vez que estamos interessados no regime de baixo  $T$ , com (para cálculos detalhados ver Sec. 3.3.3)

$$n_{k,-}^{(FRIv)} = \frac{1}{e^{\beta[\tilde{\omega}_{k,-}^{(FRIv)} - \mu]} - 1}, \quad (4.20)$$

$$n_{k,+}^{(FRIv)} = \frac{1}{e^{\beta\tilde{\omega}_{k,+}^{(FRIv)}} + 1}. \quad (4.21)$$

Na Fig. 38, apresentamos  $m(T, B = 0)$  para os valores de  $T$  indicados. Como discutido,  $m \rightarrow -\infty$  em  $\mu = 0$  e os valores de  $\mu$  para os quais a restrição  $m(T, B = 0) = 0$  é satisfeita, decresce monotonicamente com  $T$ , neste regime de baixa temperatura. Um valor de  $\mu$  finito implica em um *gap* efetivo para a banda ferromagnética, com uma ativação térmica exponencial de seus magnons. Em particular, note que  $\mu(T \rightarrow 0) = 0$ , como esperado. Para calcular as funções termodinâmicas para  $B \neq 0$ , consideramos as Eq. 4.20 e Eq. 4.21 e usamos os mesmos valores de  $\mu$  encontrados no caso  $B = 0$ :  $\mu(B, T) = \mu(B = 0, T)$ , para qualquer valor de  $B$ . A magnetização como uma função de  $B$  para  $T \neq 0$ , mostrada na Fig. 36, pode ser qualitativamente compreendida desta teoria. Para  $B = 0$ , a magnetização é

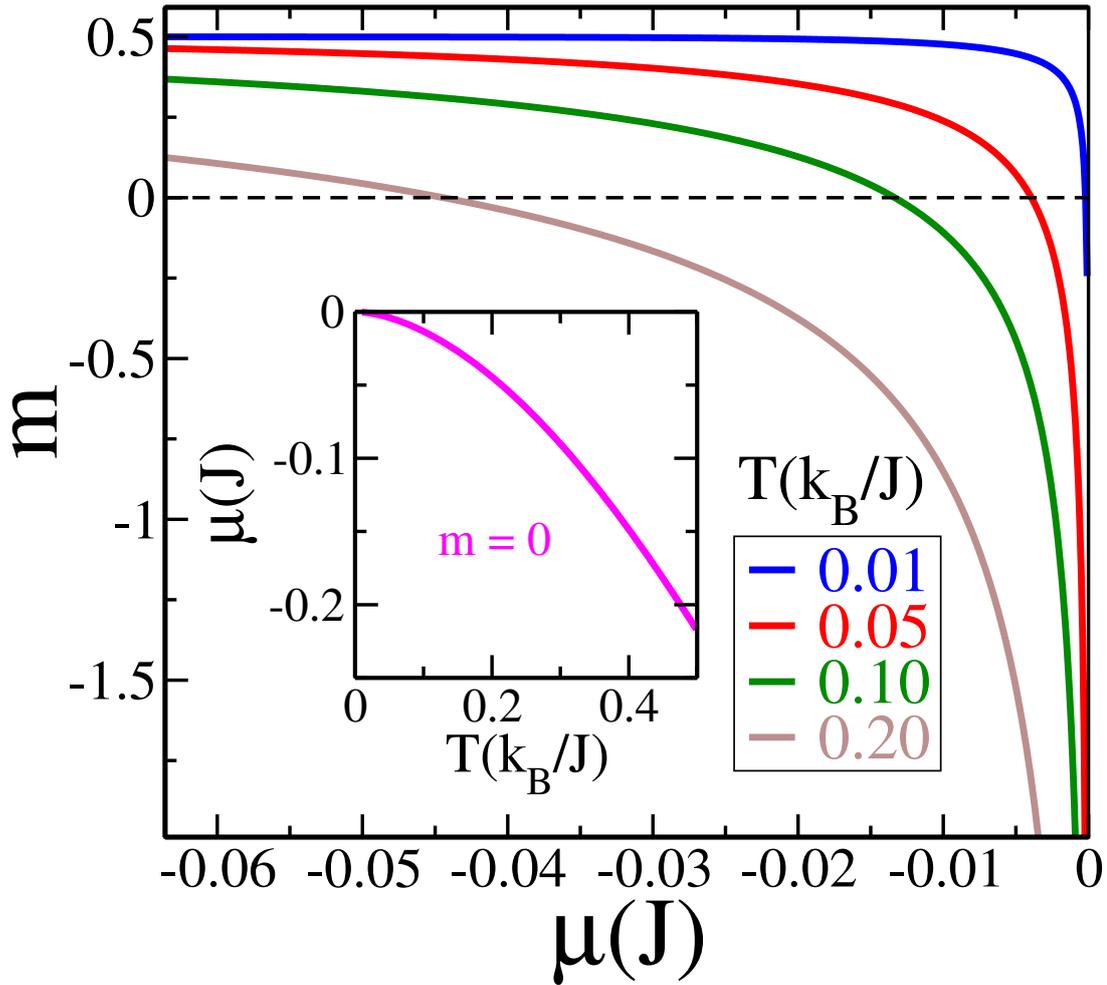


Figura 38 – Para calcular as funções termodinâmicas, os magnons antiferromagnéticos (ferromagnéticos) ocupam suas respectivas bandas seguindo as funções de distribuição fermiônica (bosônica). Um potencial químico efetivo  $\mu$  é introduzido nas distribuições bosônicas a fim de prevenir a condensação das partículas no modo  $k = 0$  para  $B = 0$  e  $T \rightarrow 0$ . Para cada valor de  $T$ , nós usamos um valor de  $\mu$  tal que  $m = 0$  para  $B = 0$ . A figura inserida mostra que  $\mu(T = 0) \rightarrow 0$  quando  $T \rightarrow 0$ . Neste limite, ambas bandas estão vazias e  $m = (S - s) = 1/2$ , a magnetização do estado FRI.

$m = 0$  devido ao vínculo de Takahashi. Quando  $B$  aumenta, na região  $0 < B < B_{c,FRI}/2$ , o *gap* para o modo ferromagnético aumenta, mas sua banda é termicamente ativada e a magnetização decresce do valor  $m = S - s$ . Este efeito pode também ser visto da Fig. 38. Se movermos o termo de Zeeman  $+B$  da relação de dispersão ferromagnética ao potencial químico,  $\tilde{\omega}_{k,-}^{(FRIv)} \rightarrow \tilde{\omega}_{k,-}^{(FRIv)} - B$  e  $-\mu \rightarrow -(\mu - B)$ , na Eq. 4.21, o valor da magnetização é o valor mostrado na Fig. 38 para  $\mu$  menor que o de  $B = 0$  e  $m = 0$ . Da Fig. 38, vemos que aumentando  $B$  (diminuindo  $\mu$ ) de  $B = 0$  [de  $\mu(B = 0, T)$ ], a magnetização sobe exponencialmente ao valor do estado ferrimagnético. Para  $B = B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)}/2$ , a banda de menor energia é a banda fermiônica antiferromagnética (magnons  $\Delta S^z = +1$ ). Esta banda é termicamente ativada para  $[B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)}/2] < B < B_{c,FRI}$  e a magnetização é maior

que  $S - s$ . A magnetização aumenta através do preenchimento desta banda, de acordo com a distribuição de Fermi, até o valor de saturação  $m = s + S$ , que é exponencialmente atingido.

### 4.3 TEORIA FSW-FPV

Mostramos que essa teoria fornece uma boa descrição da física em baixas temperaturas e é quantitativamente muito melhor do que a descrição da teoria de ondas de spin livres a partir do vácuo ferrimagnético. O campo crítico de saturação tem um valor exato, enquanto que o campo crítico no fim do platô ferrimagnético é  $B_{c,FRI}^{(FSW,FPV)} = 2J$ .

A transformação de Holstein-Primakoff neste caso é

$$S_j^+ = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} a_j, \text{ e } S_j^z = S - a_j^\dagger a_j; \quad (4.22)$$

$$s_j^+ = \sqrt{2s} \left(1 - \frac{b_j^\dagger b_j}{2s}\right)^{1/2} b_j, \text{ e } s_j^z = s - b_j^\dagger b_j, \quad (4.23)$$

com os dois bósons baixando a magnetização do sítio em uma unidade. Até ordem quadrática nesses operadores bosônicos, o hamiltoniano do sistema pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(FSW-FPV)} = & E_{class}^{(FPV)} + J \sum_j \left\{ -s (a_j^\dagger a_j + a_{j+1}^\dagger a_{j+1}) \right. \\ & - 2S b_j^\dagger b_j + \sqrt{sS} \left[ (a_j + a_{j+1}) b_j^\dagger + (a_j^\dagger + a_{j+1}^\dagger) b_j \right] \\ & \left. + B \sum_j (a_j^\dagger a_j + b_j^\dagger b_j) \right\}, \end{aligned} \quad (4.24)$$

com  $E_{class}^{(FPV)} = 2JNsS - B(S + s)N$ . Fazendo a transformada de Fourier dos operadores bosônicos e usando a transformação de Bogoliubov

$$a_k^\dagger = \alpha_k^\dagger \cos \theta_k - \beta_k^\dagger \sin \theta_k; \quad (4.25)$$

$$b_k^\dagger = \beta_k^\dagger \cos \theta_k + \alpha_k^\dagger \sin \theta_k, \quad (4.26)$$

combinada com

$$\tan 2\theta_k = 2 \frac{\sqrt{sS}}{S - s} \cos\left(\frac{k}{2}\right), \quad (4.27)$$

logo, o hamiltoniano na Eq. 4.24 é escrito como

$$\mathcal{H}^{(FSW-FPV)} = E_{class}^{(FPV)} + \sum_k \left[ \omega_{k,1}^{(FPV)} \alpha_k^\dagger \alpha_k + \omega_{k,0}^{(FPV)} \beta_k^\dagger \beta_k \right], \quad (4.28)$$

onde as relações de dispersão [80]  $\omega_{k,\eta}^{(FPv)}$  são

$$\omega_{k,\eta}^{(FPv)} = (-1)^{\eta+1} \sqrt{(S-s)^2 + 4sS \cos^2\left(\frac{k}{2}\right)} - (S+s) + B, \quad (4.29)$$

com  $\eta = 0$  ou  $1$ .

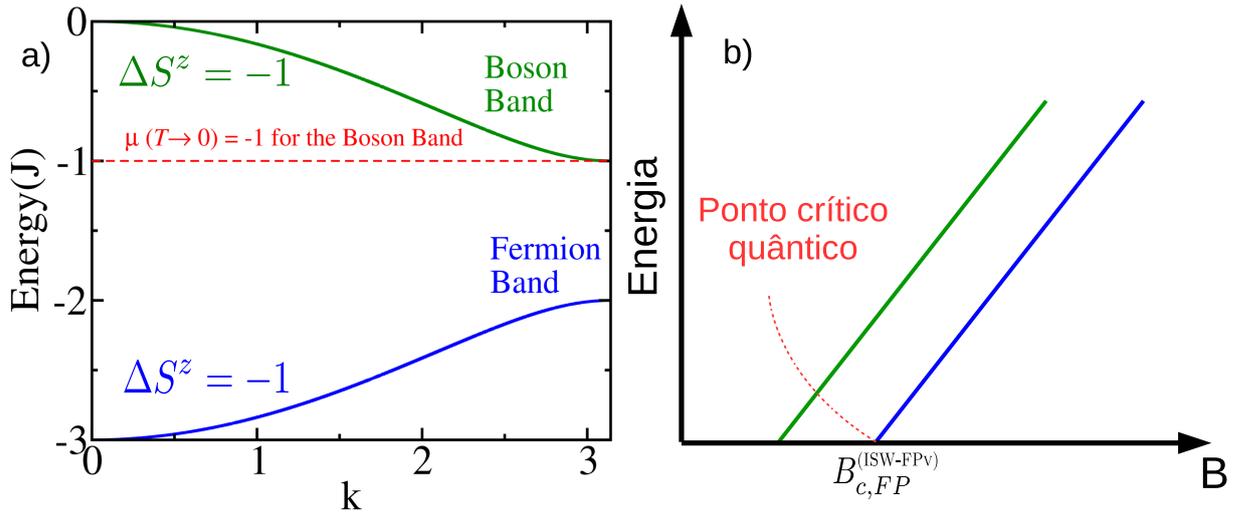


Figura 39 – Relação de dispersão obtida da onda de spin livre a partir do vácuo totalmente polarizado - energia dos modos dispersivos em função do campo magnético. (a) Resultados do método de ondas de spin livres (FSW) para as energias dos magnons relativos ao vácuo totalmente polarizado (FPv) para a cadeia ( $s = 1/2, S = 1$ ) em  $T \neq 0$  e  $B = 0$ . Neste caso, ambos os ramos são ferromagnéticos (F) com os magnons carregando um spin de  $\Delta S^z = -1$ . b) A energia dos modos F diminui à medida que o campo magnético decresce, uma vez que o termo de Zeeman ( $-BS^z$ ) aumentam linearmente com  $B$  para estes modos. O ponto crítico quântico  $B_{c,FP}^{(FSW-FPv)}$  é indicado.

Para discutir a curva de magnetização em  $T = 0$  obtida dos modos de onda de spin acima, mostramos na Fig. 39(a) as relações de dispersão  $\omega_{k,\eta}^{(FPv)}$  para a cadeia ( $s = 1/2, S = 1$ ) e  $B = B_{c,FP}^{(FSW,FPv)} = 2J(s+S) = 3J$ , bem como na Fig. 39(b) mostramos o comportamento da energia dos modos dispersivos em função do campo magnético. Em  $B = B_{c,FP}^{(FSW,FPv)} = B_{c,FP}$ , ambas as bandas estão vazias, e a magnetização é a totalmente polarizada. Decrescendo  $B$ , a banda  $\eta = 0$  é preenchida de acordo com a estatística de Fermi-Dirac e a magnetização decresce. O campo crítico no ponto final do platô ferrimagnético é obtido fazendo  $\omega_{\pi,0}^{(FPv)} = 0$ , que implica  $B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)} = 2SJ$ , igual a  $2J$  para a cadeia ( $s = 1/2, S = 1$ ). Neste valor de  $B$ , a banda  $\eta = 0$  está totalmente preenchida e  $m = (s+S) - 1$ , obtendo  $1/2$  para a cadeia ( $s = 1/2, S = 1$ ). Há um *gap* de  $2(S-s)J$  entre as bandas  $\eta = 0$  e  $\eta = 1$ , em  $k = \pi$ ; conseqüentemente, a banda bosônica  $\eta = 1$  iniciará a ser preenchida em  $B = B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)} - 2(S-s)J$ , e a teoria não reproduziria qualitativamente

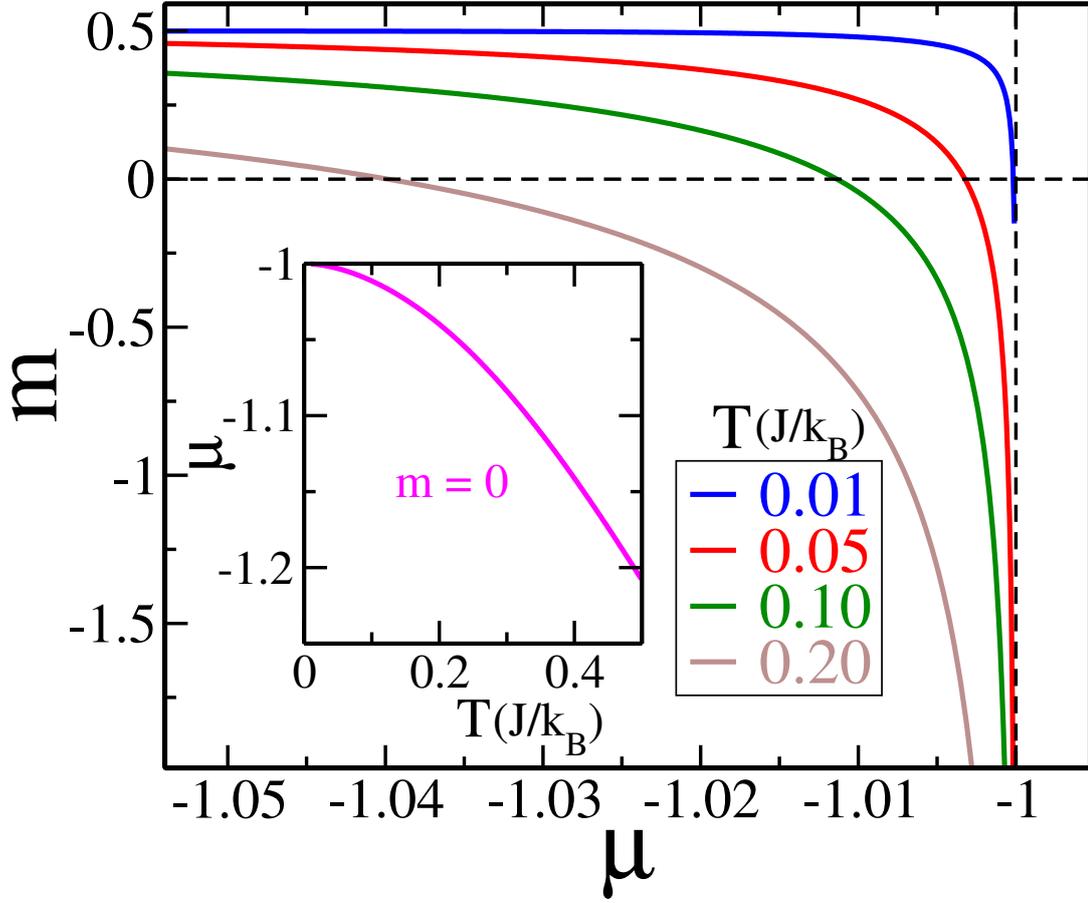


Figura 40 – Para calcular as funções termodinâmicas, a banda mais baixa (alta) é preenchida seguindo a função de distribuição fermiônica (bosônica) para prevenir a condensação dos magnons no modo  $k = \pi$  para  $B = 0$  e  $T \rightarrow 0$ . Os campos críticos são  $B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)} = 2.00J$  e  $B_{c,FP}^{(FSW,FPv)} = 3.00J$ . O potencial químico  $\mu$  é escolhido tal que  $m = 0$  para  $B = 0$ . A figura inserida mostra que  $\mu(T \rightarrow 0) \rightarrow -1$  quando  $T \rightarrow 0$ . Neste limite, somente a banda de mais baixa energia é ocupada, implicando que  $m \rightarrow (S - s) = 1/2$  para a magnetização ferrimagnética, quando  $T \rightarrow 0$  e  $B \rightarrow 0$ .

a curva de magnetização quando  $T \rightarrow 0$ . Este problema é superado considerando a teoria em temperaturas finitas, com o vínculo de Takahashi e um potencial químico efetivo. Para temperatura finita  $T$ , a magnetização é dada por

$$m(T, B) = (S + s) - \frac{1}{N} \sum_k [n_{k,0}^{(FPv)} + n_{k,1}^{(FPv)}], \quad (4.30)$$

onde

$$n_{k,0}^{(FPv)} = \frac{1}{e^{\beta \omega_{k,0}^{(FPv)}} + 1}, \quad (4.31)$$

$$n_{k,1}^{(FPv)} = \frac{1}{e^{\beta [\omega_{k,1}^{(FPv)} - \mu]} - 1}. \quad (4.32)$$

O vínculo, que é aplicado em  $B = 0$ , é

$$m(T, B = 0) = 0. \quad (4.33)$$

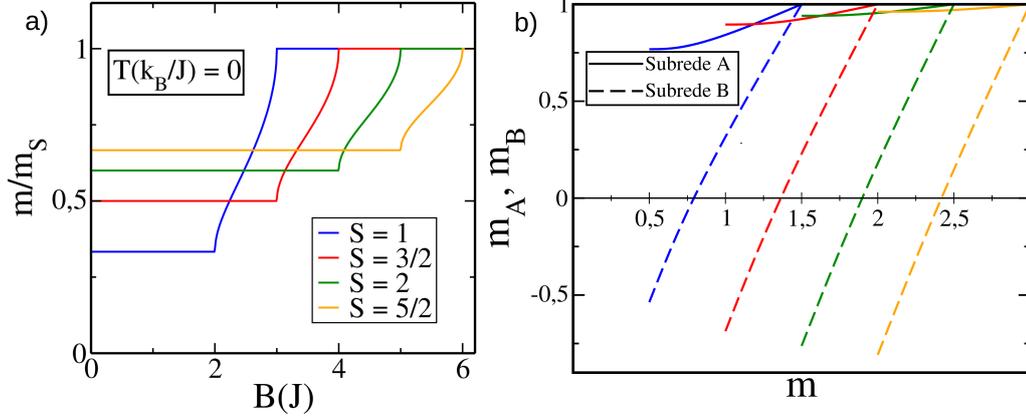


Figura 41 – Magnetizações locais ( $\langle S^z \rangle / S \equiv m_A$  e  $\langle s^z \rangle / s \equiv m_B$ ) para  $B \neq 0$ . a) Magnetização de cadeias de spins mistos (1/2,  $S$ ) como função do campo magnético em  $T = 0$  para quatro valores diferentes de  $S$  (spin da subrede A). b) Magnetizações locais em função da magnetização do sistema para vários valores de  $S$  em  $T = 0$ .

Na Fig. 40, apresentamos a magnetização como função do potencial químico efetivo para os valores de temperatura indicados. Notamos que  $m \rightarrow -\infty$  quando a temperatura aumenta, de maneira similar à teoria de onda de spin com o vácuo ferrimagnético. No entanto, neste caso  $\mu \rightarrow -1$  quando  $T \rightarrow 0$ , como mostrado na figura inserida em Fig. 40. Consequentemente, um potencial químico efetivo  $\mu = -1$  associado à banda bosônica  $\eta = 1$  deve ser considerado na teoria em  $T = 0$ . Com este potencial químico, a banda  $\eta = 1$  permanece vazia em  $T = 0$  para qualquer valor de  $B$ .

As funções termodinâmicas são calculadas usando a Eq. 4.32, com  $\mu(T, B) = \mu(T, B = 0)$ . Para  $T$  finito, a banda fermiônica  $\eta = 0$  está completamente preenchida e a ocupação da banda  $\eta = 1$  é tal que  $m = 0$ . Considerando o regime de baixa temperatura, quando  $B$  aumenta, a energia das duas bandas sobe, baixando a ocupação total da banda  $\eta = 1$  uma vez que  $\omega_{k,1}^{(FPv)} - \mu$  aumenta linearmente com  $B$  para qualquer  $k$ , e  $m$  aumenta. A magnetização atinge exponencialmente o valor no platô ferrimagnético,  $m = S - s$ , uma vez que  $n_{k,1}^{(FPv)} \rightarrow 0$  para qualquer  $k$  quando  $B$  aumenta e a banda  $\eta = 0$  está completamente preenchida. Para  $[B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)} / 2] < B < B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)}$ , com  $[B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)} / 2]$  relacionado ao ponto  $B = B_{c,FRI} / 2$  na Fig. 36, a ocupação da banda  $\eta = 0$  decresce do caso  $T = 0$ :  $n_{k,0}^{(FPv)} = 1$  para qualquer  $k$ , e a magnetização é maior que  $S - s$ . A magnetização aumenta com  $B$  e atinge exponencialmente o valor totalmente polarizado em  $B > B_{c,FP}^{(FSW,FPv)}$ , uma vez que os magnons na banda  $\eta = 0$  são termicamente excitados.

Na Fig. 41, expomos nossos resultados para as magnetizações locais ( $\langle S^z \rangle / S \equiv m_A$  e  $\langle s^z \rangle / s \equiv m_B$ ) em  $T = 0$  para alguns valores de  $S$ , mantendo o valor do spin  $s$  fixo em

$s = 1/2$ , variando o campo magnético. Com o campo magnético aplicado, podemos escrever que, no limite termodinâmico, teremos, para a magnetização da subrede **A**

$$\langle S^z \rangle = S - \frac{1}{2} \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dk}{2\pi} n_k + \frac{S-s}{2} \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dk}{2\pi} \frac{n_k}{\omega_{k,0}^{(\text{FPv})}}, \quad (4.34)$$

onde  $k_F = \pi[(S+s) - m]$ ,  $m$  sendo a magnetização do sistema e  $n_k$  a densidade de partículas ( $n_k = 1$  em  $[-k_F, k_F]$ ). O que pode ser feito de maneira análoga para a subrede **B** (ver Sec. 3.3.6).

## 4.4 COMPARAÇÃO ENTRE O MÉTODO QMC E AS DUAS APROXIMAÇÕES SWT

Na Fig. 42, apresentamos as curvas da magnetização e da susceptibilidade  $\chi = \partial m / \partial B$  como uma função de  $B$  das teorias ISW-FRIv e FSW-FPv juntamente com dados do QMC, em  $T = 0.02J$ . Uma vez que a aproximação ISW-FRIv fornece um resultado melhor para  $B_{c,\text{FRI}}$ , esta teoria é melhor na vizinhança deste campo crítico. Por outro lado, a aproximação FSW-FPv é melhor na vizinhança de  $B_{c,\text{FP}}$ . Além disso, as amplitudes dos dois picos em  $\chi(B)$ , que marca o crossover para o regime LL, têm valores menores que os dados pelo QMC. A diferença entre as amplitudes das aproximações de ondas de spin e dados do QMC está relacionada às limitações das teorias de ondas de spin. Apesar disso, a descrição de ambas SWT são qualitativamente excelentes e quantitativamente razoáveis no regime de baixa temperatura.

Agora, vamos obter o diagrama de fases  $T$  vs  $B$  no regime de baixas temperaturas usando a teoria FSW-FPv. Estudamos as linhas de crossover entre os regimes LL e os regimes críticos quânticos, como também as linhas de crossover entre os regimes de platô e os regimes críticos quânticos. Utilizamos a aproximação FSW-FPv pois possui essencialmente a mesma precisão da teoria ISW-FRIv se considerarmos o intervalo de  $B$  de 0 ao campo de saturação; além disso, o ponto crítico  $B_{c,\text{FP}}$  é exato na teoria FWS-FPv.

## 4.5 REGIME LÍQUIDO DE LUTTINGER

Na região do regime do líquido de Luttinger (fase LL), a relação de dispersão pode ser aproximada por  $\pm v_F |k - k_F|$  (ver Sec. 2.4), onde  $v_F$  é a velocidade de Fermi. Além disso, neste regime a magnetização tem a forma [23]

$$m = m(T=0) - \frac{\pi}{6v_F^2} \frac{\partial v_F}{\partial B} (k_B T)^2 + O(T^3). \quad (4.35)$$

Em nosso caso, a velocidade de Fermi ao longo da banda  $\eta = 0$  é  $v_F = [\partial \omega_{k,0}^{(\text{FPv})} / \partial k]_{k=k_F}$ ,

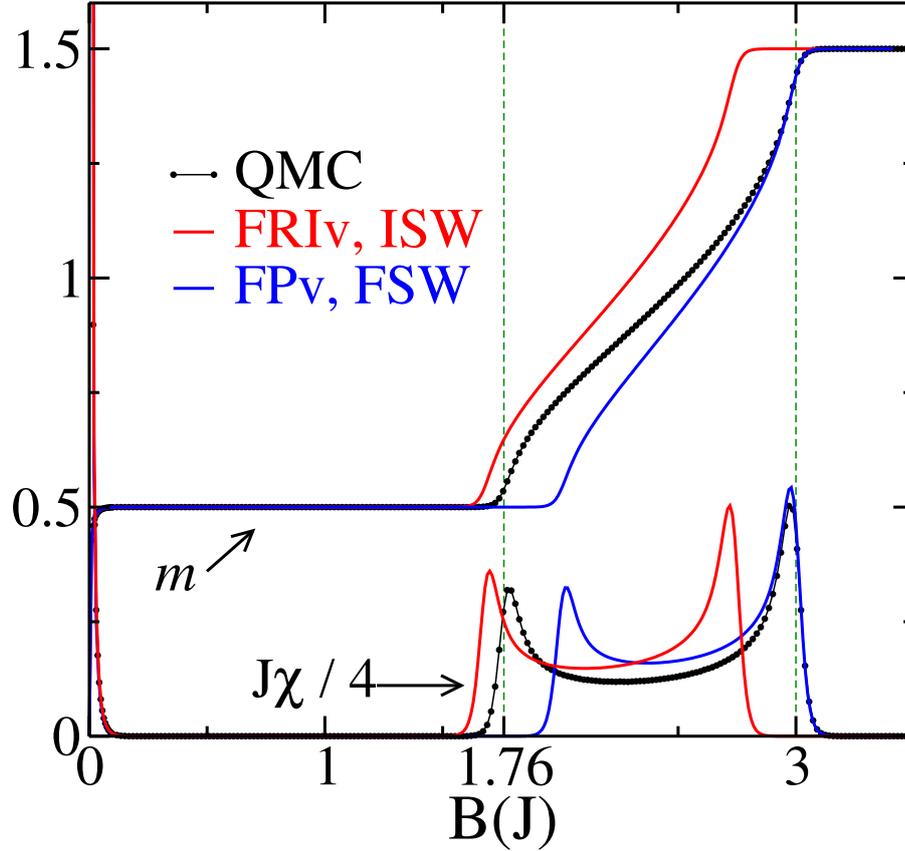


Figura 42 – Comparação entre o método do Monte Carlo quântico (QMC),  $N = 256$  células unitárias, e as duas aproximações de onda de spin para a magnetização por célula  $m$  e a susceptibilidade  $\chi$ : a cadeia ( $s = 1/2$ ,  $S = 1$ ) na temperatura  $T = 0.02(J/k_B)$ . Resultados para a teoria de ondas de spin interagentes a partir do vácuo ferrimagnético (ISW-FRIv) e a teoria de ondas de spin livres a partir do vácuo totalmente polarizado (FSW-FPv) se compara bem com o QMC para  $B \lesssim B_{c,FRI}$  e  $B \gtrsim B_{c,FP}$ . O máximo em  $\chi$  relacionado ao campo magnético  $B_{c,FRI}$  ( $B_{c,FP}$ ) é melhor localizado, em comparação ao QMC, através da aproximação ISW-FRIv (FSW-FPv).

com  $k_F$  calculado de  $\omega_{k,0}^{(FPv)}|_{k=k_F} = 0$ .

Na Fig. 43(a), apresentamos  $v_F$  como uma função de  $B$  para a cadeia (1/2, 1). Próximo aos campos críticos,  $|\partial v_F / \partial B|$  é grande e  $v_F$  é pequeno. Para um valor fixo  $B \gtrsim B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)}$ , como mostrado na Fig. 43(b), a magnetização apresenta um rápido decaimento do valor em  $T = 0$  quando  $T$  aumenta. Além disso, para  $B \lesssim B_{c,FP}^{(FSW,FPv)}$ , como mostrado na Fig. 43(c),  $m$  aumenta do valor  $m(0)$ . Em ambos os casos, a curvatura de  $m(T \rightarrow 0)$  aumenta quando  $B$  se aproxima dos campos críticos. A temperatura de crossover  $T(B)$  do regime LL em um  $B$  fixo é definida como o ponto em que  $m(T)$  sai do comportamento quadrático na Eq. 4.35. Então, é necessário  $T(B)$  ser mínimo ( $B \gtrsim B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)}$ ) e máximo ( $B \lesssim B_{c,FP}^{(FSW,FPv)}$ ) da curva  $m(T)$  [23]. Em particular, quando  $B \rightarrow B_c$ , a linha de crossover separa o regime LL e o regime crítico quântico para o qual as excitações têm uma relação de dispersão quadrática. Neste caso, pode ser derivada

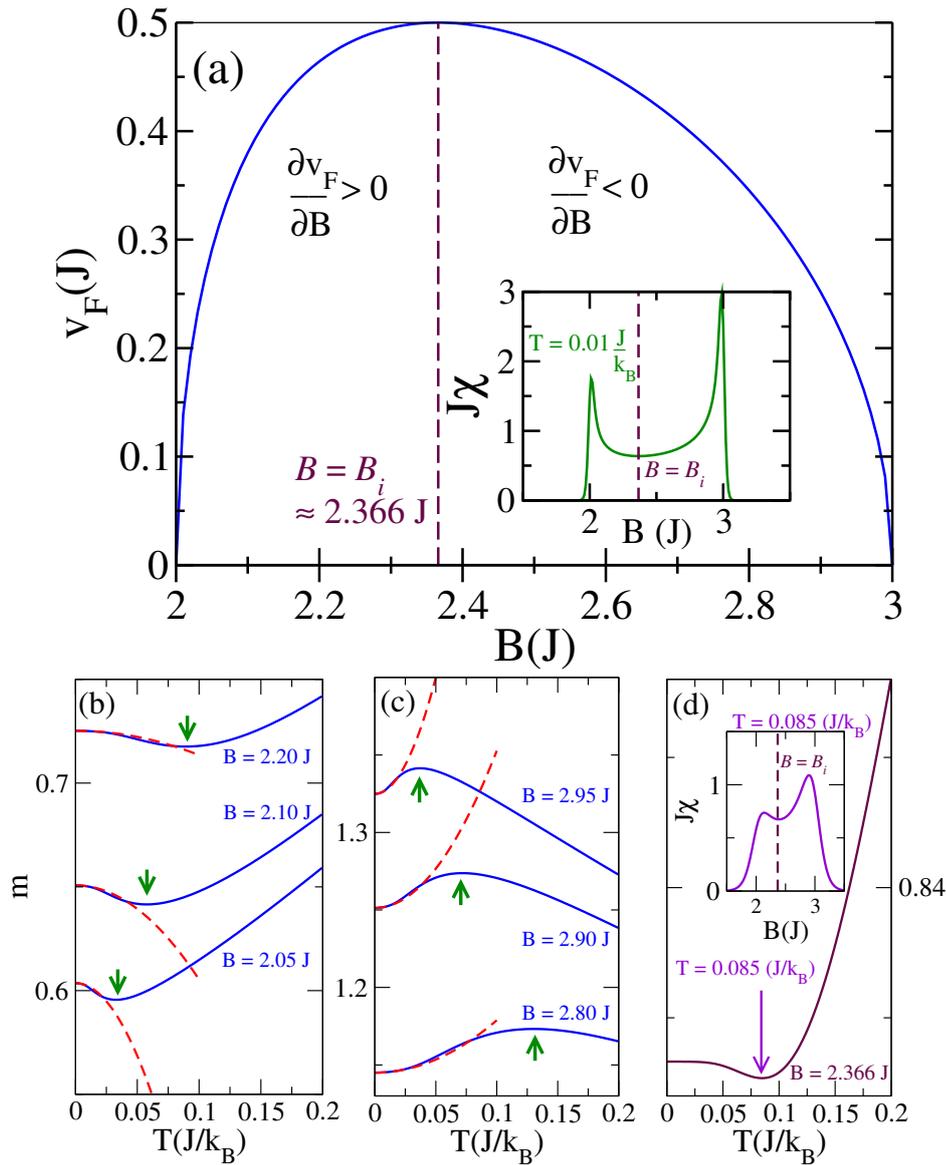


Figura 43 – Resultados da aproximação de ondas de spin com o vácuo totalmente polarizado (FSW-FPv). (a) Velocidade de Fermi  $v_F$  como uma função do campo magnético  $B$  e [(b), (c) e (d)] curvas de magnetização  $m(T)$ . (a)  $\partial v_F / \partial B \rightarrow +\infty$  e  $v_F \rightarrow 0$  para  $B \rightarrow B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)} = 2.00$  J, enquanto  $\partial v_F / \partial B \rightarrow -\infty$  e  $v_F \rightarrow 0$  quando  $B \rightarrow B_{c,FP}^{(FSW,FPv)} = 3.00$  J. Como mostrado na figura inserida em (a), para  $B = B_i \approx 2.366$  J,  $\partial v_F / \partial B = 0$  e a susceptibilidade  $\chi(B)$  tem um mínimo neste valor de  $B$ . (b)  $m(T)$  para os valores indicados de  $B$  na vizinhança do ponto crítico  $B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)}$ . (c)  $m(T)$  para os valores indicados de  $B$  na vizinhança do ponto crítico  $B_{c,FP}^{(FSW,FPv)}$ . (d)  $m(T)$  para  $B = B_i$ . As curvas  $m(T)$  até ordem  $O(T^2)$ , Eq. (4.35), são mostradas como linhas tracejadas em (b) e (c) para os valores correspondentes de  $B$ , setas indicam pontos extremos locais em  $m(T)$ , que são usados como critério para identificar o regime LL. A figura inserida em (d) mostra que o mínimo em  $m(T)$  está associado com o mínimo local em  $\chi(B)$ , que é encontrado entre os dois pontos críticos.

uma reta  $k_B T(B) = a|B - B_c|$  de um modelo independente, com  $a = 0.76238$  [23], para mais detalhes ver Sec. 2.4. Na figura inserida na Fig. 43(a), mostramos que o mínimo na curva  $\chi(B) = \partial m / \partial B$  é encontrado em  $B = B_i$ , o valor de  $B$  em que  $|\partial v_F / \partial B| = 0$ . Este valor de  $B$  marca um crossover do regime onde as excitações são predominantemente do estado FRI para o regime onde as excitações são predominantemente do estado FP. Em  $B = B_i$ , o vetor de onda de Fermi está no ponto de inflexão da curva de dispersão ( $d^2 \omega_{k,0}^{(FPv)} / dk^2 = 0$ ), uma vez que

$$\frac{\partial v_F}{\partial B} = \left[ \frac{d^2 \omega_{k,0}^{(FPv)}}{dk^2} \right]_{k=k_F} \left( \frac{\partial k_F}{\partial B} \right), \quad (4.36)$$

e  $k_F$  aumenta monotonicamente com  $B$  entre os campos críticos. Se o valor de  $k$  no ponto de inflexão é  $k_i$ , podemos calcular  $B_i$  da equação  $\omega_{k_i,0}^{(FPv)} = 0$ . Para a cadeia (1/2, 1), por exemplo,  $B_i = 2.366J$  e é indicado na Fig. 43(a).

Em  $B = B_i$ ,  $\partial v_F / \partial B = 0$  e o termo quadrático na Eq. 4.35 é nulo. Então a região LL que é mais estável em  $T$  é encontrado para  $B \approx B_i$ . Uma vez que as temperaturas de crossover próximas aos campos críticos  $T(B) \rightarrow 0$ , a linha  $T(B)$  tem um *domo* com perfil assimétrico, que é uma consequência da curva  $v_F$ , mostrada na Fig. 43(a) para o caso da cadeia (1/2, 1), o que também é observado em outros magnetos quânticos [4]. Além disso, um mínimo na curva  $m(T)$  é observado para  $B = B_i$  devido à ordem  $\mathcal{O}(T^3)$  na Eq. 4.35, como mostrado na Fig. 43(d). Entretanto, neste caso, esse extremo está associado com o mínimo na curva  $\chi(B)$ , em  $B = B_i$ , como mostrado na figura inserida em Fig. 43.

Na Fig. 44, mostramos as curvas  $m(T)$  para a cadeia (1/2, 1) calculadas através do QMC para discutir qualitativamente o acordo entres esses resultados quase exatos e as conclusões da teoria SWT-FPv. Nas Figs. 44(a) e 44(b), mostramos o mínimo (máximo) na curva  $m(T)$  para  $B \gtrsim B_{c,FRI} = 1.76J$  ( $B \lesssim B_{c,FP} = 3J$ ). Na Fig. 44(c), calculamos  $m(T)$  para um valor de  $B$  na vizinhança do mínimo na curva  $\chi(B)$ ,  $B = B_i$ . Usando os dados na Fig. 36, ele é localizado em  $B_i = (2.27 \pm 0.07)J$ , e é indicado como uma linha tracejada naquela figura. Além disso, como mostrado na Fig. 44(c), a curva  $m(T \rightarrow 0)$  é achatada, como na Fig. 43(d), para  $B = 2.25J$ . O mínimo na curva  $m(T)$  aparece em  $T \approx 0.1J$ . Como pode ser observado na curva da susceptibilidade em  $T = 0.1J$  da Fig. 36, ele também é associado com um mínimo local na curva  $\chi(B)$ , em  $B \approx B_i$ .

Na Fig. 44(d), comparamos a posição dos extremos locais nas curvas de  $m(T)$  dos métodos QMC e SWT-FPv. Os valores de  $B$  no mínimo de  $m(T)$  foram transladados por  $B_{c,FRI} - B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)} \approx 0.24J$ . As linhas para os máximos em  $m(T)$  de ambos os métodos estão em excelente acordo uma vez que FSW-FPv é quase exata perto de  $B_{c,FP}$  para  $T \rightarrow 0$  devido à baixa densidade de magnons excitados neste regime de temperatura. Por outro lado, os mínimos de ambos os métodos não têm um bom acordo, uma vez que a teoria FSW-FPv não se comporta quantitativamente bem perto de  $B_{c,FRI}$ , exceto

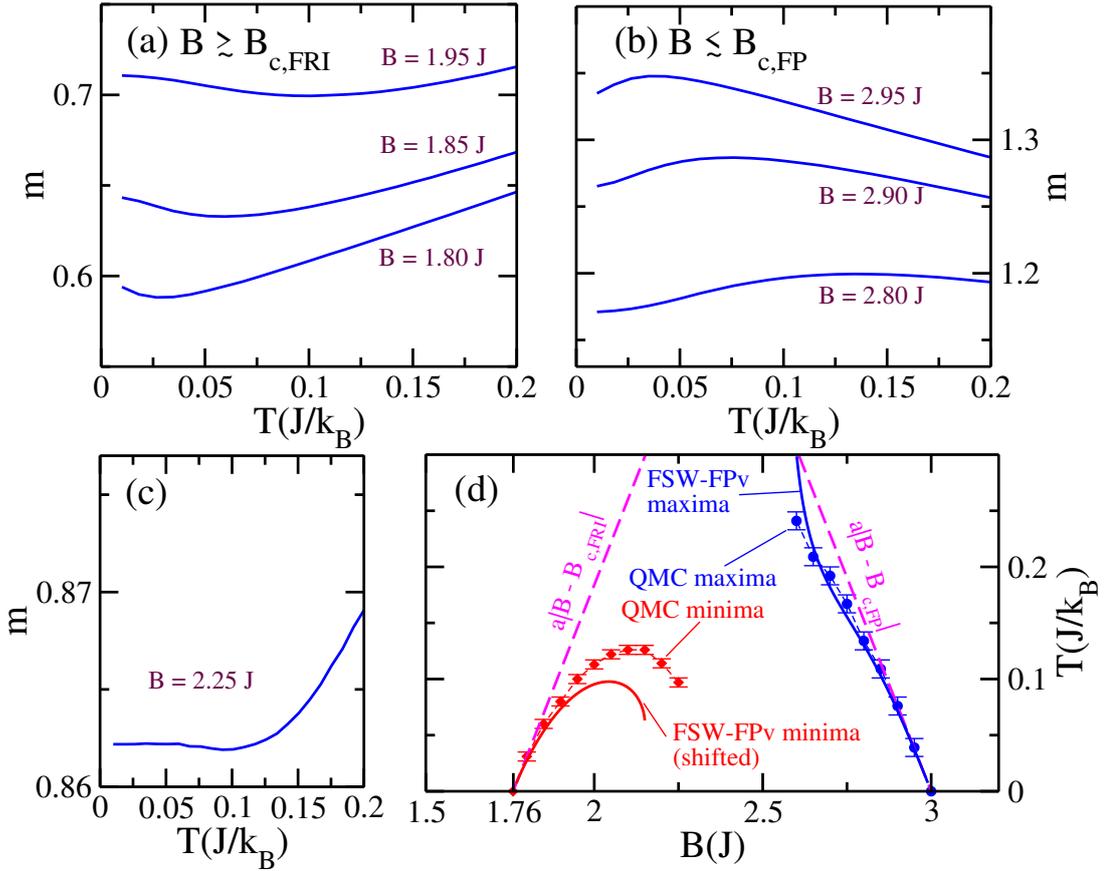


Figura 44 – Magnetização por célula  $m(T)$  com  $B$  fixo: calculando as linhas de crossover que delimitam o regime do líquido de Luttinger. Resultados do Monte Carlo quântico (QMC) para curvas de magnetização  $m(T)$  e as linhas de crossover para um sistema com  $N = 128$ . (a)  $m(T)$  para valores de  $B$  na vizinhança do campo crítico  $B_{c,FRI} = 1.76J$ . (b)  $m(T)$  para valores de  $B$  na vizinhança do campo crítico  $B_{c,FP} = 3.00J$ . (c)  $m(T)$  para um valor de  $B$  tal que  $\partial\chi/\partial B \approx 0$  em  $T = 0$  e no interior da fase LL, linha tracejada na Fig. 36. (d) Extremos locais das curvas  $m(T)$  obtidos do QMC e da onda de spin livre a partir do vácuo totalmente polarizado (FSW-FPv). No caso do mínimo local da teoria FSW-FPv, deslocamos arbitrariamente a curva, fazendo  $B$  por  $B_{c,FRI} - B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)} \approx 0.24J$ , a fim de ter o ponto crítico coincidindo com o valor exato. O valor exato das linhas retas do crossover quando  $T \rightarrow 0$ , ampliada na figura para uma melhor visualização:  $a|B - B_{c,FRI}|$  e  $a|B - B_{c,FP}|$ , com  $a = 0.76238$ , também são mostradas. As barras de erro são definidas como metade do passo da temperatura ( $\Delta T = 0.008$ ) usada para calcular  $m(T)$ .

para  $T \rightarrow 0$ , que é dominado pelo ponto crítico.

Determinamos as linhas de crossover entre o regime LL e os regimes de platô através dos dados de calor específico,  $C(B)$ . Na Fig. 45 apresentamos resultados de FSW-FPv para  $C(B)$  no regime de baixas temperaturas. Na fase LL, em  $T = 0$ , o calor específico  $C \sim T$  quando  $T \rightarrow 0$ , e  $C/T$  é aproximadamente constante no regime LL, como mostrado na Fig. 45. Para este regime, o alcance de  $B$  é o mais robusto na

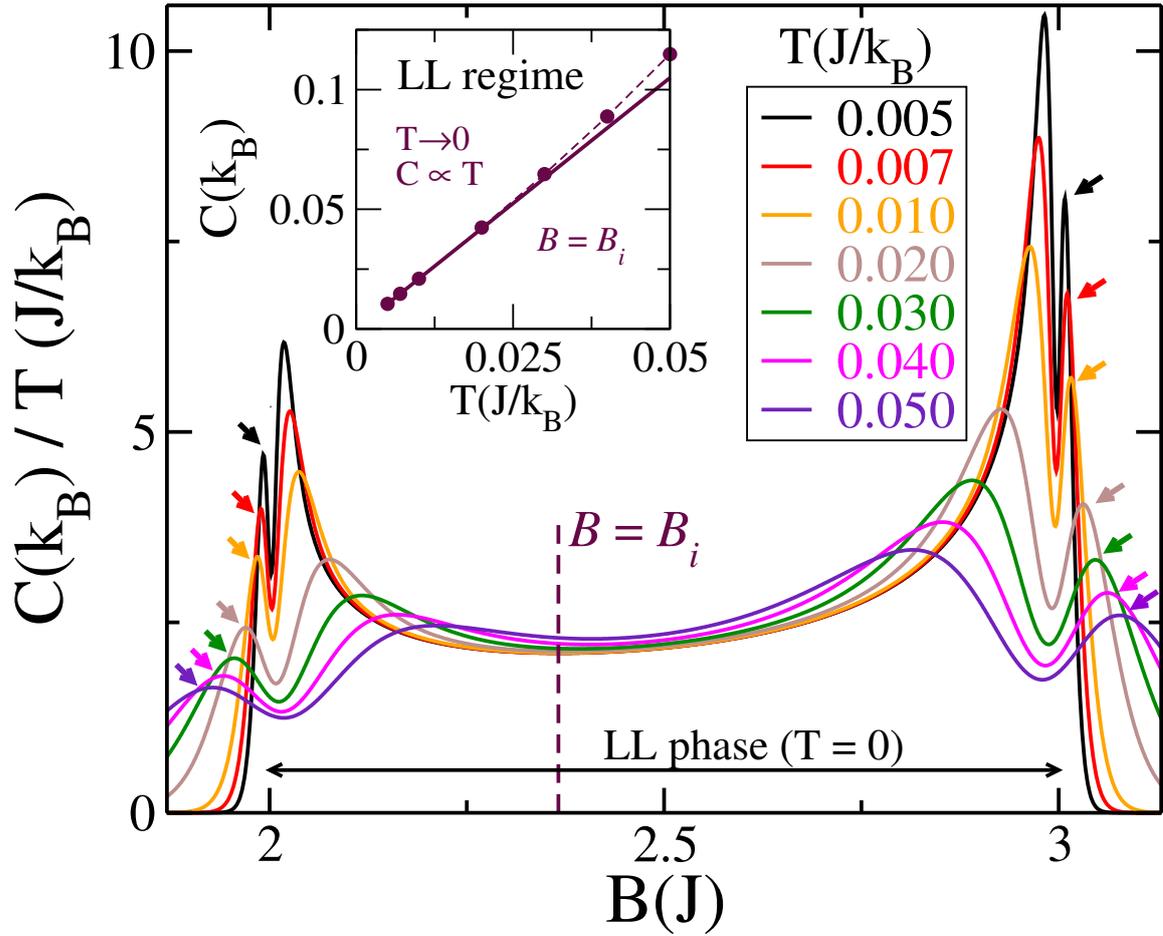


Figura 45 – Calor específico obtido através da teoria de ondas de spin a partir do estado totalmente polarizado (FSW-FPv) para  $T \rightarrow 0$ . No regime do líquido de Luttinger (LL),  $C \sim T$  quando  $T \rightarrow 0$ , e  $C/T$  é aproximadamente constante para  $B \approx B_i = 2.366J$ . A figura inserida mostra este comportamento linear de  $C$  em  $B = B_i$ . O crossover das fases isolantes (regiões de platô) em  $T = 0$  para o regime crítico quântico sem gap é indicado por setas nos máximos locais.

vizinhança de  $B = B_i$ , mostrado na figura inserida em Fig. 45 o comportamento linear de  $C$  como uma função de  $T$ . Para  $B \lesssim B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)}$  ou  $B \gtrsim B_{c,FP}^{(FSW,FPv)}$ , as excitações são exponencialmente ativadas e o crossover para o regime crítico quântico é marcado por um máximo local em  $C(B)$ . Os pontos dessas linhas de crossover,  $T_{\text{platô}}(B) \sim |B - B_c|$ , estão indicadas por setas na Fig. 45. O regime crítico quântico é confinado por essas linhas de crossover e aquelas do regime LL, que surgem como um segundo máximo local próximo a  $B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)}$  e  $B_{c,FP}^{(FSW,FPv)}$  na Fig. 45.

## 4.6 DIAGRAMA DE FASES

Na Fig. 46, resumimos nossos resultados em um diagrama de fases  $T - B$  e mostramos dados do calor específico  $C/T$  como função de  $B$  e  $T$ . Nas regiões dos platô FRI e FP, as excitações possuem gap, assim  $(C/T) \rightarrow 0$  quando  $T \rightarrow 0$ . Os *gaps* se anulam nos campos críticos quânticos (QC)  $B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)} = 2J$  e  $B_{c,FP}^{(FSW,FPv)} = 3J$ , e máximos locais aparecem nos valores de  $C/T$  para um valor de  $T$  fixo. Esses máximos locais indicam o crossover entre os regimes de platô e o regime QC, e entre o regime QC e o regime LL. Quando  $T \rightarrow 0$ , a linha de crossover entre os regimes de platô e QC (linha P-QC) é uma reta  $k_B T(B) = |B - B_c|$ , para  $B_c = B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)}$  e  $B_c = B_{c,FP}^{(FSW,FPv)}$ ; enquanto que uma reta  $a|B - B_c|$ , com uma constante  $a = 0.76238$  (para cálculos mais detalhados ver Sec. 2.4), marca o crossover entre os regimes LL e QC (linhas LL-QC). Além disso, a linha LL-QC que contém o ponto crítico  $B = B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)}$  [ $B = B_{c,FP}^{(FSW,FPv)}$ ] foi calculada dos mínimos locais (máximos locais) nas curvas  $m(T)$ :  $m(T)_{min}$  [ $m(T)_{max}$ ]. As linhas LL-QC também foram calculadas dos máximos locais na curva da susceptibilidade  $\chi(B)$  em  $T$  fixo:  $\chi_{max}(B)$ .

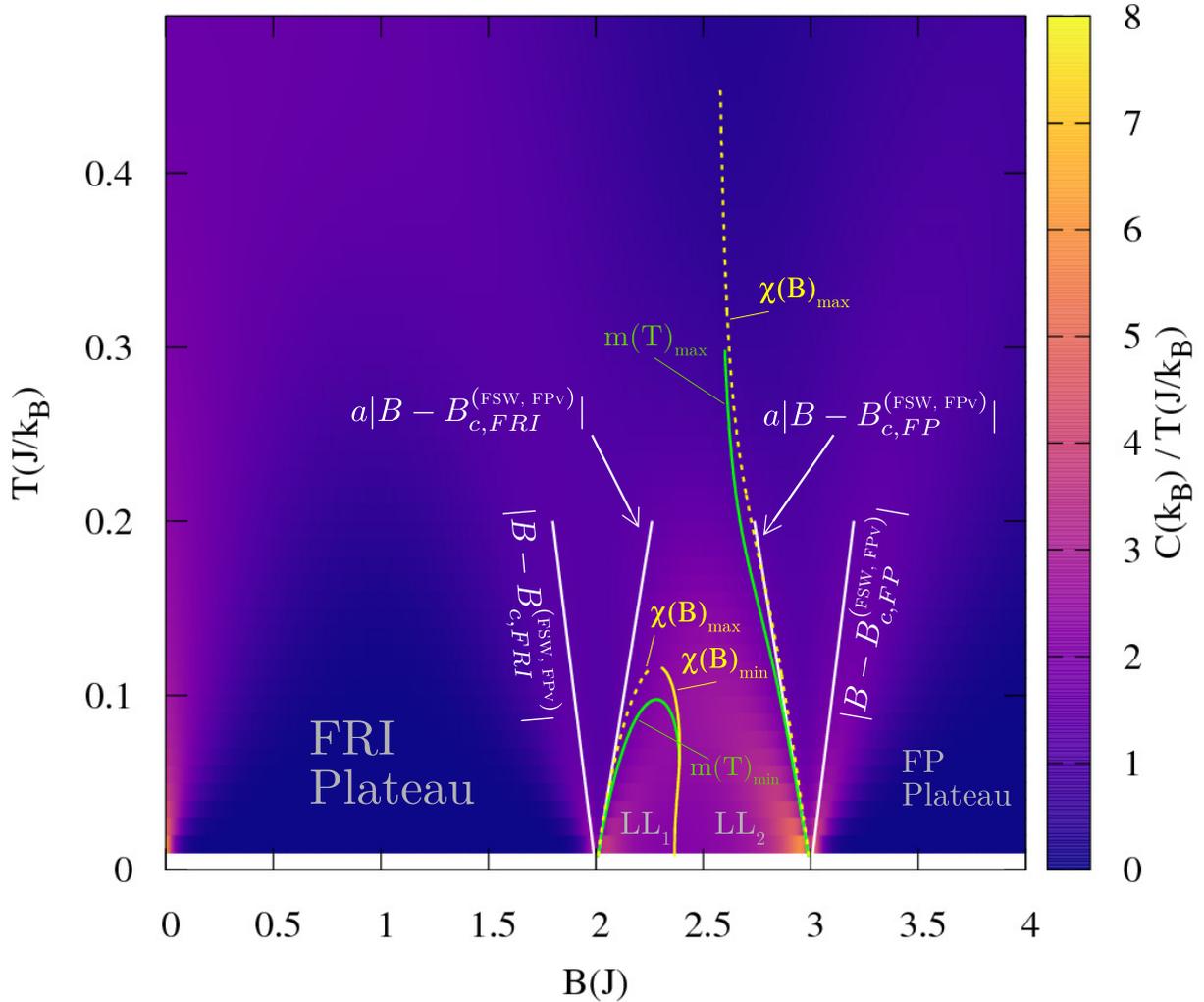


Figura 46 – Diagrama de fases  $T - B$  da cadeia ( $s = 1/2$ ,  $S = 1$ ) através da teoria de ondas de spin SWT-FPv. Os pontos críticos quânticos  $B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)} = 2.00$  J e  $B_{c,FP}^{(FSW,FPv)} = 3.00$  J delimitam as regiões de platôs FRI e FP, respectivamente. Aumentando a temperatura, a largura do platô diminui e as linhas  $k_B T = |B - B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)}|$  e  $k_B T = |B - B_{c,FP}^{(FSW,FPv)}|$  limitam as regiões de platô para  $B \lesssim B_c$  [platô ferrimagnético (FRI)] e  $B \gtrsim B_c$  [platô totalmente polarizado (FP)]. O regime LL tem linhas de crossover dadas por  $a|B - B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)}|$  e  $a|B - B_{c,FP}^{(FSW,FPv)}|$ , com  $a = 0.76238$ , para  $B \rightarrow B_c$ , como indicado pelos máximos locais da susceptibilidade  $\chi(B) = \frac{\partial m}{\partial B}$ ,  $\chi(B)_{max}$ . Entre esses máximos locais, há um mínimo local  $[\chi(B)_{min}]$  separando a região sob a influência do ponto crítico  $B_{c,FRI}^{(FSW,FPv)}$  da com influência do campo crítico  $B_{c,FP}^{(FSW,FPv)}$ .

## 5 CONCLUSÕES

No trabalho, calculamos as propriedades críticas de cadeias ferrimagnéticas alternadas ( $s, S$ ) na presença de um campo magnético através de duas teorias de ondas de spin. Determinamos a melhor descrição para as excitações de mais baixa energia comparando os resultados obtidos das aproximações de onda de spin com dados do método de Monte Carlo quântico. Essas cadeias ferrimagnéticas apresentam dois platôs de magnetização ( $m$ ): o platô ferrimagnético (FRI), para o qual  $m = S - s$ , e o platô totalmente polarizado (FP), em  $m = s + S$ . A primeira teoria de onda de spin é uma onda de spin interagente (ISW) com o vácuo FRI clássico. ISW-FRIv. A segunda metodologia é uma teoria de ondas de spins livres (FSW) calculados do estado FP, FSW-FPv. Em ambos os casos, duas bandas são obtidas. Para calcular as propriedades de temperatura finita do sistema, uma das bandas é considerada como uma banda bosônica, com um potencial químico efetivo a fim de prevenir a condensação dos bósons em  $B = 0$ , enquanto a outra é considerada como uma banda de bósons de núcleo duro, com uma distribuição térmica fermiônica. Próximo ao fim do platô FRI, a teoria ISW-FRIv é uma melhor opção, enquanto a teoria FSW-FPv é exata para  $T \rightarrow 0$  próximo ao fim do platô FP. Uma vez que estamos interessados na descrição de todo o diagrama de fase  $T$  vs.  $B$  do sistema, nós aprofundamos o estudo na teoria FSW-FPv, calculando as linhas de crossover em  $T$  finito que delimitam os regimes de platô e o regime do Líquido de Luttinger (LL).

O regime do líquido de Luttinger pode ser dividido em duas regiões, separadas pelo mínimo local na curva da susceptibilidade em função do campo magnético com uma temperatura fixa,  $\chi_{min}(B)$ . O valor do campo magnético em que este mínimo ocorre em  $T = 0$ ,  $B_i$ , está no ponto de inflexão da banda e muda pouco com  $T$ . A linha  $m(T)_{min}$  como função de  $B$  encontra a linha  $\chi_{min}(B)$  para  $B \approx B_i$ . Finalmente, o regime LL possui um *domo* com perfil assimétrico que está associado com o perfil da velocidade de Fermi como função de  $B$  na banda relevante, como é observado em outros magnetos quânticos [4].

A perspectiva é concluir a investigação com cálculos mais detalhados para temperatura nula e comparar com resultados de grupo de renormalização da matriz densidade. Bem como aplicar o método analítico proposto em outros magnetos quânticos, e.g., sistemas escada, cadeias de spins  $s$  alternados com um spin  $s$  suspenso e ligado a um spin  $S$  (cadeia de spins alternados  $ssS$ ).

## REFERÊNCIAS

- [1] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press, 2011).
- [2] M. Vojta, *Reports on Progress in Physics* **66**, 2069 (2003), arXiv:0309604 [cond-mat] .
- [3] D. Bitko, T. F. Rosenbaum, and G. Aeppli, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 940 (1996).
- [4] V. Zapf, M. Jaime, and C. D. Batista, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 563 (2014), arXiv:arXiv:0909.2328v2 .
- [5] T. Giamarchi, C. Rüegg, and O. Tchernyshyov, *Nature Physics* **4**, 198 (2008).
- [6] S. Sachdev, in *Quantum Magnetism*, Lecture Notes in Physics, Berlin Springer Verlag, Vol. 645, edited by U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, and R. F. Bishop (2004) p. 381, cond-mat/0401041 .
- [7] P. Coleman, *Physica B: Condensed Matter* **259-261**, 353 (1999).
- [8] H. von Löhneysen, *Journal of Physics: Condensed Matter* **8**, 9689 (1996).
- [9] E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
- [10] S. Sachdev, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 913 (2003), cond-mat/0211005 .
- [11] S. L. Sondhi and A. J. Schofield, *Rev. Mod. Phys.* **69**, 315 (1997).
- [12] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism* (Springer-Verlag, 1994).
- [13] S. Sachdev and B. Keimer, *Physics Today* **64**, 020000 (2011), arXiv:0803.3720. [cond-mat.str-el] .
- [14] P. Coleman, S. M. Girvin, J. P. Carini, and D. Shahar, *Nature* **433** (2005), 10.1038/nature03279.
- [15] P. R. Hammar, D. H. Reich, C. Broholm, and F. Trouw, *Phys. Rev. B* **57**, 7846 (1998).
- [16] T. Nikuni, M. Oshikawa, A. Oosawa, and H. Tanaka, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5868 (2000).
- [17] M. Matsumoto, B. Normand, T. M. Rice, and M. Sgrist, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 077203 (2002).
- [18] C. Rüegg, N. Cavadini, A. Furrer, H.-U. Güdel, K. Krämer, H. Mutka, A. Wildes, K. Habicht, and P. Vorderwisch, *Nature* **423**, 62 (2003).

- [19] T. Giamarchi and A. M. Tsvelik, *Phys. Rev. B* **59**, 11398 (1999).
- [20] V. S. Zapf, D. Zocco, B. R. Hansen, M. Jaime, N. Harrison, C. D. Batista, M. Kenzelmann, C. Niedermayer, A. Lacerda, and A. Paduan-Filho, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 077204 (2006).
- [21] R. Coldea, D. A. Tennant, K. Habicht, P. Smeibidl, C. Wolters, and Z. Tylczynski, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 137203 (2002).
- [22] T. Radu, H. Wilhelm, V. Yushankhai, D. Kovrizhin, R. Coldea, Z. Tylczynski, T. Lühmann, and F. Steglich, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 127202 (2005).
- [23] Y. Maeda, C. Hotta, and M. Oshikawa, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 057205 (2007).
- [24] E. Dagotto and T. M. Rice, *Science* **271**, 618 (1996), <http://science.sciencemag.org/content/271/5249/618.full.pdf>.
- [25] T. Rice, *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **103**, 165 (1996).
- [26] T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension* (Oxford University Press, 2004).
- [27] R. Chitra and T. Giamarchi, *Phys. Rev. B* **55**, 5816 (1997).
- [28] X. Wang and L. Yu, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5399 (2000).
- [29] D. Cabra, A. Honecker, and P. Pujol, *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems* **13**, 55 (2000).
- [30] A. Langari and M. A. Martín-Delgado, *Phys. Rev. B* **62**, 11725 (2000).
- [31] C. Rüegg, K. Kiefer, B. Thielemann, D. F. McMorrow, 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).
- [32] P. Bouillot, C. Kollath, A. M. Läuchli, M. Zvonarev, B. Thielemann, C. Rüegg, E. Orignac, R. Citro, M. Klanjšek, C. Berthier, M. Horvatić, and T. Giamarchi, *Physical Review B* **83**, 054407 (2011).
- [33] S. Ward, M. Mena, P. Bouillot, C. Kollath, T. Giamarchi, K. P. Schmidt, B. Normand, K. W. Krämer, D. Biner, R. Bewley, T. Guidi, M. Boehm, D. F. McMorrow, and C. Rüegg, *Phys. Rev. Lett.* **118** (2017), 10.1103/PhysRevLett.118.177202, arXiv:1609.00198.
- [34] T. Giamarchi, *International Journal of Modern Physics B* **26**, 1244004 (2012), arXiv:1308.2731.
- [35] S. Wessel, M. Olshanii, and S. Haas, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 206407 (2001).

- [36] M. Oshikawa, M. Yamanaka, and I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1984 (1997).
- [37] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, *Annals of Physics* **16**, 407 (1961).
- [38] I. Affleck and E. H. Lieb, *Letters in Mathematical Physics* **12**, 57 (1986).
- [39] M. Oshikawa, *Physical Review Letters* **84**, 1535 (2000), arXiv:9911137 [cond-mat].
- [40] I. Affleck, *Physical Review B* **43**, 3215 (1991).
- [41] A. Paduan-Filho, *Brazilian Journal of Physics* **42**, 292 (2012).
- [42] 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 (2008).
- [43] M. Verdaguer, A. Gleizes, J. P. Renard, and J. Seiden, *Physical Review B* **29**, 5144 (1984).
- [44] N. B. Ivanov, *Condens. Matter Phys.* **12**, 435 (2009).
- [45] Y. Hosokoshi, K. Katoh, Y. Nakazawa, H. Nakano, and K. Inoue, *Journal of the American Chemical Society* **123**, 7921 (2001).
- [46] E. Lieb and D. Mattis, *Journal of Mathematical Physics* **3**, 749 (1962).
- [47] E. P. Raposo and M. D. Coutinho-Filho, *Physical Review Letters* **78**, 4853 (1997).
- [48] E. P. Raposo and M. D. Coutinho-Filho, *Physical Review B* **59**, 14384 (1999).
- [49] F. C. Alcaraz and A. L. Malvezzi, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **30**, 767 (1997).
- [50] L. M. Veríssimo, M. S. S. Pereira, J. Strečka, and M. L. Lyra, *Phys. Rev. B* **99**, 134408 (2019).
- [51] A. M. S. Macêdo, M. C. dos Santos, M. D. Coutinho-Filho, and C. A. Macêdo, *Physical Review Letters* **74**, 1851 (1995).
- [52] R. R. Montenegro-Filho and M. D. Coutinho-Filho, *Physical Review B* **74**, 125117 (2006).
- [53] G. Sierra, M. A. Martín-Delgado, S. R. White, D. J. Scalapino, and J. Dukelsky, *Phys. Rev. B* **59**, 7973 (1999).
- [54] V. M. M. Alvarez and M. D. Coutinho-Filho, *Journal of Physics: Condensed Matter* **31**, 195603 (2019).
- [55] O. Rojas, S. M. de Souza, and N. S. Ananikian, *Physical Review E* **85**, 061123 (2012), arXiv:1204.0858.

- [56] A. A. Lopes, B. A. Z. António, and R. G. Dias, *Physical Review B* **89**, 235418 (2014).
- [57] R. R. Montenegro-Filho and M. D. Coutinho-Filho, *Physical Review B* **90** (2014), 10.1103/PhysRevB.90.115123.
- [58] K. Kobayashi, M. Okumura, S. Yamada, M. Machida, and H. Aoki, *Physical Review B* **94** (2016), 10.1103/PhysRevB.94.214501.
- [59] K. Takano, K. Kubo, and H. Sakamoto, *Journal of Physics: Condensed Matter* **8**, 6405 (1996), arXiv:9607052 [cond-mat] .
- [60] R. R. Montenegro-Filho and M. D. Coutinho-Filho, *Physical Review B* **78**, 014418 (2008).
- [61] A. M. do Nascimento-Junior and R. R. Montenegro-Filho, *Phys. Rev. B* **99**, 064404 (2019).
- [62] T. Shimokawa and H. Nakano, *Journal of the Physical Society of Japan* **80**, 043703 (2011), arXiv:arXiv:1102.4414v1 .
- [63] S. C. Furuya and T. Giamarchi, *Physical Review B* **89**, 1 (2014), arXiv:1403.1513 .
- [64] F. Amiri, G. Sun, H. J. Mikeska, and T. Vekua, *Physical Review B* **92**, 1 (2015), arXiv:1509.04062 .
- [65] K. Sekiguchi and K. Hida, *Journal of the Physical Society of Japan* **86**, 084706 (2017).
- [66] A. S. F. Tenório, R. R. Montenegro-Filho, and M. D. Coutinho-Filho, *Journal of Physics: Condensed Matter* **23**, 506003 (2011).
- [67] M. Hagiwara, K. Minami, Y. Narumi, K. Tatani, and K. Kindo, *Journal of the Physical Society of Japan* **67**, 2209 (1998), <https://doi.org/10.1143/JPSJ.67.2209> .
- [68] M. Takahashi, *Progress of Theoretical Physics Supplement* **87**, 233 (1986), <http://ptps.oxfordjournals.org/content/87/233.full.pdf+html> .
- [69] M. Takahashi, *Physical Review Letters* **58**, 168 (1987).
- [70] S. Yamamoto, T. Fukui, K. Maisinger, and U. Schollwöck, *Journal of Physics: Condensed Matter* **10**, 11033 (1998).
- [71] S. Yamamoto and T. Fukui, *Physical Review B* **57**, 14008 (1998).
- [72] C. Wu, B. Chen, X. Dai, Y. Yu, and Z.-B. Su, *Phys. Rev. B* **60**, 1057 (1999).
- [73] S. Yamamoto, *Physical Review B* **69**, 064426 (2004).

- [74] Y. Noriki and S. Yamamoto, *Journal of the Physical Society of Japan* **86**, 034714 (2017).
- [75] C. Kittel, *Quantum theory of solids* (Wiley, New York, 1963).
- [76] S. K. Pati, S. Ramasesha, and D. Sen, *Journal of Physics: Condensed Matter* **9**, 8707 (1997).
- [77] S. K. Pati, S. Ramasesha, and D. Sen, *Phys. Rev. B* **55**, 8894 (1997).
- [78] S. Brehmer, H.-J. Mikeska, and S. Yamamoto, *Journal of Physics: Condensed Matter* **9**, 3921 (1997).
- [79] S. Yamamoto, S. Brehmer, and H.-J. Mikeska, *Physical Review B* **57**, 13610 (1998).
- [80] K. Maisinger, U. Schollwöck, S. Brehmer, H. J. Mikeska, and S. Yamamoto, *Phys. Rev. B* **58**, R5908 (1998).
- [81] N. B. Ivanov, *Physical Review B* **62**, 3271 (2000).
- [82] S.-S. Gong, S. Gao, and G. Su, *Phys. Rev. B* **80**, 014413 (2009).
- [83] B. Gu, G. Su, and S. Gao, *Phys. Rev. B* **73**, 134427 (2006).
- [84] J. Strečka and T. Verkholyak, *Journal of Low Temperature Physics* **187**, 712 (2017), arXiv:1706.06379 .
- [85] J. Strecka, *ArXiv e-prints* (2016), arXiv:1607.03617 [cond-mat.stat-mech] .
- [86] T. Nakanishi and S. Yamamoto, *Physical Review B* **65**, 214418 (2002).
- [87] S. Yamamoto, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3348 (1995).
- [88] S. Yamamoto and S. Miyashita, *Physics Letters A* **235**, 545 (1997).
- [89] O. F. Syljuåsen and A. W. Sandvik, *Physical Review E* **66**, 046701 (2002).
- [90] B. Bauer, L. D. Carr, H. G. Evertz, A. Feiguin, J. Freire, S. Fuchs, L. Gamper, J. Gukelberger, E. Gull, S. Guertler, A. Hehn, R. Igarashi, S. V. Isakov, D. Koop, P. N. Ma, P. Mates, H. Matsuo, O. Parcollet, G. Pawłowski, J. D. Picon, L. Pollet, E. Santos, V. W. Scarola, U. Schollwöck, C. Silva, B. Surer, S. Todo, S. Trebst, M. Troyer, M. L. Wall, P. Werner, and S. Wessel, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2011**, P05001 (2011), arXiv:1101.2646 .
- [91] M. A. Continentino, *Quantum Scaling in Many-Body Systems* (Cambridge University Press, 2017).
- [92] P. Pfeuty, *Annals of Physics* **57**, 79 (1970).

- [93] R. Coldea, D. A. Tennant, E. M. Wheeler, E. Wawrzynska, D. Prabhakaran, M. Telling, K. Habicht, P. Smeibidl, and K. Kiefer, *Science* **327**, 177 (2010), <http://science.sciencemag.org/content/327/5962/177.full.pdf>.
- [94] S.-K. Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena* (Adson Wesley, 1976).
- [95] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Oxford University Press, 1971).
- [96] M. A. Continentino, G. M. Japiassu, and A. Troper, *Phys. Rev. B* **39**, 9734 (1989).
- [97] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **40**, 546 (1989).
- [98] J. A. Hertz, *Phys. Rev. B* **14**, 1165 (1976).
- [99] A. P. Young, *Journal of Physics C: Solid State Physics* **8**, L309 (1975).
- [100] A. J. Bray and M. A. Moore, *Journal of Physics C: Solid State Physics* **18**, L927 (1985).
- [101] J. M. Luttinger, *Journal of Mathematical Physics* **4**, 1154 (1963).
- [102] F. D. M. Haldane, *Journal of Physics C: Solid State Physics* **14**, 2585 (1981).
- [103] L. Landau and E. Lifshitz, *Statistical Physics*, v. 5 (Elsevier Science, 2013).
- [104] S.-i. Tomonaga, *Progress of Theoretical Physics* **5**, 544 (1950).
- [105] D. C. Mattis and E. H. Lieb, *Journal of Mathematical Physics* **6**, 304 (1965).
- [106] T. Holstein and H. Primakoff, *Physical Review* **58**, 1098 (1940).
- [107] S. Mukhopadhyay, M. Klanjšek, M. S. Grbić, R. Blinder, H. Mayaffre, C. Berthier, M. Horvatić, M. A. Continentino, A. Paduan-Filho, B. Chiari, and O. Piovesana, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 177206 (2012).
- [108] M. Klanjšek, H. Mayaffre, C. Berthier, M. Horvatić, B. Chiari, O. Piovesana, P. Bouillot, C. Kollath, E. Orignac, R. Citro, and T. Giamarchi, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 137207 (2008).
- [109] B. Thielemann, C. Rüegg, K. Kiefer, H. M. Rønnow, B. Normand, P. Bouillot, C. Kollath, E. Orignac, R. Citro, T. Giamarchi, A. M. Läuchli, D. Biner, K. W. Krämer, F. Wolff-Fabris, V. S. Zapf, M. Jaime, J. Stahn, N. B. Christensen, B. Grenier, D. F. McMorrow, and J. Mesot, *Phys. Rev. B* **79**, 020408 (2009).

- [110] B. Thielemann, C. Rüegg, H. M. Rønnow, A. M. Läuchli, J.-S. Caux, B. Normand, D. Biner, K. W. Krämer, H.-U. Güdel, J. Stahn, K. Habicht, K. Kiefer, M. Boehm, D. F. McMorrow, and J. Mesot, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 107204 (2009).
- [111] K. Y. Povarov, D. Schmidiger, N. Reynolds, R. Bewley, and A. Zheludev, *Phys. Rev. B* **91**, 020406 (2015).
- [112] B. Willenberg, H. Ryll, K. Kiefer, D. A. Tennant, F. Groitl, K. Rolfs, P. Manuel, D. Khalyavin, K. C. Rule, A. U. B. Wolter, and S. Süllow, *Phys. Rev. B* **91**, 060407 (2015).
- [113] I. Affleck, *Journal of Physics: Condensed Matter* **1**, 3047 (1989).
- [114] I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 746 (1986).
- [115] I. Affleck, *Physical Review B* **41**, 6697 (1990).
- [116] H. J. Schulz, *Phys. Rev. B* **22**, 5274 (1980).
- [117] F. Bloch, *Zeitschrift für Physik* **61**, 206 (1930).
- [118] F. Bloch, *Zeitschrift für Physik* **74**, 295 (1932).
- [119] P. W. Anderson, *Physical Review* **86**, 694 (1952).
- [120] R. Kubo, *Physical Review* **87**, 568 (1952).
- [121] T. Oguchi, *Phys. Rev.* **117**, 117 (1960).
- [122] H. Kaplan, *Phys. Rev.* **86**, 121 (1952).
- [123] F. J. Dyson, *Phys. Rev.* **102**, 1217 (1956).
- [124] F. J. Dyson, *Phys. Rev.* **102**, 1230 (1956).
- [125] M. Takahashi, *Physical Review B* **40**, 2494 (1989).
- [126] W. Witschel, *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **21**, 313 (1975).
- [127] R. Coldea, S. Hayden, G. Aeppli, T. Perring, C. Frost, T. Mason, S.-W. Cheong, and Z. Fisk, *Physical Review Letters* **86**, 5377 (2001).
- [128] J. C. Bonner and M. E. Fisher, *Physical Review* **135**, 640 (1964).
- [129] S. Sachdev, *Nature Physics* **4**, 173 (2008), arXiv:0711.3015 [cond-mat.str-el] .
- [130] R. R. Montenegro-Filho and M. D. Coutinho-Filho, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **357**, 173 (2005).

- 
- [131] W. Nie, H. Katsura, and M. Oshikawa, *Physical Review Letters* **111**, 100402 (2013).
- [132] F. m. c. Crépin, N. Laflorencie, G. Roux, and P. Simon, *Physical Review B* **84**, 054517 (2011).
- [133] H. Guo, *Physical Review A* **86**, 055604 (2012).
- [134] Y. Nakano, K. Kasamatsu, and T. Matsui, *Physical Review A* **85**, 023622 (2012).
- [135] S. Wessel, *Phys. Rev. B* **75**, 174301 (2007).
- [136] W. M. da Silva and R. R. Montenegro-Filho, *Phys. Rev. B* **96**, 214419 (2017).