



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

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

ROTORES QUÂNTICOS NA CADEIA AB2 COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS

por

Antônio Sandoildo Freitas Tenório

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

Banca Examinadora:

Prof. Maurício Domingues Coutinho Filho (Orientador-UFPE)

Prof. Ernesto Carneiro P. Raposo (DF – UFPE)

Prof. Adauto José Ferreira de Souza (DF&M - UFRPE)

Recife - PE, Brasil
Agosto - 2005



Universidade Federal de Pernambuco
Departamento de Física – CCEN
Programa de Pós-Graduação em Física
Cidade Universitária - 50670-901 Recife PE Brasil
Fone (++) 55 81) 2126-8449/2126-8450 - Fax (++) 55 81) 3271-0359
<http://www.df.ufpe.br/pg> e-mail: posgrad@df.ufpe.br

Parecer da Banca Examinadora de Defesa de Dissertação de Mestrado

Antônio Sandoildo Freitas Tenório

ROTORES QUÂNTICOS NA CADEIA AB2 COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS

A Banca Examinadora composta pelos Professores Maurício Domingues Coutinho Filho (Presidente e Orientador), Ernesto Carneiro P. Raposo, todos da Universidade Federal de Pernambuco e Adauto José Ferreira de Souza do Departamento de Física e Matemática da Universidade Federal Rural de Pernambuco, consideram o candidato:

() Aprovado com Distinção

(X) Aprovado

() Reprovado

Secretaria do Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal de Pernambuco aos trinta dias do mês de agosto de 2005.

Prof. Maurício Domingues Coutinho Filho
Presidente e Orientador

Prof. Ernesto Carneiro P. Raposo

Prof. Adauto José Ferreira de Souza

Resumo

Neste trabalho, investigaram-se as propriedades das cadeias quânticas de spins de Heisenberg com topologia AB_2 e interações competitivas (frustração) em $T=0$. Utilizou-se o modelo de rotores quânticos, com tratamento de campo médio. Numa primeira abordagem, considerou-se uma cadeia com a topologia AB_2 , onde cada sítio foi ocupado com um rotor quântico com $q = 1/2$, simulando o semi-preenchimento eletrônico. Para dois tipos de frustração estudados, não se obtiveram, de modo geral, resultados concordantes com o comportamento conhecido para essas cadeias. Em particular, produziram-se, em uma das configurações, resultados que se encaixaram numa descrição clássica.

Numa segunda abordagem, empregou-se uma estrutura unitária - a célula estendida composta de duas células contíguas da cadeia AB_2 , onde se adotou um tratamento coletivo para os rotores. Os diagramas de fase obtidos mostram concordância razoável com o que se conhece sobre estas cadeias. No primeiro tipo de frustração (intracelular) resultaram configurações que indicam a seqüência correta das fases: ferrimagnética (prevista pelo teorema de Lieb) – TD (tetrâmero–dímero) – DM (dímero–monômero), a natureza correta das transições de fase (primeira ordem) e coincidência do ponto de ocorrência da transição TD-DM. No segundo tipo de frustração examinado (intracelular e intercelular), verificou-se também a concordância com dados disponíveis, calculados com o uso da diagonalização exata para cadeias de tamanho finito (máximo de 24 sítios).

Abstract

In this work we investigate the properties of the Heisenberg quantum spin chains with the AB_2 topology and competitive interactions (frustration) at $T = 0$. We made use of the quantum rotor model, treated by way of the mean field theory. In a first approach, we considered a chain endowed with the AB_2 topology, on every site of which lies a single quantum rotor, with $q = 1/2$, so as to simulate electronic half-filling. The study of two types of frustration yielded results that, in general, did not conform to the known behavior of these spin chains.

In a second approach, we resorted to a unitary arrangement - the extended cell - which is made up of two contiguous AB_2 cells, whereof a collective treatment was carried out. The phase diagrams that ensued therefrom showed fair agreement with previous results on these chains. In the first kind of frustration (intracellular), we obtained configurations that indicate the right phase sequence: ferrimagnetic (as foreseen by the Lieb theorem) - TD (tetramer-dimer) - DM (dimer-monomer), the correct nature of the phase transitions (first order), and the exact determination of the point marking the transition occurrence TD-DM. In the second kind of frustration under examination, agreement with available data, calculated by way of exact diagonalization for finite-sized chains (a maximum of 24 sites), was also verified.

Sumário

1	O MODELO DE ROTORES QUÂNTICOS	2
1.1	Introdução	2
1.2	Mapeamento do Modelo de Rotores Quânticos para Antiferromagnéticos de Dupla Camada	7
1.3	Extensão do Modelo de Rotores Quânticos	11
1.4	Simetrias Discretas do Hamiltoniano $\hat{H}_R$	12
1.5	Representação do Hamiltoniano $\hat{H}_R$ – Determinação dos Elementos de Matriz de $\hat{\mathbf{L}}$, $\hat{\mathbf{L}}^2$ e de $\hat{\mathbf{n}}$	13
1.5.1	Rotores com $q = 0$	13
1.5.2	Rotores com $q = 1/2$	17
1.6	Rotores Quânticos Versus Spins de Heisenberg	26
1.7	Fases dos Rotores Quânticos em Temperatura Zero	28
1.7.1	O Teorema Variacional de Bogoliubov – Teoria de Campo Médio	28
1.7.2	Teoria de Campo Médio para $\hat{H}_R$ – Rotores com $q = 0$	31
1.7.3	Diagrama de Fases de $\hat{H}_R$	34
1.7.4	Teoria de Campo Médio para o Hamiltoniano H_R – Rotores com $q = 1/2$	51

2	MAPEAMENTOS DO MODELO DE ROTORES QUÂNTICOS NA CADEIA DE SPINS AB_2	53
2.1	Introdução	53
2.2	Mapeamento de Modelos de Rotores Quânticos em Cadeias Quânticas AB_2 de Heisenberg	55
2.3	Rotores Quânticos na Cadeia AB_2 com Interações Competitivas - Célula Simples – Tratamento Isolado	62
2.3.1	O Hamiltoniano de Rotores Quânticos na Cadeia AB_2	62
2.3.2	Tratamento de Campo Médio	64
2.3.3	Resultados Obtidos	67
2.3.4	Análise dos Resultados	73
2.3.5	Interpretação Clássica	76
2.4	Rotores Quânticos na Cadeia AB_2 com Interações Competitivas – Célula Estendida (Tratamento Coletivo	81
2.4.1	O Hamiltoniano dos Rotores Quânticos - Célula Estendida	81
2.4.2	Hamiltoniano-tentativa	84
2.4.3	Resultados Obtidos	86
3	Conclusões	97
	Referências Bibliográficas	101

Lista de Figuras

1.1	O Modelo da Dupla Camada. O Modelo é tridimensional. Aqui se mostram os spins, representados por círculos pretos, localizados em um dos três planos perpendiculares aos planos das camadas, pertencentes a dois sítios contíguos. Os acoplamentos do hamiltoniano –Eq. (1.12) – estão representados.	8
1.2	Diagrama de Fases de Campo Médio de $\hat{H}_R$. Reproduzida conforme a Fig. 1 da referência [3]	35
1.3	Energia, Momento Angular e Posição em função dos Acoplamentos: ZK fixo em 2,5 versus ZJ variando de 0 a 30. Transição de segunda ordem em $ZJ \approx 5$ (GP-N).	40
1.4	Energia, Momento Angular e Posição em função dos Acoplamentos: ZK fixo em 6,5 versus ZJ variando de 0 a 30. Transição de segunda ordem em $ZJ \approx 9$ (QF_1 -C) e uma transição de primeira ordem em $ZJ \approx 10$ (C-N). A curva da energia necessitaria maior refino, isto é, a interpolação de mais pontos na região das transições, para se enxergar essas transições mais claramente, tendo em vista a pequena separação dos pontos onde ocorrem.	41

- 1.5 Energia, Momento Angular e Posição em função dos Acoplamentos:
 ZK fixo em 10 versus ZJ variando de 0 a 30. Transição de segunda
ordem em $ZJ \approx 12$ (QF_1 -C). Nesta figura e na próxima, a visual-
ização das transições é facilitada pelo exame de $\langle \hat{n} \rangle^2$. Observe-se
que nas fases de ferromagnetos quantizados tem-se $\langle \hat{n} \rangle = n_z$ e
 $\langle \hat{n} \rangle \cdot \langle \hat{L} \rangle = L_z n_z$ 42
- 1.6 Energia, Momento Angular e Posição em função dos Acoplamentos:
 ZK fixo em 15 versus ZJ variando de 0 a 30. Transição de segunda
ordem em $ZJ \approx 21$ (QF_2 -C). 43
- 1.7 Energia, Momento Angular e Posição em função dos Acoplamentos:
 ZJ fixo em 2,5 versus ZK variando de 0 a 30. Transição de primeira
ordem em $ZK \approx 5,5$ (GP- QF_1), em $ZK \approx 12$ ($QF_1 - QF_2$) e em
 $ZK \approx 22,5$ ($QF_2 - QF_3$), a assim indefinidamente, à medida de que
 ZK cresce, devem-se suceder novas fases ferromagnéticas quantizadas. 44
- 1.8 Energia, Momento Angular e Posição em função dos Acoplamentos:
 ZJ fixo em 15,5 versus ZK variando de 0 a 30. Transição de segunda
ordem em $ZK \approx 7,5$ (N-C), seguida de uma transição de primeira
ordem em $ZK \approx 12,5$ (C- QF_2) e outra de primeira ordem em $ZK \approx$
 $22,5$ ($QF_2 - QF_3$). Na Figura 1.1, reproduzida de [3], a transição em
 $ZK \approx 7,5$ (N-C) consta como de primeira ordem. 45

- 1.9 Energia, Momento Angular e Posição em função dos Acoplamentos: ZJ fixo em 20 versus ZK variando de 0 a 30. Transição de segunda ordem em $ZK \approx 7,6$ (N-C), transição de primeira ordem em $ZK \approx 13$ (C-C) (clarificada pelo exame de $\langle \hat{n} \rangle^2$), transição de segunda ordem em $ZK \approx 14,5$ (C- QF_2) e transição de primeira ordem em $ZK \approx 22,5$ ($QF_2 - QF_3$). 46
- 1.10 Energia, Momento Angular e Posição em função dos Acoplamentos: ZJ fixo em 35 versus ZK variando de 0 a 30. Transição de segunda ordem em $ZK \approx 8,5$ (N-C), transição de primeira ordem em $ZK \approx 23$ (C-C) (também caracterizada pelo exame de $\langle \hat{n} \rangle^2$) e transição de segunda ordem em $ZK \approx 26$ (C- QF_3). 47
- 2.1 (a) Cadeia de spin com a topologia de célula unitária AB_2 exibindo o estado fundamental ferrimagnético em campo magnético nulo. (b) A mesma cadeia, onde se ilustram as frustrações que serão consideradas: (i) frustração BB ($J_3 \equiv 0, J_2 \geq 0$), neste trabalho também denominada *frustração intracelular* e (ii) frustração AA-BB ($J_2, J_3 \geq 0$), neste trabalho também denominada *frustração intracelular e intercelular*. Nas sub-seções 2.3 e 2.4, serão estudadas cadeias de rotores, em que cada sítio está ocupado por um único rotor com $q = 1/2$ 54
- 2.2 Mapeamento Rotor Quântico $\times$ Cadeia AB_2 . Energia, Momento e Posição em Função da Frustração: Frustração BB (intracelular). (a) Energia. (b) $\hat{L}^2 = \langle \hat{L} \rangle \cdot \langle \hat{L} \rangle$. (c) $\hat{n}^2 = \langle \hat{n} \rangle \cdot \langle \hat{n} \rangle$. O sistema evolui de uma fase ferrimagnética, que não fica caracterizada como de Lieb, para uma configuração *canted*. Observe que neste caso $J_3 \equiv 0$. 58

- 2.3 Mapeamento Rotor Quântico $\times$ Cadeia AB_2 . Energia, Momento e Posição em Função da Frustração: Frustração AA-BB (intra- e intercelular). (a) Energia. (b) $\hat{\mathbf{L}}^2 = \langle \hat{\mathbf{L}} \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{L}} \rangle$. (c) $\hat{\mathbf{n}}^2 = \langle \hat{\mathbf{n}} \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{n}} \rangle$. O sistema evolui de uma fase ferrimagnética, que não fica caracterizada como de Lieb, para uma configuração *canted* mais acentuada. Estudou-se o caso em que todas as frustrações são iguais. 59
- 2.4 Frustração BB. Aqui fez-se $I_{AB} = I_{AB'} = I_{BA} = I_{B'A} = 1$. $I_{BB'} = x$ (abscissa, variando de 0 a 10). Demais $I_{ij} = 0$. Onde $I=J, K$. Estuda-se o caso $M_{ij} = 0$. Isto é, contempla-se o caso especial da frustração BB, onde todos os acoplamentos M são nulos e os acoplamentos da frustração são iguais ($I_{BB'} = x$, $I = J, K$). As linhas contínuas representam as curvas obtidas da interpretação elaborada com base na Configuração 1 (Figura 2.8(a)), enquanto que as linhas tracejadas representam aquelas obtidas com base na Configuração 2 (Figura 2.8(b)). Eliminaram-se alguns pontos do cálculo numérico, para melhorar a visualização. 68

- 2.5 Frustração BB. Aqui fez-se $I_{AB} = I_{AB'} = I_{BA} = I_{B'A} = 1$. $I_{BB'} = x$ (abscissa, variando de 0 a 10). Demais $I_{ij} = 0$. Onde $I=J, K$. Estuda-se o caso $M_{ij} = 1$. Isto é, contempla-se o caso especial da frustração BB, onde todos os acoplamentos M estão fixados ($M=1$) e os acoplamentos da frustração são iguais ($I_{BB'} = x, I = J, K$). As linhas contínuas representam as curvas obtidas da interpretação elaborada com base na Configuração 1 (Figura 2.8(a)), enquanto que as linhas tracejadas representam aquelas obtidas com base na Configuração 2 (Figura 2.8(b)). Eliminaram-se alguns pontos do cálculo numérico, para melhorar a visualização. 69
- 2.6 Frustração AA–BB. Aqui fez-se $I_{AB} = I_{AB'} = I_{BA} = I_{B'A} = 1$. Demais $I_{ij} = x$ (abscissa, variando de 0 a 10). Onde $I=J, K$. Estuda-se o caso $M_{ij} = 0$. Isto é, contempla-se o caso especial da frustração AA–BB, onde todos os acoplamentos M são nulos e os acoplamentos das frustrações são todos iguais ($I_{ij} = x, I = J, K, i$ e j marcam as frustrações da Figura 2.1(b)). As linhas contínuas representam as curvas obtidas da interpretação elaborada com base na Configuração 1 (Figura 2.8(a)), enquanto que as linhas tracejadas representam aquelas obtidas com base na Configuração 2 (Figura 2.8(b)). Eliminaram-se alguns pontos do cálculo numérico, para melhorar a visualização. . 70

- 2.7 Frustração AA–BB. Aqui se fez $I_{AB} = I_{AB'} = I_{BA} = I_{B'A} = 1$. Demais $I_{ij} = x$ (abscissa, variando de 0 a 10). Onde $I=J, K$. Estuda-se o caso $M_{ij} = 1$. Isto é, contempla-se o caso especial da frustração AA–BB, onde todos os acoplamentos M estão fixados ($M=1$) e os acoplamentos das frustrações são todos iguais ($I_{ij} = x, I = J, K, i$ e j marcam as frustrações da Figura 2.1(b)). As linhas contínuas representam as curvas obtidas da interpretação elaborada com base na Configuração 1 (Figura 2.8(a)), enquanto que as linhas tracejadas representam aquelas obtidas com base na Configuração 2 (Figura 2.8(b)). Eliminaram-se alguns pontos do cálculo numérico, para melhorar a visualização. 71
- 2.8 Interpretação clássica. As setas representam os spins como vetores. (a) Configuração 1: $\vec{A}$ paralelo ao eixo dos y ; $\vec{B}$ e $\vec{B}'$ formam ângulos iguais com a direção negativa de y ($\theta/2$). (b) Configuração 2: $\vec{A}$ paralelo ao eixo dos X ; $\vec{B}$ e $\vec{B}'$ formam ângulos iguais com a direção negativa de y ($\theta/2$). 72

- 2.9 O retângulo delimita a célula estendida, composta de duas células unitárias da cadeia AB_2 , onde em cada sítio encontra-se um único rotor quântico com $q = 1/2$. (i) Frustração BB (intracelular): aqui se fez $I_{AB} = I_{AB'} = I_{BA} = I_{B'A} = 1$. $I_{B_1B_2} = I_{B_3B_4} = J_2$. Demais $I_{ij} = 0$, onde I (= J, K) representa de modo geral os acoplamentos entre os rotores. Estudou-se o caso $M_{ij} = 0$. Isto é, contemplou-se o caso especial da frustração BB, onde todos os acoplamentos M são nulos e os acoplamentos da frustração são iguais. (ii) Frustração AA-BB (intra- e intercelular): tem-se igualmente $I_{AB} = I_{AB'} = I_{BA} = I_{B'A} = 1$. Demais $I_{ij} = J_2 = J_3$. Os J_3 representam as frustrações intercelulares, e I (=J, K) representa de modo geral os acoplamentos entre os rotores. Estuda-se o caso $M_{ij} = 0$. Isto é, o caso especial da frustração AA-BB, onde todos os acoplamentos M são nulos e os acoplamentos das frustrações iguais. 82
- 2.10 Frustração BB (intracelular). Estão indicados os valores esperados das correlações (na forma $\langle \mathbf{X} \cdot \mathbf{Y} \rangle$) relevantes entre os momentos angulares dos rotores localizados nos sítios da célula estendida). Observam-se três fases distintas: FERRI (ferrimagnética) - TD (tetrâmero-dímero) e DM (dímero-monômero). 87
- 2.11 Frustração BB (intracelular). Estão indicados a energia (E) e valor esperado do momento angular total por célula unitária da cadeia AB_2 , ou seja, $(|\langle \mathbf{L} \rangle| = 1/2(\langle L_x \rangle^2 + \langle L_y \rangle^2 + \langle L_z \rangle^2)^{1/2})$, onde L_μ ($\mu = x, y, z$) é a soma das seis componentes dos momentos dos respectivos sítios da célula estendida. 88

- 2.12 Frustração AA–BB (intra- e intercelular). Estão indicados os valores esperados das correlações (na forma $\langle \mathbf{X} \cdot \mathbf{Y} \rangle$) relevantes entre os momentos angulares dos rotores localizados nos sítios da célula estendida). Observam-se três fases distintas: FERRI (ferrimagnética) - F–TD (tetrâmero–dímero flutuante) e AF (antiferromagnética). . . . 89
- 2.13 Frustração AA–BB (intra- e intercelular). Estão indicados a energia (E) e valor esperado do momento angular total por célula unitária da cadeia AB_2 , ou seja, $(|\langle \mathbf{L} \rangle| = 1/2(\langle L_x \rangle^2 + \langle L_y \rangle^2 + \langle L_z \rangle^2)^{1/2})$, onde L_μ ($\mu = x, y, z$) é a soma das seis componentes dos momentos dos respectivos sítios da célula estendida. 90
- 2.14 Cadeia AB_2 de spins (ou rotores). (a) A linha sinuosa mostra a frustração BB (intracelular). (b) O estado tetrâmero–dímero (TD), onde os retângulos representam tetrâmeros e as elipses, dímeros de singlete. (c) O estado dímero–monômero (DM). Reproduzido de K. Okamoto *et al.* (Figura 5) [23]. 95
- 2.15 Diagonalização exata para cadeias finitas AB_2 de spins. Frustração AA–BB (intra- e intercelular). Reproduzido de R. R.Montenegro Filho [26]. 96

Capítulo 1

O MODELO DE ROTORES QUÂNTICOS

1.1 Introdução

Em primeira aproximação, os graus de liberdade de uma molécula diatômica podem ser tratados como independentes entre si [1]. Assim, o hamiltoniano total da molécula se desdobra em uma soma de hamiltonianos. Em seguida, um modelo analiticamente solúvel é adotado para cada hamiltoniano: o movimento vibracional, no regime de pequenas vibrações, é aproximado por um potencial quadrático (potencial harmônico); para o movimento rotacional, considera-se a molécula constituída por dois átomos ligados pela famosa *haste inextensível e sem massa* – o *rotor rígido*. Esta é a abordagem usual adotada pela maioria dos textos básicos de Mecânica Quântica para o tratamento de moléculas diatômicas e sistemas afins, e que se presta também como um excelente recurso didático para introduzir conceitos quânticos fundamentais. Por outro lado, tal abordagem exemplifica, talvez, o emprego mais básico desta

útil *idealização* – o rotor rígido – no entendimento das propriedades dos graus de liberdade rotacionais de sistemas quânticos. O rotor rígido se mostra então como um objeto extremamente conveniente: o espectro rotacional – os autovalores – são determinados por um processo *semi-clássico*; os estados quânticos – as autofunções – são os próprios *harmônicos esféricos*, entidades básicas da Física Matemática [1]. Conseqüentemente, tem-se aqui um ponto de partida para modelos teóricos mais sofisticados.

Evidentemente rotores rígidos não existem na natureza. Aqui se amplia de forma menos intuitiva esta noção, com o entendimento de que cada rotor pode também ser usado para representar um grau de liberdade quântico efetivo para os estados de baixa energia de um número reduzido de elétrons proximamente emparelhados, podendo, inclusive, os rotores *interagirem* entre si. Tem-se então o que convenientemente se define como *rotor quântico*, um sistema que pode ser visualizado como uma partícula cujo movimento se dá na superfície de uma esfera fictícia ($N > 1$)–dimensional [2]. A orientação é representada por um vetor unitário $\hat{\mathbf{n}}_i$ que satisfaz:

$$\hat{\mathbf{n}}^2 = 1. \quad (1.1)$$

A notação (chapéu) indica que a orientação $\hat{\mathbf{n}}_i$ é um operador quântico e o i representa o sítio onde o rotor reside. Neste trabalho, pretende-se considerar um número infinito de tais rotores localizados em pontos de redes d-dimensionais, dotadas de topologias diversas. Cada rotor tem um momento $\hat{\mathbf{p}}_i$ e o vínculo Eq. (1.1) indica que este deve ser tangente à superfície da esfera N–dimensional.

A posição e o momento do rotor satisfazem as relações canônicas de comutação:

$$[\hat{n}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}. \quad (1.2)$$

Efetivamente, será mais conveniente trabalhar com as $N(N - 1)$ componentes do momento angular do rotor

$$\hat{L}_{\alpha\beta} = \hat{n}_\alpha \hat{p}_\beta - \hat{n}_\beta \hat{p}_\alpha. \quad (1.3)$$

Suas relações de comutação são deduzidas de forma direta usando Eq. (1.2) e Eq. (1.3) acima. Particularmente importante apresenta-se o caso $N = 3$. O momento angular pode ser expresso mais convenientemente como

$$\hat{L}_\alpha = (1/2)\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}_{\beta\gamma}, \quad (1.4)$$

ou alternativamente

$$\hat{L}_\alpha = -i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{n}_\beta\frac{\partial}{\partial\hat{n}_\gamma}, \quad (1.5)$$

onde $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ é o tensor de Levi-Civita (tensor totalmente antissimétrico com $\epsilon_{123} = 1$). Evidentemente,

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = 0,$$

ou seja, o momento angular de cada rotor é perpendicular à sua orientação, como se poderia antecipar. Destarte, as relações de comutação entre operadores localizados no mesmo sítio são

$$\begin{aligned} [\hat{L}_\alpha, \hat{L}_\beta] &= i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}_\gamma, \\ [\hat{L}_\alpha, \hat{n}_\beta] &= i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{n}_\gamma, \\ [\hat{n}_\alpha, \hat{n}_\beta] &= 0; \end{aligned} \quad (1.6)$$

os operadores localizados em sítios distintos comutam.

A dinâmica de cada rotor é governada pelo seu termo de energia cinética, dada pela expressão

$$\hat{H}_K = \frac{1}{2I} \hat{\mathbf{L}}^2 = \frac{Jg}{2} \hat{\mathbf{L}}^2, \quad (1.7)$$

onde I é o momento de inércia do rotor [1]. O hamiltoniano $\hat{H}_K$ pode ser diagonalizado para valores gerais de N recorrendo-se a métodos da teoria de grupos. Para $N = 3$, usado neste trabalho, os autovalores de $\hat{H}_K$ são

$$\frac{Jgl(l+1)}{2} \hbar^2, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.8)$$

com degenerescência igual a $2l + 1$.

Efeitos interessantes surgem quando se introduzem termos de energia potencial acoplando os rotores entre si. Constrói-se, por exemplo, um hamiltoniano da seguinte forma [2]:

$$\hat{H}_R = \frac{Jg}{2} \sum_i \hat{\mathbf{L}}_i^2 + J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{\mathbf{n}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_j, \quad (1.9)$$

onde a notação $\langle ij \rangle$ indica a soma sobre os vizinhos mais próximos. Esta energia de acoplamento (segundo-termo) é minimizada quando o sistema estiver em um estado *magneticamente ordenado* no qual os rotores tendem a se orientar *opostamente*. Diferentemente, a energia cinética do rotor é minimizada quando a orientação do rotor for maximamente incerta (princípio da incerteza), isto é, o primeiro termo de $\hat{H}_R$ prefere um estado de paramagneto quântico em que os rotores não têm uma orientação definida ($\langle \hat{\mathbf{n}} \rangle = 0$). Em outras palavras, tem-se $\langle \Delta \hat{\mathbf{n}} \rangle$ máximo e conseqüentemente $\langle \Delta \hat{\mathbf{L}} \rangle$ mínimo, pelo princípio da incerteza [7], fazendo com que o momento do rotor tenda a permanecer nulo ou mínimo.

Neste trabalho, entretanto, o foco será dirigido, inicialmente, para o estudo

das propriedades de rotores modelados pelo hamiltoniano abaixo [3] ou similar, constituindo uma generalização da Eq. (1.9), onde se acrescentam novas interações:

$$\hat{H}_R = \frac{g}{2} \sum_i [(\hat{L}_{i\mu}^2 + \alpha(\hat{L}_{i\mu}^2)^2)] + \sum_{\langle ij \rangle} [J\hat{n}_{i\mu}\hat{n}_{j\mu} + K\hat{L}_{i\mu}\hat{L}_{j\mu} + M(\hat{n}_{i\mu}\hat{L}_{j\mu} + \hat{n}_{j\mu}\hat{L}_{i\mu})], \quad (1.10)$$

onde μ representa a componente cartesiana ($\mu = x, y, z$, para $N=3$), havendo soma implícita sobre estes índices repetidos e a notação $\langle ij \rangle$ indica a soma sobre os vizinhos mais próximos; os acoplamentos g , α , J , K e M são todos positivos. A introdução dos acoplamentos K e M na Eq.(1.10) enriquece o modelo e produz novos resultados em relação aos sistemas modelados pelo hamiltoniano dado pela Eq. (1.9). Uma propriedade fundamental de $\hat{H}_R$ é que as três *cargas*,

$$\hat{Q}_\mu = \sum_i \hat{L}_{i\mu}, \quad (1.11)$$

comutam com ele e são, portanto, conservadas. Na realidade, $\hat{H}_R$ é o hamiltoniano mais geral com acoplamentos bilineares, de vizinhos mais próximos, consistente com a conservação de $\hat{Q}_\mu$. O termo quártico aí incluído tem o papel apenas de suprimir contribuições de estados irrelevantes de alta energia, que tenderiam a desestabilizar o cálculo numérico implementado no computador.

Outras propriedades importantes exibidas por $\hat{H}_R$ são as *simetrias discretas* e serão vistas na seção 1.4.

1.2 Mapeamento do Modelo de Rotores Quânticos para Antiferromagnetos de Dupla Camada

Existe uma conexão simples e importante entre o hamiltoniano de rotor quântico $\hat{H}_R$, expresso pela Eq. (1.10), e um modelo geral de dupla camada (*double layer*) de spins de Heisenberg [2, 3]. Na realidade, a conexão entre modelos de rotores e antiferromagnetos é bem mais geral e será revista mais adiante. A exposição aqui permitirá incutir uma percepção intuitiva para a interpretação física dos graus de liberdade do modelo de rotores.

O modelo de dupla camada consiste de duas camadas de *spins de Heisenberg* $\mathbf{S}_{ia}$ e $\mathbf{S}_{ib}$, onde i é um índice de sítio dentro de cada camada e a e b são dois índices de camada, descrito pelo hamiltoniano (Figura 1.1)

$$\begin{aligned} \hat{H}_{dl} = & G \sum_i \hat{S}_{ia\mu} \cdot \hat{S}_{ib\mu} + \\ & \sum_{\langle ij \rangle} \left[J_a \hat{S}_{ia\mu} \hat{S}_{ja\mu} + J_b \hat{S}_{ib\mu} \hat{S}_{jb\mu} + J_{ab} (\hat{S}_{ia\mu} \hat{S}_{jb\mu} + \hat{S}_{ja\mu} \hat{S}_{ib\mu}) \right]; \end{aligned} \quad (1.12)$$

aqui o índice $\mu = 1, 2, 3$ designa componentes vetoriais, havendo soma implícita sobre este índice e $\langle ij \rangle$ denota uma soma sobre pares de vizinhos mais próximos. Focaliza-se o caso em que G é antiferromagnético, isto é, $G > 0$. Os $\mathbf{S}_{i\nu}$ ($\nu = a, b$ é o índice de camada) são operadores de spin representando o spin total de um conjunto de elétrons em alguns estados atômicos localizados.

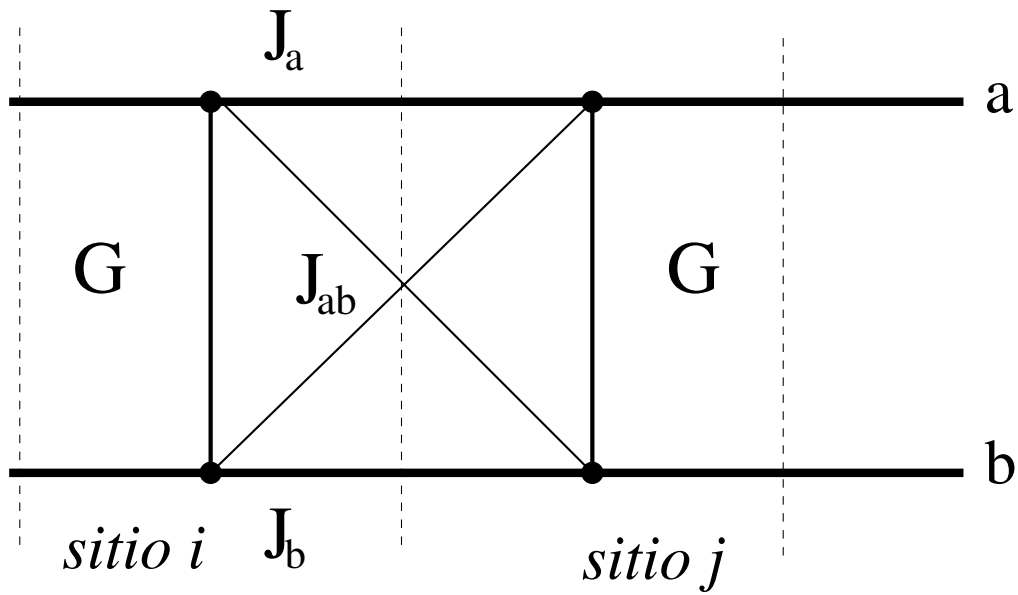


Figura 1.1: O Modelo da Dupla Camada. O Modelo é tridimensional. Aqui se mostram os spins, representados por círculos pretos, localizados em um dos três planos perpendiculares aos planos das camadas, pertencentes a dois sítios contíguos. Os acoplamentos do hamiltoniano –Eq. (1.12) – estão representados.

Em cada sítio, os spins $\mathbf{S}_{i\nu}$ obedecem as relações usuais de comutação para momento angular (análogas àquelas do operador $\hat{\mathbf{L}}$),

$$[\hat{S}_\alpha, \hat{S}_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{S}_\gamma, \quad (1.13)$$

enquanto spins localizados em sítios diferentes comutam. Entretanto, há uma diferença crucial entre os espaços de Hilbert de estados em que atuam rotores quânticos e spins de Heisenberg. Para o modelo de rotores, permitem-se estados com momento angular total arbitrário l em cada sítio, havendo, portanto, um número infinito de estados por sítio. No modelo de Heisenberg considerado, só se permitem estados com spin total S em cada sítio, onde S poderá assumir valores inteiros ou *semi-inteiros*. De fato, há precisamente $2S + 1$ estados em cada sítio:

$$|S, m\rangle, \quad m = -S \dots S, \quad (1.14)$$

e a identidade de operador,

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = S(S + 1), \quad (1.15)$$

prevalecendo para cada sítio i e camada ν .

No regime de $G \gg J_a, J_b, J_{ab}$, numa primeira aproximação, os acoplamentos J podem ser inteiramente desprezados, e então $\hat{H}_{dl}$ se desacopla em pares de sítios, cada um com um acoplamento antiferromagnético G entre dois spins. O hamiltoniano para cada par pode ser diagonalizado observando-se que $\mathbf{S}_{ia}$ e $\mathbf{S}_{ib}$ se acoplam em estados com momento angular total $0 \leq l \leq 2S$ e daí se obtêm as autoenergias:

$$\left(\frac{G}{2}\right) (l(l + 1) - 2S(S + 1)), \quad (1.16)$$

com degenerescência $2l + 1$. A partir desse ponto, percebe-se que estas energias e degenerescências estão em *correspondência um a um* com aquelas de um *único* rotor quântico, à parte a restrição de l ser menor ou igual a $2S$ não se aplicar com relação a este último. Se o interesse estiver focado primordialmente em estados de baixa energia, então parece razoável a representação de cada par de spins por um rotor quântico.

Destarte, pretende-se estabelecer o importante fato de que o modelo de rotor quântico representa as propriedades dos antiferromagnetos de spins de Heisenberg no regime de baixa energia. O espectro de acoplamento forte (G acima descrito) claramente sugere a correspondência de operador

$$\hat{\mathbf{L}}_i = \hat{\mathbf{S}}_{ia} + \hat{\mathbf{S}}_{ib}, \quad (1.17)$$

de sorte que o momeno angular do rotor representa o momento angular total do sistema composto dos dois spins subjacentes. O exame dos elementos de matriz dos operadores, no limite de S grande, sugere ainda a correspondência

$$\hat{\mathbf{n}}_i = f(\hat{\mathbf{S}}_{ia} - \hat{\mathbf{S}}_{ib}), \quad \text{com } f \text{ constante.} \quad (1.18)$$

A correspondência acima implica, neste caso, que a coordenada do rotor $\hat{\mathbf{n}}_i$ é o parâmetro de ordem antiferromagnético do sistema de spins. Estados magneticamente ordenados do modelo de rotor com $\langle \hat{\mathbf{n}}_i \rangle \neq 0$ são, portanto, estados de spin com ordem antiferromagnética de longo alcance, com um momento magnético total nulo.

Levando-se este mapeamento – Eqs. (1.17) e (1.18) – no hamiltoniano $\hat{H}_R$ – Eq. (1.10) – e tendo em vista que operadores atuantes em sítios diferentes comutam,

chega-se aos resultados abaixo, após comparação termo a termo com a Eq. (1.12):

$$\begin{aligned}
 G &= g, \\
 J &= \frac{1}{f^2} \frac{J_a + J_b + J_{ab}}{4}, \\
 K &= \frac{J_a + J_b - J_{ab}}{4}, \\
 M &= \frac{1}{f} \frac{J_a - J_b}{4}.
 \end{aligned} \tag{1.19}$$

Percebe-se que a simetria de troca entre camadas ($J_a = J_b$) implica acoplamento M nulo. Portanto, esta simetria é equivalente a $\mathcal{P}$. Note-se, de passagem, que f [3] não deve ser encarado como fator normalizador. Neste caso, $f = 1/|\hat{\mathbf{S}}_a - \hat{\mathbf{S}}_b|$ não seria constante e poderia introduzir complicações para o mapeamento (não linearidade, por exemplo). Pode-se fazer $f = 1$, simplificando-se o mapa.

Realizações experimentais do modelo de dupla camada podem ser vistas em [4].

1.3 Extensão do Modelo de Rotores Quânticos

A seção 1.2 vislumbrou uma das maneiras como os rotores quânticos podem representar um número par (dois, mais especificamente) de elétrons de Heisenberg. Este é o caso de rotores quânticos com momento angular *mínimo* igual a zero (estado singleto possível). Surge, naturalmente, a questão do tratamento de um número *ímpar* de elétrons de Heisenberg em um modelo subjacente de spins. Para o mister, o conceito de rotor quântico é formalmente ampliado, introduzindo-se um *monopolo magnético* na origem do espaço n (posição). Procedendo-se desta forma, tem-se o rotor quântico com momento angular mínimo diferente de zero. Como se verá adiante na subseção 1.5.2, esta extensão será operacionalizada recorrendo-se a funções

ortogonais de Sturm-Liouville, que possuem a propriedade essencial de *completeza* e que produzem interpretação física coerente. O $\hat{H}_R$ correspondente propicia o surgimento de estados ferromagnéticos quantizados, em que o momento é um semi-inteiro vezes o número de rotores do sistema. No primeiro caso (sem monopolo), têm-se os *rotores com $q = 0$* e no segundo (com monopolo na origem), *rotores com $q = p/2$* , onde $|p|$ (p ímpar, positivo ou negativo) é o número de elétrons representados pelo rotor e q está definido na Sub-seção 1.5.2, a seguir.

1.4 Simetrias Discretas do Hamiltoniano $\hat{H}_R$

Estuda-se aqui apenas a simetria de inversão espacial, que é verificada através das transformações:

$$\mathcal{P} : \quad \hat{L}_\mu \rightarrow \hat{L}_\mu, \quad \hat{n}_\mu \rightarrow -\hat{n}_\mu, \quad (1.20)$$

e que se refere exclusivamente aos rotores com $q = 0$ (rotores com momento angular mínimo nulo) e com acoplamento $M = 0$. A presença da simetria $\mathcal{P}$ poderá implicar que as propriedades do sistema com $M = 0$ são um tanto diferentes daquelas com $M \neq 0$, conforme Seções III e IV da referência [3].

Os rotores com $q \neq 0$ não possuem a simetria $\mathcal{P}$, qualquer que seja o valor de M (sub-seção 1.7.4).

1.5 Representação do Hamiltoniano $\hat{H}_R$ – Determinação dos Elementos de Matriz de $\hat{\mathbf{L}}$, $\hat{\mathbf{L}}^2$ e de $\hat{n}$

Objetivando o tratamento de $\hat{H}_R$ pela teoria de campo médio, efetivar-se-á a derivação dos elementos de matriz dos operadores $\hat{n}$ e $\hat{\mathbf{L}}$, lançando-se mão de um subespaço gerado por estados apropriados para cada caso. Doravante, para não sobrecarregar as fórmulas, usam-se unidades tais que $\hbar = 1$ (para retornar à situação física real, basta proceder à correção dimensional dos resultados, efetivando-se a multiplicação por uma potência adequada de $\hbar$). Os casos $q = 0$ e $q = 1/2$ serão, de início, tratados separadamente; o tratamento unificado que se fará em seguida servirá como teste de consistência para as derivações mostradas neste trabalho.

1.5.1 Rotores com $q = 0$

A determinação dos elementos de matriz é efetuada recorrendo-se ao espaço de Hilbert gerado pela base formada de estados de esféricos harmônicos $|l, m\rangle$, também designados pela notação usual $Y_{l,m}$. Trata-se da base constituída de autoestados simultâneos de $\hat{\mathbf{L}}^2$ e de $\hat{L}_z$, satisfazendo

$$\hat{\mathbf{L}}^2 |l, m\rangle = l(l+1) |l, m\rangle, \quad (1.21)$$

$$\hat{L}_z |l, m\rangle = m |l, m\rangle, \quad (1.22)$$

onde l e m são inteiros e $l \geq 0$, relacionados entre si por

$$-l \leq m \leq l. \quad (1.23)$$

Os elementos de matriz dos operadores $\hat{\mathbf{L}}$, $\hat{\mathbf{L}}^2$ e de $\hat{n}$ não identicamente nulos estão expressos abaixo:

$$\begin{aligned} \langle l, m | \hat{L}^2 | l, m \rangle &= l(l+1), \\ \langle l, m | \hat{L}_z | l, m \rangle &= m, \\ \langle l, m | \hat{L}_+ | l, m-1 \rangle &= [(l+m)(l-m+1)]^{1/2}, \\ \langle l, m | \hat{n}_z | l+1, m \rangle &= \left[\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)} \right]^{1/2}, \\ \langle l, m | \hat{n}_+ | l+1, m-1 \rangle &= \left[\frac{(l-m+1)(l-m+2)}{(2l+1)(2l+3)} \right]^{1/2}, \\ \langle l, m | \hat{n}_- | l+1, m-1 \rangle &= - \left[\frac{(l+m+1)(l+m+2)}{(2l+1)(2l+3)} \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Aqui, como usual, $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$, e similarmente para $\hat{n}_\pm$. Para se obter os demais elementos de matriz, procede-se à conjugação complexa dos elementos acima. Por exemplo, os demais elementos de matriz de $\hat{n}_-$ são, desta forma, facilmente derivados:

$$\begin{aligned} \langle l, m | \hat{n}_+ | l+1, m-1 \rangle^* &= \langle l+1, m-1 | \hat{n}_- | l, m \rangle = \\ &= [(l-m+1)(l-m+2)/(2l+1)(2l+3)]^{1/2}; \end{aligned}$$

atribuindo-se novos valores $l \rightarrow l - 1$ e $m \rightarrow m + 1$, resulta, após substituições,

$$\begin{aligned} \langle l + 1, m - 1 | \hat{n}_- | l, m \rangle &\longrightarrow \langle l, m | \hat{n}_- | l - 1, m + 1 \rangle = \\ &[(l - m - 1)(l - m)/(2l - 1)(2l + 1)]^{1/2}; \end{aligned} \quad (1.25)$$

procedendo-se similarmente para os elementos de matriz dos outros operadores. Todos os elementos de matriz não obteníveis por conjugação complexa destes acima são zero. Observa-se que $\hat{n}_\mu$ só tem elementos de matriz não nulos entre estados com momentos angulares l e $l \pm 1$. Em particular, os elementos de matriz de $\hat{n}_\mu$ entre estados com o mesmo valor de l são nulos; isto ocorre pelo fato de $\hat{n}_\mu$ ser ímpar sob a paridade $\mathcal{P}$ (inversão espacial) e os estados $|l, m\rangle$ possuírem paridade definida.

A derivação das três últimas equações acima foi realizada lançando-se mão das seguintes relações de recorrência das *funções associadas de Legendre* [5]:

$$(2n + 1)xP_n^m(x) = (n + m)P_{n-1}^m(x) + (n - m + 1)P_{n+1}^m(x), \quad (1.26)$$

$$\begin{aligned} (2n + 1)(1 - x^2)^{1/2}P_n^m(x) &= P_{n+1}^{m+1}(x) - P_{n-1}^{m+1}(x) \\ &= (n + m)(n + m - 1)P_{n-1}^{m-1}(x) - \\ &\quad (n - m + 1)(n - m + 2)P_{n+1}^{m-1}(x), \end{aligned} \quad (1.27)$$

e a definição de *harmônicos esféricos* [5]:

$$Y_n^m(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2n + 1}{4\pi} \frac{(n - m)!}{(n + m)!}} P_n^m(\cos \theta) e^{im\phi}. \quad (1.28)$$

Com as atribuições $x = \cos \theta$ e $n \rightarrow l$, das Eq. (1.26) e Eq. (1.28), obtém-se

$$\begin{aligned} \cos \theta Y_l^m(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1}^m(\theta, \phi) + \\ &\quad \sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}} Y_{l-1}^m(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (1.29)$$

Das Eq. (1.27) e Eq. (1.28), juntamente com $0 \leq \theta \leq \pi$ e $(1-x^2)^{1/2} = \sin \theta$, resultam as seguintes relações:

$$\begin{aligned} e^{i\phi} \sin \theta Y_l^m(\theta, \phi) &= -\sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m+2)}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1}^{m+1}(\theta, \phi) + \\ &\quad \sqrt{\frac{(l-m)(l-m-1)}{(2l-1)(2l+1)}} Y_{l-1}^{m+1}(\theta, \phi), \end{aligned} \quad (1.30)$$

$$\begin{aligned} e^{-i\phi} \sin \theta Y_l^m(\theta, \phi) &= -\sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l-1)(2l+1)}} Y_{l-1}^{m-1}(\theta, \phi) + \\ &\quad \sqrt{\frac{(l-m+2)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1}^{m-1}(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (1.31)$$

Observando-se que $\hat{n}_z \rightarrow \cos \theta$, $\hat{n}_+ \rightarrow e^{i\phi} \sin \theta$, $\hat{n}_- \rightarrow e^{-i\phi} \sin \theta$ e, finalmente, usando-se a relação de ortogonalidade dos harmônicos esféricos

$$\int Y_{l'}^{m'*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (1.32)$$

onde $\delta_{\alpha\beta}$ é o símbolo delta de Kronecker, chega-se às equações desejadas.

1.5.2 Rotores com $q = 1/2$

Generaliza-se a forma da Eq. (1.5) [6],

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{p}} - Ze\hat{\mathbf{A}}) - q\hat{\mathbf{n}}, \quad (1.33)$$

onde $q = \frac{1}{2}DZ$, em que $D = 2eg$ é a intensidade de monopolo em unidades de Dirac, isto é, $(2e)^{-1}$; D é um inteiro que pode ser positivo, negativo ou zero; $\mathbf{A}$ é o potencial vetor de um monopolo de Dirac na origem do espaço n (posição), que pode ser convenientemente definido por [3] $\epsilon_{\mu\nu\lambda}\partial A_\lambda/\partial n_\nu = -gn_\nu$ (para ficar coerente com a Eq. (1.94), embora existam formas alternativas [6, 7]. Na equação acima, o primeiro termo entre parênteses representa o momento canônico (conjugado de $\hat{\mathbf{n}}$) de um partícula inserida num campo eletromagnético originado pelo monopolo magnético dotado de momento angular $q\hat{\mathbf{n}}$ (ou intensidade de monopolo g) [8] e cujo potencial vetor é $\mathbf{A}$; o momento do rotor, é portanto a soma de dois momentos angulares. Para desonerar as fórmulas, adotou-se $\hbar = c = 1$ (c representa a velocidade da luz no vácuo). Observe-se que

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = -q,$$

diferentemente do que acontece com os rotores usuais ($q = 0$). O Operador $\hat{\mathbf{L}}$ ora definido satisfaz as relações de comutação – Eq. (1.6) –, como deve ser com o *operador de momento angular*.

O espaço de Hilbert adequado é formado por estados representados pelas *seções angulares* [6] para as quais se verificam

$$\hat{\mathbf{L}}^2|q, l, m\rangle = l(l+1)|q, l, m\rangle; \quad \hat{L}_z|q, l, m\rangle = m|q, l, m\rangle, \quad (1.34)$$

onde

$$l = |q|, |q| + 1, |q| + 2, \dots, m = -l, -l + 1, \dots, l. \quad (1.35)$$

Em particular,

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ |q, l, m\rangle &= \sqrt{(l-m)(l+m+1)} |q, l, m+1\rangle, \\ \hat{L}_- |q, l, m\rangle &= \sqrt{(l+m)(l-m+1)} |q, l, m-1\rangle. \end{aligned} \quad (1.36)$$

Os $|q, l, m\rangle$ são as auto-seções ou *harmônicos de monopolo*.

A forma explícita dos harmônicos de monopolo, a que também se refere pela notação mais usual $Y_{q,l,m}$, é dada abaixo:

$$\begin{aligned} (Y_{q,l,m})_a &= M_{q,l,m} (1-x)^{\alpha/2} (1+x)^{\beta/2} P_n^{(\alpha,\beta)}(x) e^{i(m+q)\phi}, \\ (Y_{q,l,m})_b &= (Y_{q,l,m})_a e^{(-2iq)\phi}, \end{aligned} \quad (1.37)$$

onde a e b [6, 7] denotam as regiões em que foi dividido o espaço exterior ao monopolo magnético, com as definições:

$$\alpha = -q - m, \quad \beta = q - m, \quad n = l + m, \quad x = \cos \theta; \quad (1.38)$$

$$M_{q,l,m} = 2^m \sqrt{\left[\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-m)!(l+m)!}{(l-q)!(l+q)!} \right]}; \quad (1.39)$$

e $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ são os polinômios de Jacobi [9],

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} (1-x)^{-\alpha} (1+x)^{-\beta} \frac{d^n}{dx^n} [(1-x)^{(\alpha+n)} (1+x)^{(\beta+n)}]. \quad (1.40)$$

Tem-se ainda a *relação de ortogonalidade* dos polinômios de Jacobi [10]:

$$\int_{-1}^1 (1-x)^\alpha (1+x)^\beta P_n^{(\alpha,\beta)}(x) P_m^{(\alpha,\beta)}(x) dx = \frac{2^{\alpha+\beta+1}}{2n+\alpha+\beta+1} \frac{\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)}{\Gamma(n+1)(n+\alpha+\beta+1)} \delta_{mn}. \quad (1.41)$$

A relação de ortogonalidade válida para os harmônicos de monopolo é imediatamente dedutível das equações – Eq. (1.38) à Eq. (1.41) – a saber:

$$\int Y_{q,l',m'}^*(\theta, \phi) Y_{q,l,m}(\theta, \phi) d\Omega = \delta_{l'l} \delta_{m'm}. \quad (1.42)$$

Como se depreende das Eq. (1.34) à Eq. (1.36), os elementos de matriz de $\hat{\mathbf{L}}^2$ e de $\hat{\mathbf{L}}$ são os mesmos para o caso $q = 0$.

Derivando os elementos de matriz de $\hat{\mathbf{n}}_z$

Para a derivação dos elementos de matriz do operador $\hat{\mathbf{n}}$, o procedimento é idêntico, lançando-se mão da definição dos $Y_{q,l,m}(\theta, \phi)$, das relações de ortogonalidade e de algumas relações de recorrência dos polinômios de Jacobi [9]. Inicialmente, calculam-se os elementos de matriz de $\hat{n}_z$. Para o mister, recorre-se à relação abaixo [9]

$$\begin{aligned} 2(n+1)(n+\alpha+\beta+1)(2n+\alpha+\beta)P_{n+1}^{(\alpha,\beta)}(x) &= (2n+\alpha+\beta+1) \times \\ &[(2n+\alpha+\beta)(2n+\alpha+\beta+2)x + \alpha^2 - \beta^2] P_n^{(\alpha,\beta)}(x) \\ &- 2(n+\alpha)(n+\beta)(2n+\alpha+\beta+2)P_{n-1}^{(\alpha,\beta)}(x). \end{aligned} \quad (1.43)$$

A derivação dos elementos de matriz é imediata, bastando tão-somente o emprego da relação acima juntamente com a definição dos harmônicos de monopolo $Y_{q,l,m}$ –

Eq. (1.37) à Eq. (1.40) –, para se obter a relação de recorrência,

$$\begin{aligned} l \left[\frac{(l+m+1)(l-m+1)(l+q+1)(l-q+1)}{(2l+3)(l+m)(l-m)} \right]^{1/2} Y_{q,l+1,m}(\theta, \phi) = \\ [l(l+1) \cos \theta + 2mq] \left[\frac{2l+1}{(l+m)(l-m)} \right]^{1/2} Y_{q,l,m}(\theta, \phi) \\ -(l+1) \left[\frac{(l+q)(l-q)}{2l-1} \right]^{1/2} Y_{q,l-1,m}(\theta, \phi), \end{aligned} \quad (1.44)$$

para q qualquer. Usando a relação de ortogonalidade dos harmônicos de monopolo, após particularização para $q = 1/2$ (único caso contemplado neste trabalho), obtêm-se os elementos de matriz de $\hat{n}_z$, não identicamente nulos:

$$\langle \frac{1}{2}, l, m | \hat{n}_z | \frac{1}{2}, l, m \rangle = -\frac{m}{l(2l+2)}, \quad (1.45)$$

$$\langle \frac{1}{2}, l+1, m | \hat{n}_z | \frac{1}{2}, l, m \rangle = \frac{1}{(2l+2)} \sqrt{(l+m+1)(l-m+1)}, \quad (1.46)$$

$$\langle \frac{1}{2}, l, m | \hat{n}_z | \frac{1}{2}, l-1, m \rangle = \frac{1}{(2l)} \sqrt{(l-m)(l+m)}. \quad (1.47)$$

Derivando os elementos de matriz de $\hat{n}_-$

Para o cálculo dos elementos de matriz de $\hat{n}_-$, há que se dispor de uma expressão relacionando os $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ com os $P_n^{(\alpha-1,\beta-1)}(x)$. De fato, mediante as expressões [9]

$$(2n + \alpha + \beta) P_n^{(\alpha-1,\beta)}(x) = (n + \alpha + \beta) P_n^{(\alpha,\beta)}(x) - (n + \beta) P_{n-1}^{(\alpha,\beta)}(x), \quad (1.48)$$

$$(2n + \alpha + \beta) P_n^{(\alpha,\beta-1)}(x) = (n + \alpha + \beta) P_n^{(\alpha,\beta)}(x) + (n + \alpha) P_{n-1}^{(\alpha,\beta)}(x), \quad (1.49)$$

e manipulações algébricas, resulta

$$\begin{aligned} (2n + \alpha + \beta - 1)P_n^{(\alpha-1, \beta-1)}(x) = \\ \frac{(n + \alpha + \beta - 1)}{(2n + \alpha + \beta)} \left[(n + \alpha + \beta)P_n^{(\alpha, \beta)}(x) + (n + \alpha)P_{n-1}^{(\alpha, \beta)}(x) \right] \\ - \frac{(n + \beta - 1)}{(2n + \alpha + \beta - 2)} \left[(n + \alpha + \beta + 1)P_{n-1}^{(\alpha, \beta)}(x) + (n + \alpha - 1)P_{n-2}^{(\alpha, \beta)}(x) \right], \end{aligned} \quad (1.50)$$

e da mesma forma como se procedeu anteriormente, consegue-se, para q qualquer, a expressão geral:

$$\begin{aligned} [(1 - x^2)e^{-i\phi}] \left[\frac{1}{(l + m)(l + m - 1)} \right]^{1/2} Y_{q, l-1, m+1}(\theta, \phi) = \\ \frac{1}{l} \left[\frac{(l + q)(l - q)(l - m - 1)(l - m)}{(2l + 1)(2l - 1)(l + m)(l + m - 1)} \right]^{1/2} Y_{q, l, m}(\theta, \phi) \\ - \frac{q}{l(l - 1)} \left[\frac{l - m - 1}{l + m - 1} \right] Y_{q, l-1, m}(\theta, \phi) \\ - \frac{1}{l - 1} \left[\frac{(l + q - 1)(l - q - 1)}{(2l - 3)(2l - 1)} \right]^{1/2} Y_{q, l-2, m}(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (1.51)$$

Fazendo-se a atribuição $q = \frac{1}{2}$, derivam-se os elementos de matriz do operador $\hat{n}_-$, não identicamente nulos

$$\langle \frac{1}{2}, l, m | \hat{n}_- | \frac{1}{2}, l - 1, m + 1 \rangle = \frac{1}{2l} \sqrt{(l - m - 1)(l - m)}, \quad (1.52)$$

$$\langle \frac{1}{2}, l - 1, m | \hat{n}_- | \frac{1}{2}, l - 1, m + 1 \rangle = -\frac{1}{2l(l - 1)} \sqrt{(l + m)(l - m - 1)}, \quad (1.53)$$

$$\langle \frac{1}{2}, l - 2, m | \hat{n}_- | \frac{1}{2}, l - 1, m + 1 \rangle = -\frac{1}{2(l - 1)} \sqrt{(l + m)(l + m - 1)}. \quad (1.54)$$

Derivando os elementos de matriz de $\hat{n}_+$

Nem todos os elementos de $\hat{n}_+$ são obteníveis por conjugação complexa das Eq. (1.52) à Eq. (1.54), motivo por que devem ser deduzidos de forma independente. De qualquer forma, este é o procedimento correto a seguir, visto que propicia uma das maneiras de testar a consistência das derivações neste trabalho, a ser usada mais adiante. Para a obtenção desses elementos, basta expressar os $P_n^{(\alpha+1, \beta+1)}(x)$ em termos de $P_n^{(\alpha, \beta)}(x)$. Fez-se uso das seguintes relações [9]:

$$\begin{aligned} (n + \frac{1}{2}\alpha + \frac{1}{2}\beta + 1)(1 - x)P_n^{(\alpha+1, \beta)}(x) &= (n + \alpha + 1)P_n^{(\alpha, \beta)}(x) \\ &\quad - (n + 1)P_{n+1}^{(\alpha, \beta)}(x), \end{aligned} \quad (1.55)$$

$$\begin{aligned} (n + \frac{1}{2}\alpha + \frac{1}{2}\beta + 1)(1 + x)P_n^{(\alpha, \beta+1)}(x) &= (n + \beta + 1)P_n^{(\alpha, \beta)}(x) \\ &\quad + (n + 1)P_{n+1}^{(\alpha, \beta)}(x), \end{aligned} \quad (1.56)$$

$$P_n^{(\alpha, \beta-1)}(x) - P_n^{(\alpha-1, \beta)}(x) = P_{n-1}^{(\alpha, \beta)}(x). \quad (1.57)$$

Com o recurso à Eq. (1.43), para eliminar a dependência explícita em $x = \cos \theta$, obtém-se a relação de recorrência entre polinômios de Jacobi adequada:

$$\begin{aligned} (n + \frac{1}{2}\alpha + \frac{1}{2}\beta + 1)(1 - x^2)P_{n-1}^{(\alpha+1, \beta+1)}(x) &= \\ \frac{2n(\alpha - \beta)}{(2n + \alpha + \beta)}P_n^{(\alpha, \beta)}(x) - \frac{2n(n + 1)}{(2n + \alpha + \beta + 1)}P_{n+1}^{(\alpha, \beta)}(x) \\ + \frac{(2(n + \alpha)(n + \beta)(2n + \alpha + \beta + 2))}{(2n + \alpha + \beta)(2n + \alpha + \beta + 1)}P_{n-1}^{(\alpha, \beta)}(x), \end{aligned} \quad (1.58)$$

de onde se deduz a relação geral entre os monopolos harmônicos, para q *qualquer*:

$$\begin{aligned} [(1-x^2)e^{i\phi}] \left[\frac{1}{(l-m+1)(l-m)} \right]^{1/2} Y_{q,l,m-1}(\theta, \phi) = \\ -\frac{q(l+m)}{l(l+1)} \left[\frac{1}{(l+m)(l-m)} \right]^{1/2} Y_{q,l,m}(\theta, \phi) \\ -\frac{1}{(l+1)} \left[\frac{(l+m)(l+m+1)(l+q+1)(l-q+1)}{(2l+1)(2l+3)(l-m+1)(l-m)} \right]^{1/2} Y_{q,l+1,m}(\theta, \phi) \\ +\frac{1}{l} \left[\frac{(l+q)(l-q)}{(2l+1)(2l-1)} \right]^{1/2} Y_{q,l-1,m}(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (1.59)$$

Desta feita, particularizando-se para $q = \frac{1}{2}$, obtêm-se os elementos de matriz de $\hat{n}_+$

não identicamente nulos:

$$\langle \frac{1}{2}, l, m | \hat{n}_+ | \frac{1}{2}, l, m-1 \rangle = -\frac{1}{2l(l+1)} \sqrt{(l-m+1)(l+m)}, \quad (1.60)$$

$$\langle \frac{1}{2}, l+1, m | \hat{n}_+ | \frac{1}{2}, l, m-1 \rangle = -\frac{1}{2(l+1)} \sqrt{(l+m)(l+m+1)}, \quad (1.61)$$

$$\langle \frac{1}{2}, l-1, m | \hat{n}_+ | \frac{1}{2}, l, m-1 \rangle = \frac{1}{2l} \sqrt{(l-m+1)(l-m)}. \quad (1.62)$$

A obtenção dos demais elementos de matriz – tanto de $\hat{n}_+$ como de $\hat{n}_-$ – se efetiva mediante conjugação complexa das equações – Eq. (1.52) à Eq. (1.54) – e das equações – Eq. (1.60) à Eq. (1.62) –, respectivamente, de maneira inteiramente idêntica ao caso $q = 0$ (sub-seção 1.5.1), observando-se que $\hat{n}_+^* = \hat{n}_-$.

Divergências encontradas. Consistência dos resultados obtidos

Cabe aqui um registro importante: os elementos de matriz calculados acima para $q = \frac{1}{2}$ e entre estados com valores de l distintos diferem, por um fator igual a $[(2l+1)/(2)]^{1/2}$, daqueles calculados em [3], obtidos com o emprego de outros recursos matemáticos (teorema de Wigner-Eckart), isto é

$$\text{elementos derivados} \times \sqrt{\frac{2l+1}{2}} = \text{elementos constantes da referência [3].}$$

Apesar de consideráveis esforços envidados, não se obteve êxito nestas derivações conforme o caminho trilhado por [3], não se permitindo verificar a origem da discrepância. Por outro lado, demonstra-se a seguir a consistência dos resultados deste trabalho, razão por que devem ser considerados corretos.

Para o caso $q = 0$, verifica-se [6] que

$$Y_{0,l,m}(\theta, \phi) = Y_{l,m}(\theta, \phi), \quad (1.63)$$

ou seja, *os harmônicos de monopolo são os harmônicos esféricos usuais para $q = 0$* [6]. A forma de visualizar este fato é observar que a Eq. (1.33) se reduz à Eq. (1.5), quando $q = 0$.

O primeiro teste de consistência consiste em obter os elementos de matriz dos rotores com $q = 0$ a partir das relações – Eq. (1.44), Eq. (1.51) e Eq (1.59). De

fato, com a atribuição $q = 0$, resulta:

$$\left[\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+3)(l+m)(l-m)} \right]^{1/2} Y_{l+1,m}(\theta, \phi) = \left[\frac{2l+1}{(l+m)(l-m)} \right]^{1/2} \cos \theta Y_{l,m}(\theta, \phi) - \left[\frac{1}{2l-1} \right]^{1/2} Y_{l-1,m}(\theta, \phi) \quad (1.64)$$

$$\begin{aligned} [(1-x^2)e^{-i\phi}] \left[\frac{1}{(l+m)(l+m-1)} \right]^{1/2} Y_{l-1,m+1}(\theta, \phi) = \\ \left[\frac{(l-m-1)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)(l+m)(l+m-1)} \right]^{1/2} Y_{l,m}(\theta, \phi) \\ - \left[\frac{1}{(2l-3)(2l-1)} \right]^{1/2} Y_{q,l-2,m}(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (1.65)$$

$$\begin{aligned} [(1-x^2)e^{i\phi}] \left[\frac{1}{(l-m+1)(l-m)} \right]^{1/2} Y_{l,m-1}(\theta, \phi) = \\ - \left[\frac{(l+m)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)(l-m+1)(l-m)} \right]^{1/2} Y_{l+1,m}(\theta, \phi) \\ + \left[\frac{1}{(2l+1)(2l-1)} \right]^{1/2} Y_{l-1,m}(\theta, \phi), \end{aligned} \quad (1.66)$$

Com a aplicação da relação de ortogonalidade dos harmônicos esféricos, após efetuadas as integrações necessárias, recupera-se a Eq. (1.25), como deveria ser. Produziram-se, portanto, duas derivações independentes, uma corroborando a outra; a primeira ($q = 0$) concordando com [3], foi obtida dos resultados deste trabalho para q qualquer e particularizados para $q = 0$.

Um segundo teste consiste em fazer a conjugação complexa dos elementos de $\hat{n}_+$ para se obterem os correspondentes elementos de $\hat{n}_-$ e vice-versa. Por exemplo, usando-se os elementos de matriz deduzidos, verifica-se facilmente que

$$\langle \frac{1}{2}, l, m | \hat{n}_+ | \frac{1}{2}, l, m-1 \rangle^* = \langle \frac{1}{2}, l, m-1 | \hat{n}_- | \frac{1}{2}, l, m \rangle, \quad (1.67)$$

e como essas derivações foram realizadas de forma independente, produz-se mais outra confirmação.

Outros testes podem ser levados a cabo, inclusive recorrendo-se a implementações no computador, como por exemplo, a verificação da identidade $\hat{\mathbf{n}}^2 = 1$ – Eq. (1.1) – com o emprego dos elementos de matriz calculados neste trabalho.

Talvez seja relevante observar que a definição de momento angular – Eq. (1.5) ou Eq. (1.33) – envolveu o vetor $\hat{\mathbf{n}}$ em vez do vetor $\mathbf{r}$. Isto equivale a estudar operadores $\hat{\mathbf{L}}$ com $\hat{r}^2$ fixo e igual a 1 (matriz identidade), o que é irrelevante, visto que este operador atua nos graus de liberdade angulares. Portanto, o operador $\hat{\mathbf{L}}$ assim definido atua da mesma forma sobre os harmônicos de monopolo (ou harmônicos esféricos, caso $q = 0$), com as equações Eq. (1.34) à Eq. (1.36) válidas, justificando-se, portanto, o emprego de todo o formalismo adotado na referência [6].

1.6 Rotores Quânticos Versus Spins de Heisenberg

A utilidade do hamiltoniano $\hat{H}_R$ – Eq. (1.10) – não está somente na possibilidade de se encontrar um sistema experimental que possa ser explicitamente modelado por ele. Mais do que isto, presta-se a uma descrição simples e interessante de *fases quânticas* e *transições de fase* com um parâmetro de ordem conservado em um sistema com *simetria não abeliana*. As propriedades universais de $\hat{H}_R$ dependem somente de *simetrias globais* dos estados e espera-se que estas propriedades sejam bem gerais e aplicáveis a outros sistemas com as mesmas simetrias [3]. Portanto, admite-se que certos modelos de spins de Heisenberg se reduzem aos modelos de rotores quânticos com $N = 3$ e aqui se tem a motivação física para o estudo destes

modelos. Uma análise mais minuciosa desta conexão é levada a bom termo nos Capítulos 5 e 13 do livro *Quantum Phase Transitions* [2]. O mapeamento discutido na Seção 1.2 foi, na realidade, uma antecipação desta conexão mais geral.

Neste contexto, consideram-se modelos de rede de spins de Heisenberg expressos pelo hamiltoniano,

$$\hat{H}_S = \sum_{i,j} J_{ij} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j, \quad (1.68)$$

onde os operadores de spin $\hat{\mathbf{S}}_i$ possuem as propriedades usuais (Seção 1.2) e atuam sobre os $2S + 1$ estados da representação de spin S de cada sítio e os J_{ij} são um conjunto de interações de troca entre os sítios e invariantes translacionalmente.

Ressalta-se que os sítios de rede do hamiltoniano de rotor quântico não devem ser identificados necessariamente com os sítios de rede de $\hat{H}_S$; mais apropriadamente, cada rotor pode ser entendido como um efetivo grau de liberdade para um *aglomerado* contendo um número p de spins no modelo original. Quando p for *par*, cada aglomerado terá um estado fundamental de singleto de spin, da mesma forma como ocorre para $\hat{H}_R$, quando $q = 0$. Com p *ímpar*, terá momento mínimo não nulo. Neste caso, tem-se $\hat{H}_R$, com $q \neq 0$. O rotor possui uma torre de estados com momento angular crescente; por outro lado, o aglomerado de spins só pode atingir um momento angular total máximo igual a pS . Apesar desta diferença acarretar algumas conseqüências para a topologia do diagrama de fases, aspectos essenciais permanecem inalterados [2].

A existência desta estreita relação entre os dois modelos justifica, destarte, o uso da nomenclatura oriunda do magnetismo na designação das fases dos rotores quânticos, vistas a seguir.

1.7 Fases dos Rotores Quânticos em Temperatura Zero

Nesta seção se analisam, seguindo de perto a referência [3], as fases dos rotores quânticos modelados pelo hamiltoniano $\hat{H}_R$, dado pela Eq. (1.10). Para produzir o diagrama de fase, usou-se a teoria de campo médio, que *se torna exata no limite de grande dimensionalidade espacial*. Entretanto, espera-se que a topologia e os aspectos gerais sejam válidos para dimensões de interesse físico. Inicia-se com uma demonstração simplificada, baseada em [11], de um importante princípio variacional da Mecânica Estatística, sobre o qual repousa a teoria de campo médio ora utilizada. Outra demonstração mais geral, baseada na expansão perturbativa da matriz de densidade, pode ser vista em [12].

1.7.1 O Teorema Variacional de Bogoliubov – Teoria de Campo Médio

A teoria de campo médio aproxima um sistema de *partículas interagentes* por um sistema de *partículas não-interagentes*. O sistema não-interagente *ótimo* pode ser escolhido com o auxílio da *desigualdade de Bogoliubov*, que também fornece a correção de primeira ordem para o potencial de Helmholtz ou *potencial não-perturbado*.

Considere-se um sistema com um hamiltoniano H e um sistema solúvel com hamiltoniano H_0 . Seja H_1 a diferença, de sorte que $H = H_0 + H_1$. Define-se

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda H_1, \quad (1.69)$$

onde λ foi inserido por conveniência analítica: variando-se este parâmetro de zero a

um, pode-se transitar suavemente do sistema de modelo solúvel (H_0) para o sistema de interesse ($H(1) = H_0 + H_1$). O potencial de Helmholtz correspondente a $H(\lambda)$ é $F(\lambda)$, onde

$$-\beta F(\lambda) = \ln \sum_i e^{-\beta E_i(\lambda)} \equiv \ln \text{tr} e^{-\beta H(\lambda)}. \quad (1.70)$$

Aqui, o símbolo $\text{tr} e^{-\beta H(\lambda)}$ está definido pela segunda igualdade; *o traço de qualquer quantidade é a soma de seus autovalores quânticos.*

Estuda-se a dependência do potencial de Helmholtz sobre λ . Supondo que os operadores H_0 e H_1 comutam (aqui reside a particularidade da demonstração, por não abranger *operadores incompatíveis*), calcula-se a derivada primeira,

$$\frac{dF(\lambda)}{d\lambda} = \frac{\text{tr} H_1 e^{-\beta(H_0 + \lambda H_1)}}{\text{tr} e^{-\beta(H_0 + \lambda H_1)}} = \langle H_1 \rangle, \quad (1.71)$$

resultando para a segunda derivada:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F(\lambda)}{d\lambda^2} &= \beta \left[\frac{\text{tr} H_1^2 e^{-\beta(H_0 + \lambda H_1)}}{\text{tr} e^{-\beta(H_0 + \lambda H_1)}} - \left(\frac{\text{tr} H_1 e^{-\beta(H_0 + \lambda H_1)}}{\text{tr} e^{-\beta(H_0 + \lambda H_1)}} \right)^2 \right] \\ &= -\beta [\langle H_1^2 \rangle - \langle H_1 \rangle^2] \\ &= -\beta \langle H_1 - \langle H_1 \rangle \rangle^2, \end{aligned} \quad (1.72)$$

onde as médias são tomadas em relação ao fator ponderal canônico $e^{-\beta H}$. A consequência imediata provém de $d^2 F(\lambda)/d\lambda^2$ ser negativa ou zero para qualquer λ

$$\frac{d^2 F(\lambda)}{d\lambda^2} \leq 0 \quad (\text{para todo } \lambda), \quad (1.73)$$

isto é, $F(\lambda)$ é uma função côncava para todo λ e, portanto, o gráfico de $F(\lambda)$ está

sempre abaixo da reta tangente no ponto em que $\lambda = 0$:

$$F(\lambda) \leq F(0) + \lambda (dF(\lambda)/d\lambda)_{\lambda=0}. \quad (1.74)$$

Ao se fazer a atribuição $\lambda = 1$, resulta a relação abaixo, denominada de *desigualdade de Bogoliubov*:

$$F \leq F_0 + \langle H_1 \rangle_0, \quad (1.75)$$

onde, com $\lambda = 0$, $\langle H_1 \rangle_0$ é o valor médio de H_1 no sistema do modelo solúvel. A Eq. (1.75) afirma que *o potencial de Helmholtz de um sistema com hamiltoniano $H = H_0 + H_1$ é menor ou igual ao potencial de Helmholtz do sistema solúvel mais o valor médio da perturbação H_1 calculado no sistema do modelo solúvel.*

A quantidade à direita da Eq. (1.75) representa um limite superior para o potencial de Helmholtz do sistema *perturbado*, sendo claramente desejável que este limite seja o menor possível. Portanto, *quaisquer parâmetros no sistema não perturbado devem ser escolhidos no sentido de minimizar a quantidade $F_0 + \langle H_1 \rangle_0$.* Assim se obtém, efetivamente, o critério para a escolha do *melhor* modelo solúvel. Então F_0 é o potencial de Helmholtz do sistema-modelo ótimo e $\langle H_1 \rangle_0$, a primeira correção deste potencial.

A desigualdade de Bogoliubov é frequentemente escrita de outra forma. Com F_0 escrito explicitamente na forma,

$$F_0 = \langle H_0 \rangle_0 - TS_0, \quad (1.76)$$

então a Eq. (1.75) se transformará em

$$F \leq \langle H_0 \rangle_0 + \langle H_1 \rangle_0 - TS_0, \quad (1.77)$$

ou

$$F \leq \langle H \rangle_0 - TS_0. \quad (1.78)$$

1.7.2 Teoria de Campo Médio para $\hat{H}_R$ – Rotores com $q = 0$

Descreve-se agora a teoria de campo médio usada na obtenção das fases de $\hat{H}_R$ para rotores com $q = 0$ conforme tratado na referência [3].

O hamiltoniano empregado nesta referência adota *acoplamentos ferromagnéticos*, isto é, troca-se o sinal $+$ pelo sinal $-$ em $\hat{H}_R$ dado pela Eq. (1.10), a saber:

$$\hat{H}_R = \frac{g}{2} \sum_i [(\hat{L}_{i\mu}^2 + \alpha(\hat{L}_{i\mu}^2)^2)] - \sum_{\langle ij \rangle} [J\hat{n}_{i\mu}\hat{n}_{j\mu} + K\hat{L}_{i\mu}\hat{L}_{j\mu} + M(\hat{n}_{i\mu}\hat{L}_{j\mu} + \hat{n}_{j\mu}\hat{L}_{i\mu})], \quad (1.79)$$

Postula-se o hamiltoniano de campo médio por sítio na forma

$$\hat{H}_{mf} = \frac{g}{2} [L_\mu^2 + \alpha(L_\mu^2)^2] - N_\mu \hat{h}_\mu - h_\mu \hat{L}_\mu, \quad (1.80)$$

que é função dos campos locais N_μ e h_μ , com soma implícita sobre o índice repetido (o subscrito μ indica a componente cartesiana do campo). Este é o sistema-modelo, onde as interações *sentidas* por um sítio genérico i são substituídas por *campos locais (ou efetivos)*. Neste *ansatz* está subentendida a independência dos campos em relação aos sítios da rede hipercúbica, isto é, assume-se a existência de simetria translacional. O hamiltoniano acima é comumente designado de *hamiltoniano-tentativa*. A representação de $\hat{H}_R$ e de $\hat{H}_{mf}$ será realizada na base de *harmônicos esféricos* (ou de *harmônicos de monopolo*, quando se tratar de rotores com $q = 1/2$), cujos elementos de matriz respectivos já se encontram deduzidos neste trabalho.

Os campos efetivos são determinados em $T = 0$, com o emprego do teorema

variacional de Bogoliubov:

$$F \leq F_0 + \langle H_1 \rangle_0 = F_0 + \langle H - H_0 \rangle_0 = F_0 + \langle H \rangle_0 - \langle H_0 \rangle_0. \quad (1.81)$$

Com as expressões para $\hat{H}_R$ e de $\hat{H}_{mf}$, obtém-se a seguinte relação para a energia E_{mf} do estado fundamental de campo médio de $\hat{H}_R$, para o sítio genérico da rede:

$$\begin{aligned} E_{mf} \leq E_0 - \frac{JZ}{2} \langle \hat{n}_\mu \rangle_0^2 - \frac{KZ}{2} \langle \hat{L}_\mu \rangle_0^2 - \\ MZ \langle \hat{n}_\mu \rangle_0 \langle \hat{L}_\mu \rangle_0 + N_\mu \langle \hat{n}_\mu \rangle_0 + h_\mu \langle \hat{L}_\mu \rangle_0, \end{aligned} \quad (1.82)$$

onde:

$$E_{mf} \rightarrow \lim_{T \rightarrow 0} F = \lim_{T \rightarrow 0} (E_{mf} - TS_{mf}) = \lim_{T \rightarrow 0} (kT \ln \mathcal{Z}_{mf}) \quad (1.83)$$

e

$$E_0 \rightarrow \lim_{T \rightarrow 0} F_0 = \lim_{T \rightarrow 0} (E_0 - TS_0) = \lim_{T \rightarrow 0} (kT \ln \mathcal{Z}_0), \quad (1.84)$$

em que E_0 denota a energia do estado fundamental de H_{mf} ; $\mathcal{Z}_{mf}$, $\mathcal{Z}_0$ são as funções de partição e S_{mf} e S_0 são as respectivas entropias que, pela Terceira Lei da Termodinâmica, assumem valores limitados. Na expressão acima de E_{mf} , todos os valores esperados são com relação à função de onda do estado fundamental de H_{mf} ($T = 0$) e Z é o número de coordenação da rede.

A minimização de E_{mf} sobre as variações de N_μ e de h_μ foi levada a cabo numericamente para cada grupo de valores das constantes de acoplamento J , K e M . Após a minimização, o sinal $\leq$ na Eq. (1.82) poderá ser substituído por um $\approx$, indicando que se chegou a uma expressão *ótima* para a energia do estado fundamental do sistema.

Neste trabalho, elaborou-se um programa (em linguagem C) que concatena

rotinas específicas, possibilitando, para cada conjunto de valores de J , K e M , a realização das seguintes tarefas básicas:

(a) diagonalização do hamiltoniano-tentativa (H_{mf}) e cálculo da função de onda do estado fundamental e da respectiva energia (E_0). Obviamente, além da sua necessária semelhança com o sistema sob estudo, a escolha do hamiltoniano-tentativa (e do tamanho do espaço de Hilbert) está limitada mais pela capacidade de processamento eletrônico do que pelo fato de o hamiltoniano escolhido ser ou não passível de tratamento analítico. A razão disto é que esta escolha não é mais fundamentalmente importante hoje em dia, diante da possibilidade de se proceder à diagonalização exata via implementação computacional. Neste trabalho usou-se a diagonalização exata de Lanczos [14];

(b) efetivação das médias (valores esperados) constantes da Eq. (1.82) em relação à função de onda calculada acima;

(c) minimização da E_{mf} (uma função implícita dos parâmetros variacionais com seis variáveis independentes). Para tanto, incorporou-se o programa de minimização de funções multidimensionais – o Downhill Simplex Method in Multidimensions [13];

(d) armazenamento dos valores pertinentes para posterior tratamento.

O espaço de Hilbert de um sítio é infinito, mas na prática obtêm-se resultados satisfatórios com um número limitado de estados. Usou-se $l \approx 15$, em conformidade com a referência [3]; entretanto, apesar desse número ser aparentemente pequeno, o subespaço de Hilbert correspondente tem uma dimensão igual a $\sum_{l=0}^{l=15} (2l+1) = 256$, o que já representa um esforço computacional considerável (mas ainda aquém da capacidade de processamento disponível). Evidentemente, o critério para a escolha do tamanho do espaço de Hilbert deve ser o da autoconsistência dos resultados da implementação numérica.

1.7.3 Diagrama de Fases de $\hat{H}_R$

Surtem quatro fases bem caracterizadas que estão mostradas no diagrama de fase de campo médio de $\hat{H}_R$, reproduzido do artigo [3], na Figura 1.2 a seguir.

O diagrama de campo médio, projetado no plano $J \times K$, foi calculado como uma função dos acoplamentos J e K com ZM fixado em 4, $g = 1$ e $\alpha = 1/2$, onde Z é o número de coordenação da rede (um mero fator de escala, apesar de diretamente relacionado com a dimensionalidade da rede, em virtude da simplificação inerente ao tratamento do sistema por teoria de campo médio). Como $M \neq 0$, o modelo não exibe simetria de paridade $\mathcal{P}$. Os passos genéricos para sua obtenção foram descritos na sub-seção 1.6.2. As linhas espessas representam *transições de fase de primeira ordem* enquanto que as linhas finas marcam *transições de fase de segunda ordem*. Estas fases serão devidamente caracterizadas logo após a apresentação do diagrama. As fases ferromagnéticas quantizadas, que se caracterizam por apresentar momento magnético por sítio l , exibem uma seqüência infinita para todo inteiro $l > 0$, para valores maiores de K (somente as duas primeiras fases aparecem no diagrama).

Salienta-se que estas transições de fase que ocorrem em $T = 0$, quando se variam parâmetros do hamiltoniano do sistema, são causadas por flutuações quânticas que têm origem no princípio da incerteza de Heisenberg, e por este motivo são apropriadamente denominadas de *transições de fases quânticas*. Em constraste, as transições de fases em temperatura finita se devem tão-somente a flutuações térmicas.

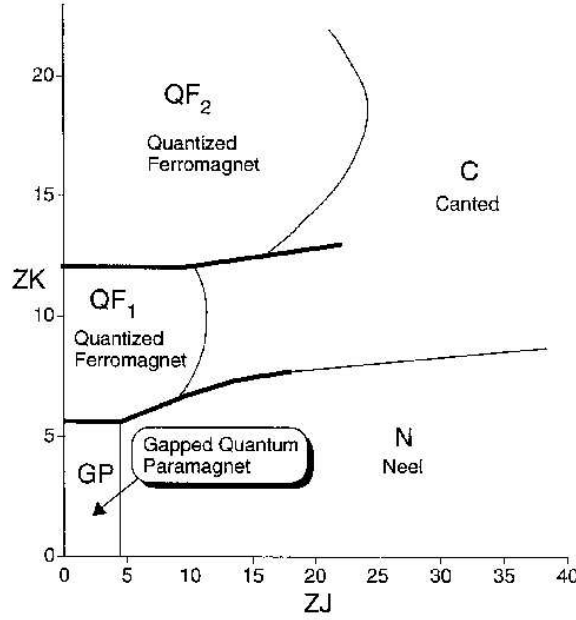


Figura 1.2: Diagrama de Fases de Campo Médio de $\hat{H}_R$. Reproduzida conforme a Fig. 1 da referência [3]

Descrevem-se a seguir as fases do diagrama da Figura 1.2:

(1) Paramagneto Quântico (GP)

É o estado em $T = 0$ sem ordem magnética. O paramagneto quântico surge quando os parâmetros são tais que

$$\langle \hat{n}_\mu \rangle = \langle \hat{L}_\mu \rangle = 0. \quad (1.85)$$

Claramente esta fase ocorre quando g for muito maior que os demais acoplamentos. Trata-se de um singleto de spin e a simetria $O(3)$ é preservada.

Os campos efetivos são nulos, isto é,

$$\hat{N}_\mu = \hat{h}_\mu = 0. \quad (1.86)$$

(2) Ferromagnetos Quantizados (QF)

Estes são ferromagnetos ordinários nos quais o momento angular total do estado fundamental é quantizado em múltiplos inteiros do número de rotores quânticos. O parâmetro de ordem ferromagnético (magnetização) define uma direção arbitrária no espaço de spin, que se pode rotular de z . O estado fundamental tem, portanto, os valores esperados

$$\langle \hat{L}_z \rangle = \text{inteiro}, \quad \langle \hat{n}_z \rangle \neq 0, \quad (1.87)$$

com as demais componentes zero.

Conforme se argumentou, cada rotor representa um grau de liberdade efetivo de um número p de spins de Heisenberg. Tal aglomeração tem um número máximo pS de spins de sorte que ferromagnetos quantizados com $l > pS$ não existem, sendo mero artefato do mapeamento do modelo de rotor, que introduziu uma torre infinita de estados em cada sítio. Conforme sugere o modelo de dupla camada visto na Seção 1.2, o valor de $\langle \hat{n}_z \rangle$ pode indicar o modo como o momento quantizado é distribuído entre os spins constituintes do aglomerado.

Para os campos efetivos, verificam-se

$$\hat{N}_z \neq 0, \quad \hat{h}_z \neq 0, \quad (1.88)$$

com as demais componentes zero. Os valores de $\hat{N}_z$ e $\hat{h}_z$ ambos variam continuamente quando os acoplamentos são alterados, entretanto o valor de $\langle \hat{L}_z \rangle$ per-

manece atrelado a um determinado número inteiro fixo. Isto se dá pelo fato de que $\hat{L}_\mu$ comuta com $\hat{H}_R$ e $\hat{H}_{mf}$ de sorte que $\hat{L}_z$ é um *bom número quântico*.

Verifica-se que os valores dos observáveis $\hat{L}$ e $\hat{n}$ dados pela Eq. (1.87) são compatíveis com o princípio da incerteza, cuja expressão geral pode ser vista, por exemplo, na referência [7], quando se considera Eq. (1.6): uma vez ocorrida a quantização dos ferromagnetos, com $\hat{L}_z$ fixos (incerteza muito pequena), tem-se $\langle \hat{n}_{x,y} \rangle = 0$ (incerteza muito grande). Por outro lado, $\hat{L}_z$ e $\hat{n}_z$ comutam, não estando relacionados por este princípio e portanto, $\langle \hat{n}_z \rangle$ poderá assumir, a priori, valores entre -1 e +1.

(3) Fase Ordenada de Néel (N)

Nesta fase tem-se

$$\langle \hat{n}_\mu \rangle \neq 0, \quad \text{enquanto } \langle \hat{L}_\mu \rangle = 0, \quad (1.89)$$

O nome fase Néel aqui é sugerido porque os spins no modelo de dupla camada estão orientados opostamente em ambas as camadas. Mais geralmente, designa uma fase definida por um único campo vetorial ($\hat{n}_\mu$) e que não possui nenhum momento magnético.

Esta fase também tem

$$\hat{N}_z \neq 0, \quad \hat{h}_z \neq 0. \quad (1.90)$$

com as demais componentes zero. Ambos valores de $\hat{N}_z$ e $\hat{h}_z$ variam continuamente, entretanto, $\langle \hat{L}_z \rangle = 0$, isto é, está quantizado por um valor nulo.

(4) Fase *Canted* (C)

Esta fase de *ferromagnetismo fraco*, onde não existe um perfeito alinhamento dos momentos magnéticos (a palavra *canted* vem do inglês e quer dizer *chanfrado*, *inclinado*), apresenta ambos os campos não nulos:

$$\langle \hat{n}_\mu \rangle \neq 0, \quad \langle \hat{L}_\mu \rangle \neq 0. \quad (1.91)$$

e esses campos agora variam continuamente como função dos acoplamentos. Visto haver um momento ferromagnético não nulo e variando continuamente, tem-se aqui um exemplo de um *ferromagneto não quantizado*. A simetria $O(3)$ é totalmente quebrada. No modelo de dupla camada, os spins nas duas camadas estão orientados em duas direções nao-colineares, havendo assim um momento magnético líquido.

Os campos efetivos $\hat{N}_\mu$ e $\hat{h}_\mu$ são também não nulos e assumem valores que variam suavemente, da mesma forma que os seus campo conjugados $\hat{n}_\mu$ e $\hat{L}_\mu$.

A demarcação correta das fases do diagrama da Figura 1.2 poderia ser obtida neste trabalho executando-se o programa elaborado nos moldes descritos na Subseção 1.6.2 sobre uma malha suficientemente fina do plano $J \times K$. Entretanto, em vez de se tentar a reprodução integral daquele diagrama (o que se constituiria em um mero exercício de computação), opta-se pelo estudo de casos ao longo de algumas linhas da malha. Sendo assim, estudam-se a variação do momento angular ($\hat{L}_\mu$), da posição ($\hat{n}_\mu$), onde também foi contemplada a energia de campo médio do modelo (E) ao longo de algumas retas perpendiculares aos eixos ZK e ZJ , do plano $ZJ \times ZK$ do diagrama de fases. Na realidade, elaboraram-se gráficos individuais para E – a energia de campo médio – e $\langle \hat{\mathbf{L}} \rangle^2 = \sum_\mu \langle L_\mu \rangle^2$, $\langle \hat{\mathbf{n}} \rangle^2 = \sum_\mu \langle \hat{n}_\mu \rangle^2$ e $\langle \hat{\mathbf{L}} \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{n}} \rangle = \sum_\mu \langle n_\mu \rangle \langle L_\mu \rangle$, respectivamente. Observou-se a ocorrência de transições de fase em concordância com os resultados da Figura 1.2, reproduzida

da referência [3]. Entretanto, deve-se frisar que essa concordância foi conseguida tão-somente quando se atribuiu à constante α – Eqs. (1.79) e (1.80) – o valor 1 ($\alpha = 1$), enquanto que $\alpha = 1/2$ é atribuição que consta como efetivamente usada na obtenção dos resultados referidos da referência [3].

As transições de fase são visualizadas através da análise do comportamento das funções (dos acoplamentos) estudadas ao se cruzar *linhas de transição de fases*. Em um ponto sobre uma curva transição, todas essas funções apresentam algum tipo de *não-analiticidade*. No caso de $\langle \hat{L} \rangle^2$ e $\langle \hat{n} \rangle^2$, aqui expressas como funções do acoplamento J ou do acoplamento K , conforme o caso tratado, estas exibem *descontinuidade* ao se cruzar uma linha de coexistência de primeira ordem; nas transições de segunda ordem, entretanto, a passagem se dá de forma *contínua*, ao se passar por uma linha de transição. Por outro lado, para a energia de campo médio (energia do estado fundamental do sistema), que é sempre uma função contínua dos acoplamentos, deve-se verificar a não analiticidade pesquisando-se as derivadas de ordem primeira – descontínuas *nas transições de primeira ordem* – e não havendo descontinuidade nesta ordem, derivadas de ordem superior devem apresentar não analiticidade *nas transições de segunda ordem*.

Desta forma, verificam-se, por exemplo, transições de primeira ordem nas Figuras 1.4 e 1.7; transições de segunda ordem nas Figuras 1.3, 1.5 e 1.6: e ambas transições nas Figuras 1.4, 1.7, 1.8, 1.9 e 1.10. O produto $\langle \hat{L} \rangle \cdot \langle \hat{n} \rangle$ foi incluído para dar uma idéia da orientação relativa dos operadores $\hat{n}$ e $\hat{L}$, para auxiliar na caracterização da transição, bem como examinar o comportamento de $\langle \hat{n} \rangle$ nas regiões onde assume valores próximos de zero.

Flutuações ocorridas durante a execução do programa de minimização das funções devem ser responsáveis pela dispersão de alguns pontos nos gráficos.

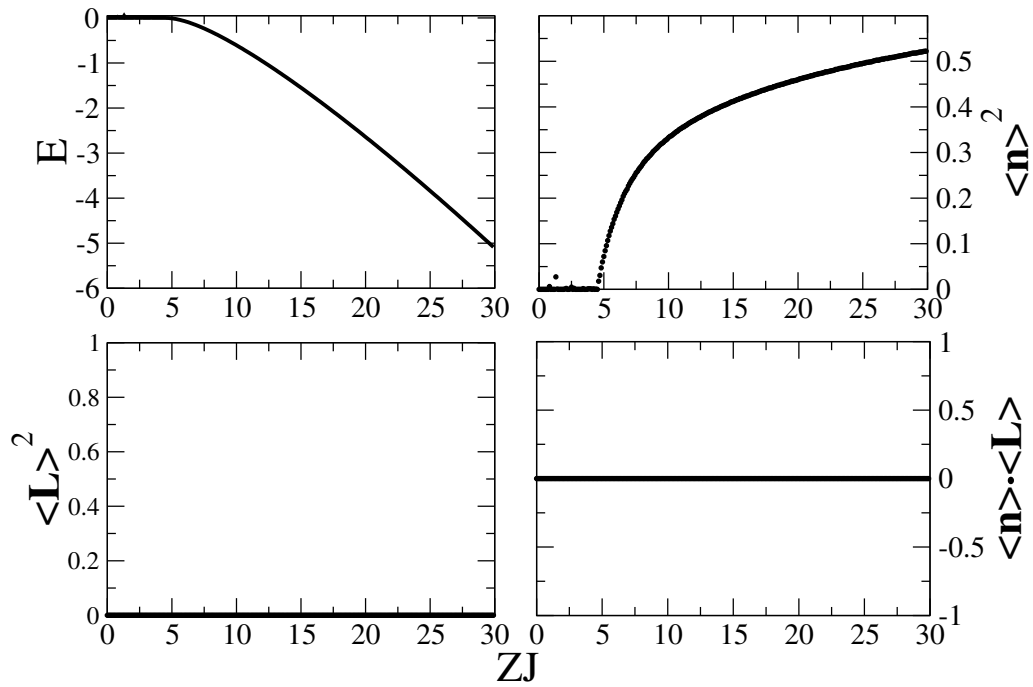


Figura 1.3: Energia, Momento Angular e Posição em função dos Acoplamentos: ZK fixo em 2,5 versus ZJ variando de 0 a 30. Transição de segunda ordem em $ZJ \approx 5$ (GP-N).

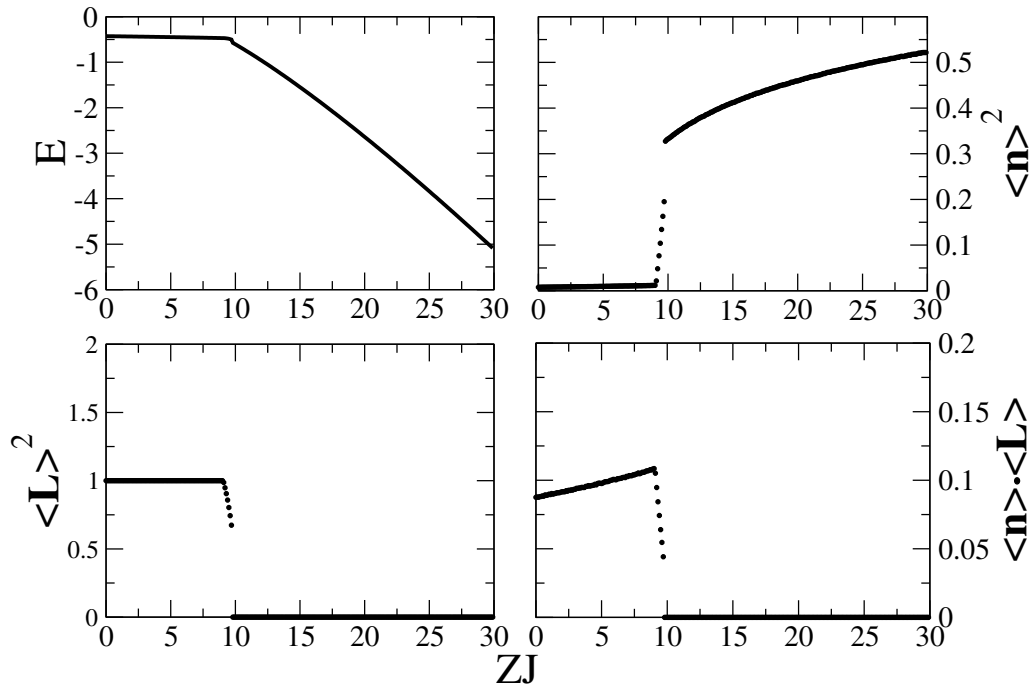


Figura 1.4: Energia, Momento Angular e Posição em função dos Acoplamentos: ZK fixo em 6,5 versus ZJ variando de 0 a 30. Transição de segunda ordem em $ZJ \approx 9$ (QF_1 -C) e uma transição de primeira ordem em $ZJ \approx 10$ (C-N). A curva da energia necessitaria maior refino, isto é, a interpolação de mais pontos na região das transições, para se enxergar essas transições mais claramente, tendo em vista a pequena separação dos pontos onde ocorrem.

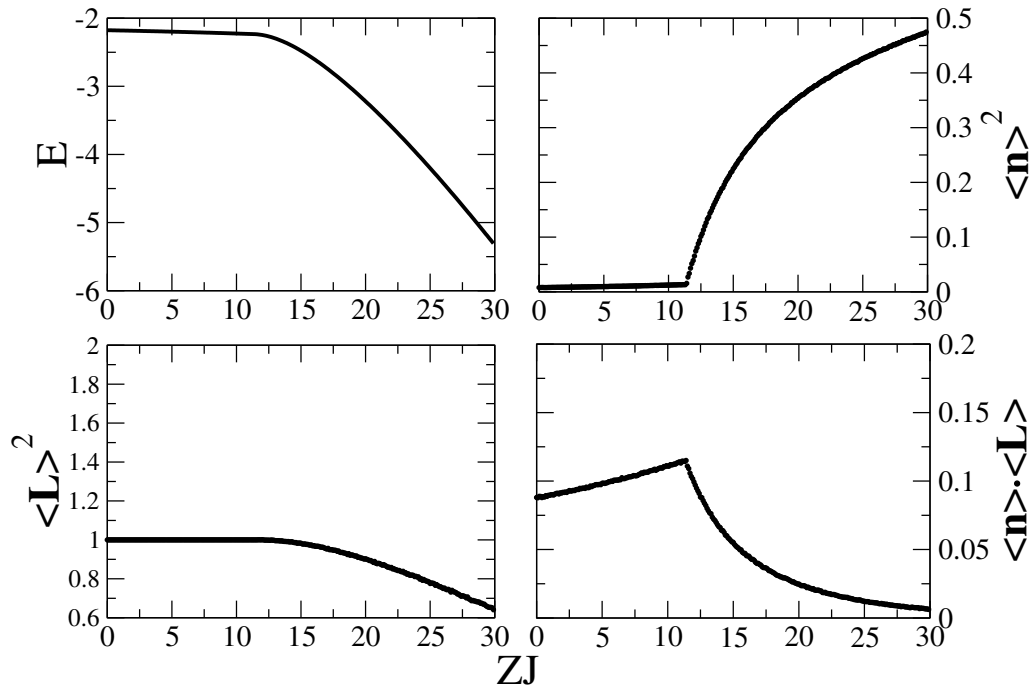


Figura 1.5: Energia, Momento Angular e Posição em função dos Acoplamentos: ZK fixo em 10 versus ZJ variando de 0 a 30. Transição de segunda ordem em $ZJ \approx 12$ (QF_1 -C). Nesta figura e na próxima, a visualização das transições é facilitada pelo exame de $\langle \hat{n} \rangle^2$. Observe-se que nas fases de ferromagnetos quantizados tem-se $\langle \hat{n} \rangle = n_z$ e $\langle \hat{n} \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{L}} \rangle = L_z n_z$.

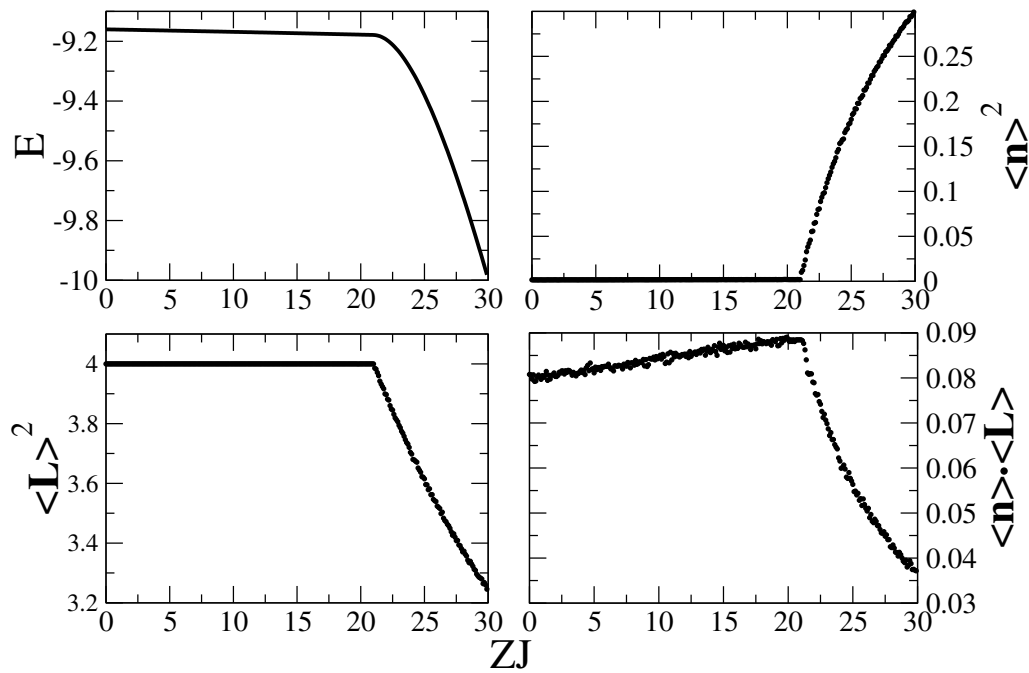


Figura 1.6: Energia, Momento Angular e Posição em função dos Acoplamentos: ZK fixo em 15 versus ZJ variando de 0 a 30. Transição de segunda ordem em $ZJ \approx 21$ (QF_2 -C).

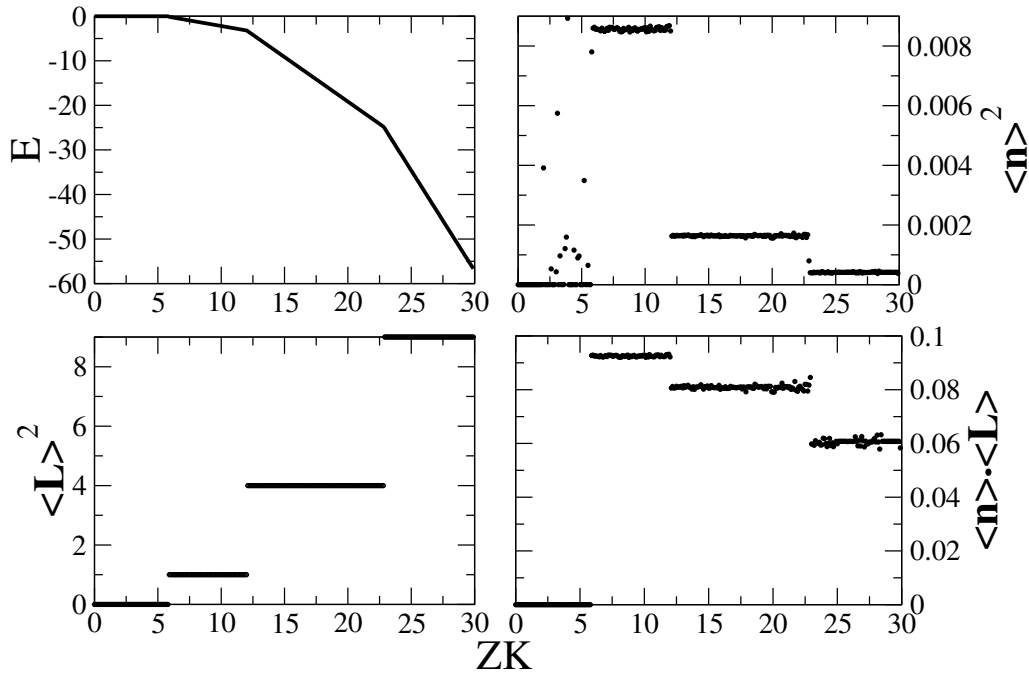


Figura 1.7: Energia, Momento Angular e Posição em função dos Acoplamentos: ZJ fixo em 2,5 versus ZK variando de 0 a 30. Transição de primeira ordem em $ZK \approx 5,5$ ($GP-QF_1$), em $ZK \approx 12$ ($QF_1 - QF_2$) e em $ZK \approx 22,5$ ($QF_2 - QF_3$), a assim indefinidamente, à medida de que ZK cresce, devem-se suceder novas fases ferromagnéticas quantizadas.

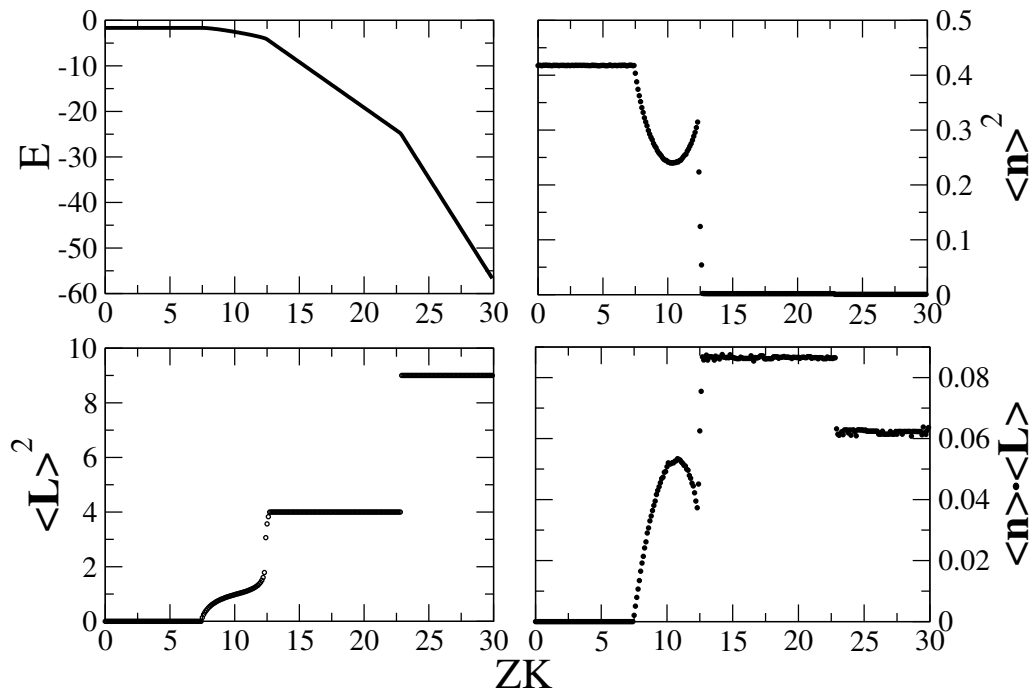


Figura 1.8: Energia, Momento Angular e Posição em função dos Acoplamentos: ZJ fixo em 15,5 versus ZK variando de 0 a 30. Transição de segunda ordem em $ZK \approx 7,5$ (N-C), seguida de uma transição de primeira ordem em $ZK \approx 12,5$ (C- QF_2) e outra de primeira ordem em $ZK \approx 22,5$ ($QF_2 - QF_3$). Na Figura 1.1, reproduzida de [3], a transição em $ZK \approx 7,5$ (N-C) consta como de primeira ordem.

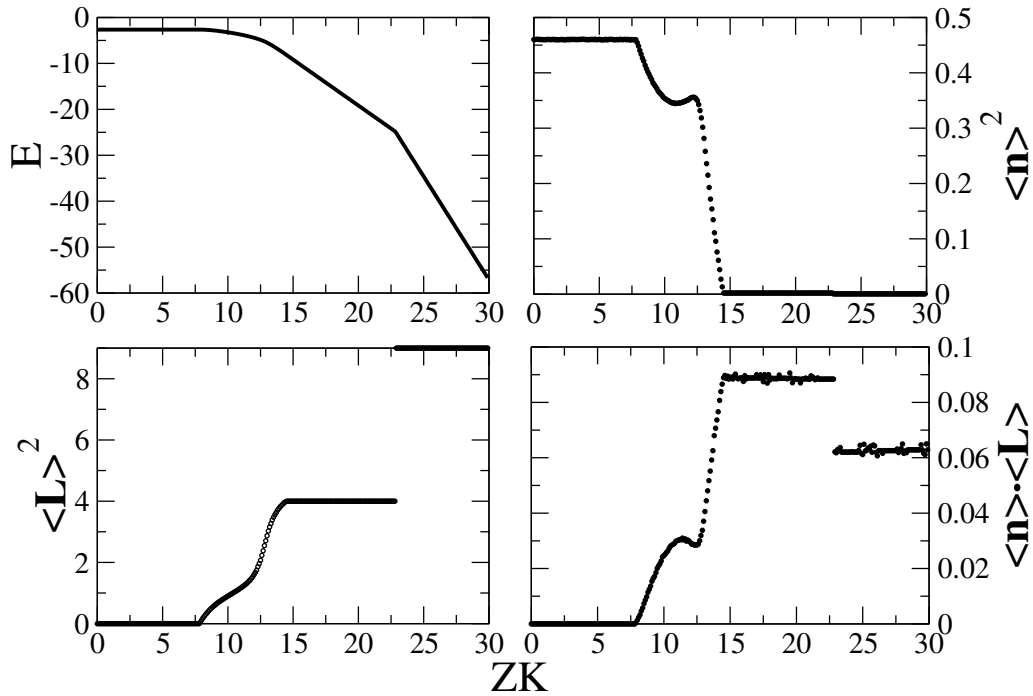


Figura 1.9: Energia, Momento Angular e Posição em função dos Acoplamentos: ZJ fixo em 20 versus ZK variando de 0 a 30. Transição de segunda ordem em $ZK \approx 7,6$ (N-C), transição de primeira ordem em $ZK \approx 13$ (C-C) (clarificada pelo exame de $\langle \hat{n} \rangle^2$), transição de segunda ordem em $ZK \approx 14,5$ (C- QF_2) e transição de primeira ordem em $ZK \approx 22,5$ ($QF_2 - QF_3$).

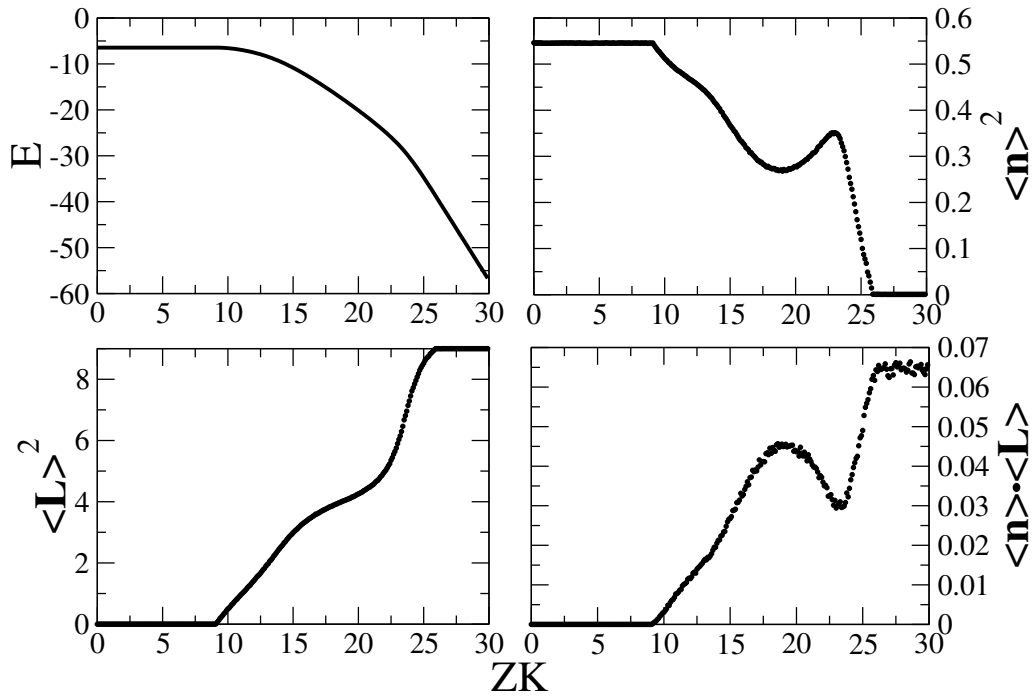


Figura 1.10: Energia, Momento Angular e Posição em função dos Acoplamentos: ZJ fixo em 35 versus ZK variando de 0 a 30. Transição de segunda ordem em $ZK \approx 8,5$ (N-C), transição de primeira ordem em $ZK \approx 23$ (C-C) (também caracterizada pelo exame de $\langle \hat{n} \rangle^2$) e transição de segunda ordem em $ZK \approx 26$ (C- QF_3).

Comportamento das Funções

O exame das Figuras 1.2 a 1.9 acima permite a anotação de alguns fatos (e ilações) relevantes sobre o comportamento das funções ali retratadas. Não se busca explicação para as propriedades observadas, aqui vistas como aspectos intrínsecos de $\hat{H}_R$, que o seu diagrama de fase evidencia. Dá-se ênfase, na medida do possível, a uma visão interpretativa.

Energia

A energia se apresenta sempre como uma função dos parâmetros do modelo, contínua por partes, côncava, decrescente, onde os cúspides indicam a ocorrência de transições de primeira ordem (Figuras 1.3, 1.6, 1.7, 1.8 e 1.9). Se só houver transições de segunda ordem, a curva será simplesmente contínua (Figuras 1.2, 1.4 e 1.5). Sempre que se incrementa um dado acoplamento, o sistema se acomoda em um tipo de ordenamento, de menor energia.

Observáveis $\hat{L}$ e $\hat{n}$

- Fases Ferromagnéticas Quantizadas e Paramagnética Quântica

Nestas fases, verifica-se para M fixo, as relações funcionais:

$$\langle \hat{L}_z \rangle (J, K, M) = l; \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (1.92)$$

e

$$\langle \hat{L}_{x,y} \rangle (J, K, M) = \langle \hat{n}_{x,y} \rangle (J, K, M) = 0. \quad (1.93)$$

Quando $M = 0$, isto é, quando há simetria $\mathcal{P}$, constata-se que nestas fases

$\langle \hat{n}_z \rangle = 0$ [3], como, aliás, sugere o mapeamento da dupla camada, conforme Eq. (1.21).

O exame dos gráficos das Figuras 1.2 a 1.9 revela, entretanto, que para $M \neq 0$ tem-se em geral $\langle \hat{n}_z \rangle \neq 0$. Mais especificamente, pode-se estabelecer a seguinte relação funcional para $\langle \hat{n}_z \rangle = \langle \hat{n}_z \rangle (J, K, M; L_z)$, com M fixo:

1. $\langle \hat{n}_z \rangle = 0$, na fase paramagnética quântica;
2. $\langle \hat{n}_z \rangle$ é independente de K , para valores quantizados de $\langle \hat{L}_z \rangle$;
3. $\langle \hat{n}_z \rangle$ varia linearmente com J , para valores quantizados de $\langle \hat{L}_z \rangle$;
4. $\langle \hat{n}_z \rangle$ apresenta *plateaux*, como função decrescente de L_z e K , para J fixo.

Interpretando-se $\langle \hat{n}_z \rangle$ como indicador da maneira como o momento quantizado é distribuído entre os spins subjacentes representados pelo rotor (Subseção 1.6.3 e referência [3]), então o item (3) está relacionado com a *orientação relativa* dos spins, no sentido de que os spins tendem a se arrumar antiferromagneticamente à medida que $\langle \hat{n}_z \rangle$ cresce, até um valor compatível com o valor quantizado L_z , após o que ocorre a transição de fase (geralmente para a fase *canted* e de segunda ordem) em que o momento total do conjunto de spins subjacentes decai. O item (4) está relacionado com a *inversão brusca* de um único spin, isto é, quando $\langle \hat{n}_z \rangle$ *cai* para seu próximo valor, um spin inverte o seu momento. Ocorre então uma transição típica de primeira ordem.

Como $\langle \hat{n}_z \rangle = 0$ quando $M = 0$ nestas fases, esta interpretação sugere que a transição de fase *QF_I-canted* devam ser de primeira ordem. Verificou-se isto em algumas simulações.

- Fase Ordenada Néel

Tem-se sempre $\langle \hat{L}_{x,y,z} \rangle (J, K, M) = 0$.

O exame das Figuras 1.2, 1.3, 1.8 e 1.9 revela que $\langle \hat{n} \rangle$ é uma função de J e K (M fixo), com as seguintes características:

1. para K fixo, $(\langle \hat{n} \rangle (J))^2$ é uma função contínua, côncava, crescente;
2. independente de K .

Vê-se, neste caso, $(\langle \hat{n} \rangle)^2$ atuando como um *parâmetro de ordem* do tipo Néel, como mais uma vez sugere o mapeamento de dupla camada. À medida que se desloca para a direita no diagrama, acentua-se evidentemente o *ordenamento spin para cima-spin para baixo* paralelamente a um eixo arbitrário no espaço de spin, devendo ser atingido o saturamento no limite $J \rightarrow \infty$, situação que deve corresponder a $((\langle \hat{n} \rangle)_{\text{máx}}^2 \leq 1)$.

- Fase *Canted*

Analisando-se as Figuras 1.4 e 1.5, verifica-se que $(\langle \hat{\mathbf{L}} \rangle)^2$ é uma função contínua rapidamente decrescente (esta fase é caracterizada por magnetismo fraco), devendo ocorrer $(\langle \hat{\mathbf{L}} \rangle)^2 = 0$, para J suficientemente grande, isto é, à medida que se afasta das fases ferromagnéticas, os spins subjacentes tendem, de forma contínua a se arrumar *antiparalelamente*. A curva de $(\langle \hat{n} \rangle)^2$, agora dependente tanto de J como de K , apresenta semelhança com àquela da fase Néel. Portanto, quando se caminha dentro da fase *Canted*, ao longo de uma reta $ZK = \text{constante}$, verifica-se a tendência ao ordenamento Néel.

Por outro lado, os gráficos das Figuras 1.8 e 1.9, mostram a função $(\langle \hat{\mathbf{L}} \rangle)^2$ contínua, crescente, ligando o nível $(\langle \hat{\mathbf{L}} \rangle)^2 = L_z^2 = 0$ ao nível

$\langle \hat{\mathbf{L}} \rangle^2 = L_z^2 = l^2 = 9$ (máximo), isto é, quando se caminha dentro da fase *canted*, ao longo de uma reta $ZJ = \text{constante}$, verifica-se a tendência ao arranjo *paralelo* dos spins, segundo uma orientação determinada no espaço de spins (ferromagnetismo). O comportamento de $\langle \hat{\mathbf{n}} \rangle^2$ exibido nos gráficos mostra um padrão característico: desorganização inicial da fase Néel (ramo decrescente) seguida de uma reorganização (ramo crescente, mais curto) para então ocorrer o *salto* (transição geralmente de primeira ordem) para o ferromagneto quantizado seguinte ou fase *canted* com magnetização mais elevada.

A consideração das propriedades aqui descritas e a expressão formal do hamiltoniano do sistema $\hat{H}_R$, Eq. (1.78), permitem, pelo simples exame, a visualização do comportamento da curva da energia do sistema. Por exemplo, percebe-se porque a energia é uma função linear de K , nas fases ferromagnéticas quantizadas, com coeficiente angular negativo; entretanto, isso não deve ocorrer com J , onde se espera um decrescimento não-linear.

1.7.4 Teoria de Campo Médio para o Hamiltoniano H_R – Rotores com $q = 1/2$

A análise é efetuada de forma análoga ao caso $q = 0$. Na referência [3], descrevem-se os procedimentos para cálculo do diagrama de fases de uma rede *hipercúbica* de rotores com $q = 1/2$. Fez-se, entretanto, uso de redes bipartidas, onde os elementos de matriz de $\hat{\mathbf{n}}$ são multiplicados por um fator ϵ_i , com $\epsilon_i = 1$ na primeira sub-rede e $\epsilon_i = -1$, na segunda. Para acomodar as duas sub-redes, a Eq. (1.33) é modificada para

$$\hat{L}_{i\mu} = -\epsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{n}_{i\nu} \left[i \frac{\partial}{\partial \hat{n}_\lambda} + q \epsilon_i A_\lambda(\hat{n}_{i\mu}) \right] - q \epsilon_i \hat{n}_{i\mu}. \quad (1.94)$$

onde o ϵ_i introduzido visa à correção da fórmula para o momento angular. Com a inversão alternada (*staggering*) do operador $\hat{n}$, pretende-se um parâmetro de ordem do tipo Néel, com momento resultante nulo: um valor espacialmente uniforme de $\langle \hat{n}_\mu \rangle$ representa um valor médio alternado (*staggered*) de $\langle \hat{L}_\mu \rangle$. Num modelo com $q > 0$ e $\epsilon_i = 1$ em cada sítio, a média espacial de $\langle \hat{n}_\mu \rangle$ é proporcional àquela de $\hat{L}_\mu$, conseqüentemente ao momento ferromagnético líquido, o que faz que esses modelos só exibam fases ferromagnéticas quantizadas.

Uma conseqüência importante para um $q \neq 0$ é que não é mais possível ter $\mathcal{P}$ como uma simetria do modelo de rotor quântico: há uma parte em $\hat{L}_\mu$ na Eq. (1.91) ou Eq. (1.33) que é proporcional a $\langle \hat{n}_\mu \rangle$ e isto faz com que ambos os operadores possuam a mesma *assinatura* sob transformações discretas. Portanto, a simetria $\mathcal{P}$ é descartada, mesmo com modelos onde $M = 0$.

Na teoria de campo médio, usam-se agora dois hamiltonianos-tentativa ($\hat{H}_{mf}$) por sítio diferentes, desacoplados, correspondentes às duas sub-redes. Trabalha-se, então, com um espaço de Hilbert formado pelo produto tensorial das duas autofunções dos $\hat{H}_{mf}$ dos respectivos sítios de cada sub-rede. O diagrama de fases resultante conforme a Figura 2 da referência [3] é muito semelhante ao caso anterior (Figura 1.2), a principal diferença estando na ausência da fase de paramagnetismo quântico, o que está claramente relacionado com o valor mínimo do momento angular do rotor ($q = 1/2$).

Capítulo 2

MAPEAMENTOS DO MODELO DE ROTORES QUÂNTICOS NA CADEIA DE SPINS AB_2

2.1 Introdução

Neste capítulo serão estudados alguns mapeamentos entre rotores quânticos e as cadeias de spins AB_2 , cuja topologia é de interesse no contexto de polímeros ferrimagnéticos e oxocupratos [15]. Estas cadeias tem sido estudadas no contexto de modelos tais como Hubbard e t -J [16], Heisenberg quântico [17, 18], Heisenberg clássico e Ising [19].

O teorema de Lieb [20] considera o modelo de Hubbard [21] numa *rede bipartida* com N_A o número de sítios da sub-rede A e N_B o número de sítios da sub-rede B. Assumindo-se interação coulombiana repulsiva ($U > 0$, finito), tem-se em semi-preenchimento eletrônico (um elétron em média por sítio) que o estado fundamental

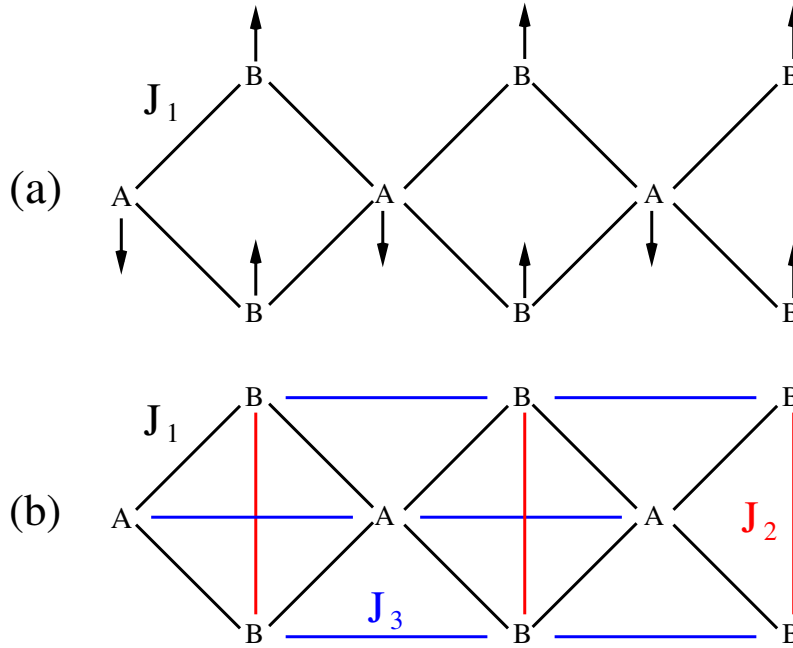


Figura 2.1: (a) Cadeia de spin com a topologia de célula unitária AB_2 exibindo o estado fundamental ferrimagnético em campo magnético nulo. (b) A mesma cadeia, onde se ilustram as frustrações que serão consideradas: (i) frustração BB ($J_3 \equiv 0$, $J_2 \geq 0$), neste trabalho também denominada *frustração intracelular* e (ii) frustração AA-BB ($J_2, J_3 \geq 0$), neste trabalho também denominada *frustração intracelular e intercelular*. Nas sub-seções 2.3 e 2.4, serão estudadas cadeias de rotores, em que cada sítio está ocupado por um único rotor com $q = 1/2$.

é único e possui spin total por célula dado por $S = (|N_A - N_B|)/2$, a menos da degenerescência trivial $(2S+1)$ em S^Z . A Figura 2.1(a) é um esboço de um fragmento da cadeia AB_2 onde o estado fundamental está ilustrado, com as setas indicando a orientação dos spins: aqui os sítios A e B compõem as duas sub-redes distintas de sorte que a aplicação direta deste teorema conduz à configuração mostrada, de ferrimagnetismo, onde o spin por célula é $1/2$ ou $S = N/6$, N representando o número total de sítios da cadeia.

O efeito da frustração entre os sítios B tem sido investigado com certo detalhe, inclusive propriedades do estado fundamental [22, 23], propriedades termodinâmicas [24] bem como efeitos de campos magnéticos [25]. Revestem-se de particular interesse os trabalhos sobre o estado fundamental [22], os quais serão de certa forma utilizados aqui para comparação com resultados obtidos para a frustração BB (intracelular) mostrada na figura 2.1(b).

2.2 Mapeamento de Modelos de Rotores Quânticos em Cadeias Quânticas AB₂ de Heisenberg

Este mapeamento representou uma tentativa do estabelecimento de uma conexão entre o modelo de rotores quânticos e as cadeias de Heisenberg AB₂ com acoplamentos antiferromagnéticos, visando a obtenção de relações diretas entre os acoplamentos dos dois modelos [18]. Sua motivação está calcada no mapeamento do modelo de rotores quânticos para antiferromagnetos de dupla camada proposto por Sachdev e Senthil [3] e também descrito na seção 1.2.

Inicialmente considera-se o hamiltoniano de rotores quânticos $\{\hat{\mathbf{n}}_i\}$ em uma cadeia consistente com a conservação dos operadores de momento angular $\{\hat{\mathbf{L}}_i\}$

associados [18]:

$$H_{qr} = \sum_{i=1}^{N/3} (\alpha_1 \hat{\mathbf{L}}_i^2 + \alpha_2 \hat{\mathbf{n}}_i^2 + \alpha_3 \hat{\mathbf{L}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_i) + \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathcal{J} \hat{\mathbf{n}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_j + \mathcal{K} \hat{\mathbf{L}}_i \cdot \hat{\mathbf{L}}_j + \mathcal{M} \hat{\mathbf{n}}_i \cdot \hat{\mathbf{L}}_j + \mathcal{M} \hat{\mathbf{n}}_j \cdot \hat{\mathbf{L}}_i). \quad (2.1)$$

Visualizou-se a célula unitária da cadeia AB₂ representada por um rotor quântico através do seguinte mapa:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}_i &= \hat{\mathbf{S}}_{iA} + \hat{\mathbf{S}}_{iB} + \hat{\mathbf{S}}_{iB'}, \\ \hat{\mathbf{n}}_i &= \hat{\mathbf{S}}_{iA} - \hat{\mathbf{S}}_{iB} - \hat{\mathbf{S}}_{iB'}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

onde os $\hat{\mathbf{S}}_{in}$, n=A, B e B', indicam os operadores de spin ($S = 1/2$) atuantes nos respectivos sítios da iésima célula da cadeia de spins AB₂. Obtêm-se as relações entre os acoplamentos dos dois modelos de forma análoga àquela descrita na seção 1.2. Portanto:

$$\begin{aligned} \mathcal{J} &= \frac{J_{AA} + J_{BB} - 2J_{AB}}{4}, \\ \mathcal{K} &= \frac{J_{AA} + J_{BB} + 2J_{AB}}{4}, \\ \mathcal{M} &= \frac{J_{AA} - J_{BB}}{4}, \\ \alpha_1 &= \frac{J_{AB} + J_{BB'}}{4}, \\ \alpha_2 &= \frac{-J_{AB} + J_{BB'}}{4}, \end{aligned} \quad (2.3)$$

onde se fez $\alpha_3 = 0$. Os acoplamentos $J_{ij} \geq 0$, $i, j = A, B, B'$, representam interações entre primeiros e segundos vizinhos e referem-se ao hamiltoniano de Heisenberg da

cadeia AB₂ escrito explicitamente na forma abaixo, com o intuito de tornar clara a notação utilizada para esses acoplamentos:

$$\begin{aligned}
 H_H = \sum_{l=1}^{N/3} \{ & J_{AB}(\hat{\mathbf{S}}_{lA} + \hat{\mathbf{S}}_{l+1,A}) \cdot (\hat{\mathbf{S}}_{lB} + \hat{\mathbf{S}}_{lB'}) + \\
 & J_{BB'}(\hat{\mathbf{S}}_{lB} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{lB'}) + j_{AA}(\hat{\mathbf{S}}_{lA} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{l+1,A} + \\
 & J_{BB}(\hat{\mathbf{S}}_{lB} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{l+1,B} + \hat{\mathbf{S}}_{lB'} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{l+1,B'}) \}. \quad (2.4)
 \end{aligned}$$

No caso particular da cadeia frustrada esboçada na Figura 2.1(b), tornam-se evidentes as correspondências: $J_{AB} = J_1$, $J_{BB'} = J_2$ e $J_{AA} = J_{BB} = J_3$. Pode-se adotar J_{AB} como unidade de energia, isto é, $J_{AB} = J_1 = 1$.

O tratamento de campo médio segue-se com o emprego do hamiltoniano-tentativa (os subscritos repetidos μ indicam soma sobre componentes)

$$\hat{H}_{mf} = \alpha_1 \hat{L}_\mu^2 + \alpha_2 \hat{n}_\mu^2 + \beta (\hat{L}_\mu^2)^2 + N_\mu \hat{n}_\mu + h_\mu \hat{L}_\mu, \quad (2.5)$$

resultando, via teorema variacional de Bogoliubov, a expressão para a energia de campo médio abaixo, análoga à Eq.(1.82):

$$\begin{aligned}
 E_{mf} \leq E_0 + J <\hat{n}_\mu>_0^2 + K <\hat{L}_\mu>_0^2 + \\
 M <\hat{n}_\mu>_0 <\hat{L}_\mu>_0 - N_\mu <\hat{n}_\mu>_0 - h_\mu <\hat{L}_\mu>_0, \quad (2.6)
 \end{aligned}$$

onde o número de coordenação da cadeia linear do rotor foi levado em consideração ($Z = 2$). Aqui os rotores têm $q = 1/2$, correspondente ao momento angular mínimo da célula unitária.

Seguem resultados obtidos para as frustrações descritas na Figura 2.1(b):

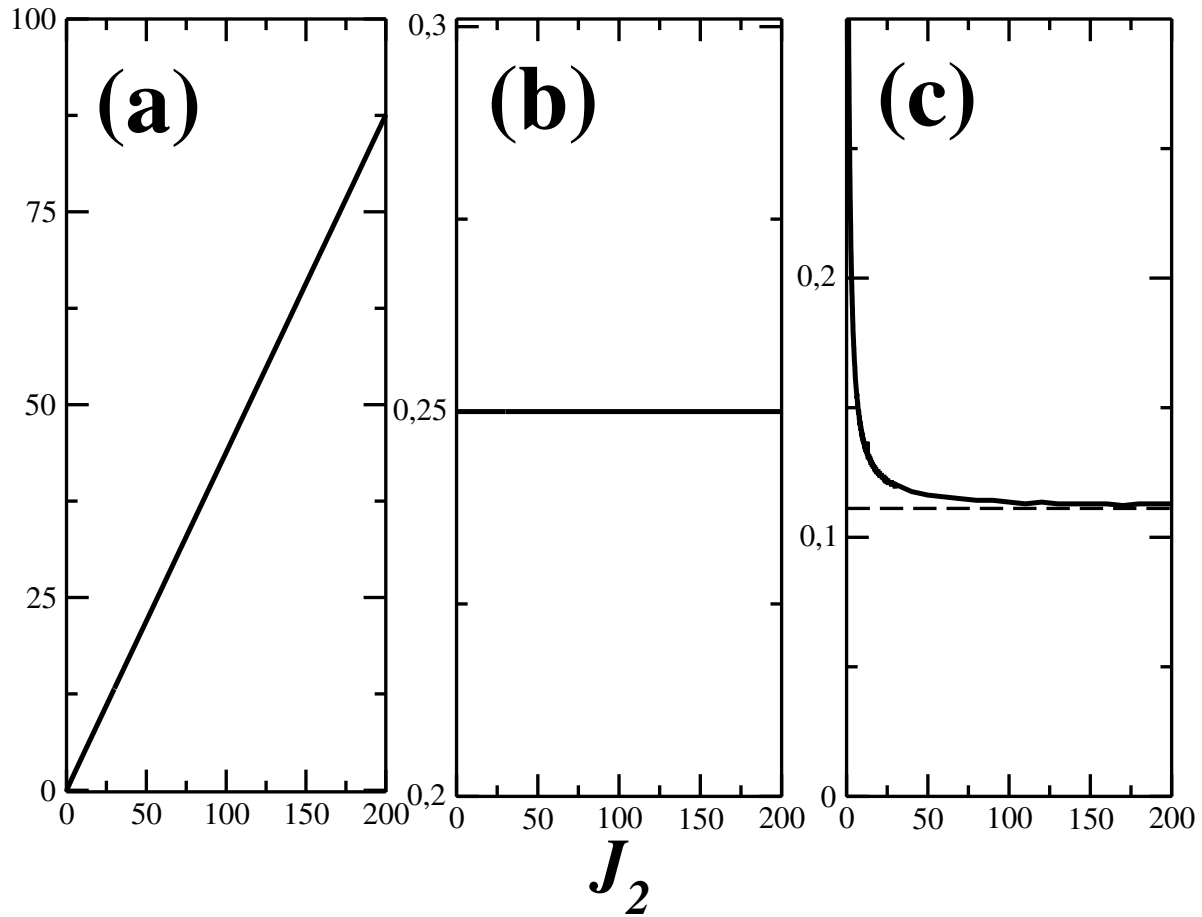


Figura 2.2: Mapeamento Rotor Quântico $\times$ Cadeia AB₂. Energia, Momento e Posição em Função da Frustração: Frustração BB (intracelular). (a) Energia. (b) $\hat{L}^2 = \langle \hat{L} \rangle \cdot \langle \hat{L} \rangle$. (c) $\hat{n}^2 = \langle \hat{n} \rangle \cdot \langle \hat{n} \rangle$. O sistema evolui de uma fase ferrimagnética, que não fica caracterizada como de Lieb, para uma configuração *canted*. Observe que neste caso $J_3 \equiv 0$.

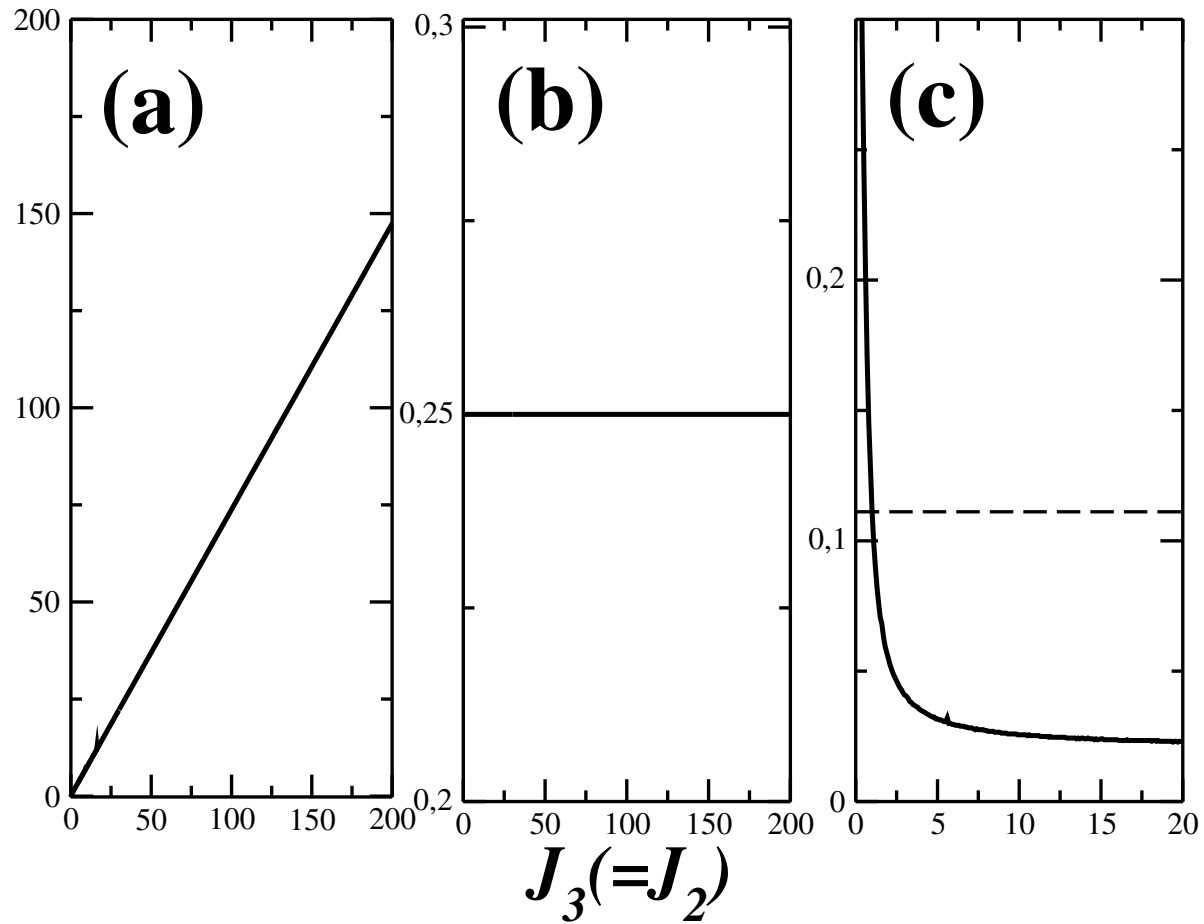


Figura 2.3: Mapeamento Rotor Quântico $\times$ Cadeia AB₂. Energia, Momento e Posição em Função da Frustração: Frustração AA-BB (intra- e intercelular). (a) Energia. (b) $\hat{L}^2 = \langle \hat{L} \rangle \cdot \langle \hat{L} \rangle$. (c) $\hat{n}^2 = \langle \hat{n} \rangle \cdot \langle \hat{n} \rangle$. O sistema evolui de uma fase ferrimagnética, que não fica caracterizada como de Lieb, para uma configuração *canted* mais acentuada. Estudou-se o caso em que todas as frustrações são iguais.

Como se observa na Figura 2.2, há transição de fase de uma configuração ferromagnética para uma fase *canted*, quando se varia o acoplamento $J_{BB'}$ (J_2). Quando este parâmetro é variado, somente os termos α_1 e α_2 do hamiltoniano, dado pela Eq. (2.1), são afetados, crescendo linearmente, conforme Eq. (2.3). α_2 multiplica um valor fixo, isto é, $\hat{n}_i^2 = 1$, conforme Eq. (1.1), e poderia ser eliminado da formulação hamiltoniana (α_3 poderia ter sido desconsiderado pelo mesmo motivo: tem-se $\hat{n} \cdot \hat{L} = -q = -1/2$). De qualquer forma, quando a frustração cresce, α_1 , que é um fator que multiplica a energia cinética do rotor cresce igualmente, induzindo o rotor a permanecer sempre com o momento angular mínimo ($l = 1/2$), como seria desejável, mas não há alteração na interação intersítio. Observa-se que $\langle \hat{n} \rangle^2$ cai, tendendo a minimizar a energia, fato que pelo mapa, Eq. (2.3), poderia ser interpretado como equivalente a uma evolução da cadeia para uma fase *canted*. A fase inicial não pode ser vista como tendo uma configuração caracterizada pelo teorema de Lieb [20], porque mais de um arranjo dos spins da cadeia pode ser encontrado, em concordância com os resultados obtidos (haveria necessidade de mais uma relação no mapa da Eq.(2.3)). Na Figura 2.3, apesar de interações entre sítios (a energia cinética também aumenta concomitantemente), o sistema tem um comportamento semelhante, com a diferença apenas que a evolução para um estado *canted* é mais acentuada. Por outro lado, considerando-se α_2 como uma variável supérflua, fazendo-a igual a zero, resulta $J_{AB} = J_{BB'}$, o que aparenta ser um resultado *não físico* para o problema em lide. Aliás, mesmo com $\alpha_2 \neq 0$, outras igualdades não físicas de acoplamentos ocorrem entre primeiros e terceiros vizinhos como também entre segundos e terceiros. Levando-se estas modificações no hamiltoniano, Eq. (2.1),

resulta

$$H_{qr} = \sum_{i=1}^{N/3} \alpha_1 \hat{\mathbf{L}}_i^2 + \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathcal{J} \hat{\mathbf{n}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_j + \mathcal{K} \hat{\mathbf{L}}_i \cdot \hat{\mathbf{L}}_j + \mathcal{M} \hat{\mathbf{n}}_i \cdot \hat{\mathbf{L}}_j + \mathcal{M} \hat{\mathbf{n}}_j \cdot \hat{\mathbf{L}}_i). \quad (2.7)$$

Isto é, tem-se, na realidade, a cadeia AB₂ associada à uma rede hipercúbica de rotores quânticos (a unidimensionalidade é apenas uma particularidade). Segundo a interpretação dessas dos rotores sugerida na seção 1.6, portanto, o problema se reduz a uma rede onde cada sítio subentende um aglomerado qualquer de três spins. Esse aglomerado não contém nenhuma informação sobre a topologia da cadeia, fator quintessencial na determinação de suas propriedades. O mapa, Eq. (2.3), não carrega essa informação. Conclui-se, portanto, que os gráficos da Figura 2.2 e 2.3 devem retratar talvez mais as propriedades dessa rede de rotores, do que as da cadeia AB₂, propriamente ditas. Em particular, o gráfico da Figura 2.3 não deve trazer nada de novo sobre a frustração AA–BB descrita na Figura 2.1(b).

Incidentalmente, para o caso dos antiferromagnetos de dupla camada, por sua simplicidade (apenas dois spins), o mapa dado pelas Eqs. (1.19–1.20) não resultou em relações *indesejáveis* do tipo daquelas relatadas acima entre os acoplamentos quando se usaram a Eq. (2.3).

Esta abordagem, entretanto, foi útil porque iluminou o entendimento de problemas inerentes aos mapas que buscam a obtenção de relações simples, do tipo da Eq. (2.3), entre os acoplamentos dos modelos. Alternativas são apreenhadas adiante, baseadas no que preconiza a Seção 1.6, isto é, a relação direta rotor quântico–sítio da cadeia AB₂ de spins.

2.3 Rotores Quânticos na Cadeia AB₂ com Interações Competitivas - Célula Simples – Tratamento Isolado

Incorpora-se a idéia preconizada na Seção 1.6, estabelecendo-se uma relação direta rotor quântico-sítio da cadeia AB₂, ou melhor, estuda-se uma cadeia de rotores quânticos com a topologia da cadeia AB₂, em que os sítios A, B e B' são ocupados respectivamente por um único rotor com $q = 1/2$ (simulando o semipreenchimento eletrônico), interagindo entre si, cujos acoplamentos I_{ij} , $I = J, K, M$, emulam os acoplamentos J_{ij} do modelo de Heisenberg cujo hamiltoniano é fornecido pela Eq. (2.4).

2.3.1 O Hamiltoniano de Rotores Quânticos na Cadeia AB₂

Escrevem-se os seguintes hamiltonianos, em que os índices i e j percorrem os sítios A, B e B' da célula unitária indexada por l . Convencionou-se, para a leitura do hamiltoniano, $A < B < B'$. Siga a figura 2.1(b).

$$\hat{H}_{qr}^{(1)} = \frac{g}{2} \sum_{l,i} [\hat{\mathbf{L}}_{li}^2 + \alpha (\hat{\mathbf{L}}_{li}^2)^2], \quad (2.8)$$

$$\hat{H}_{qr}^{(2)} = \sum_{l,i < j} [J_{ij} \hat{\mathbf{n}}_{li} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{lj} + K_{ij} \hat{\mathbf{L}}_{li} \cdot \hat{\mathbf{L}}_{lj} + M_{ij} (\hat{\mathbf{n}}_{li} \cdot \hat{\mathbf{L}}_{lj} + \hat{\mathbf{n}}_{lj} \cdot \hat{\mathbf{L}}_{li})], \quad (2.9)$$

$$\hat{H}_{qr}^{(3)} = \sum_{l,i > j, j=A} [J_{ij} \hat{\mathbf{n}}_{li} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{l+1,j} + K_{ij} \hat{\mathbf{L}}_{ji} \cdot \hat{\mathbf{L}}_{l+1,j} + M_{ij} (\hat{\mathbf{n}}_{li} \cdot \hat{\mathbf{L}}_{l+1,j} + \hat{\mathbf{n}}_{l+1,j} \cdot \hat{\mathbf{L}}_{li})], \quad (2.10)$$

$$\hat{H}_{qr}^{(4)} = \sum_{l,i} [J_{ii} \hat{\mathbf{n}}_{li} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{l+1,i} + K_{ii} \hat{\mathbf{L}}_{li} \cdot \hat{\mathbf{L}}_{l+1,i} + M_{ii} (\hat{\mathbf{n}}_{li} \cdot \hat{\mathbf{L}}_{l+1,i} + \hat{\mathbf{n}}_{li} \cdot \hat{\mathbf{L}}_{l+1,i})], \quad (2.11)$$

onde se adotou a notação vetorial de operador, isto é, $\hat{\mathbf{L}} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ e semelhantemente para $\hat{\mathbf{n}}$. É evidente que $\hat{H}_{qr}^{(1)}$ expressa a energia cinética da cadeia de rotores; $\hat{H}_{qr}^{(2)}$, as ligações (acoplamento de primeiro vizinho A–B e A–B') e a frustração intracelular (entre os sítios B e B'); $\hat{H}_{qr}^{(3)}$, as ligações (acoplamento de primeiro vizinho A–B e A–B') entre células contíguas e $\hat{H}_{qr}^{(4)}$, as interações entre segundos vizinhos (frustrações intercelulares). Com relação às constantes de acoplamento, tendo em vista a topologia especial da cadeia AB₂, far-se-á $I_{AB} = I_{AB'} = I_{BA} = I_{B'A}$ e $I_{BB} = I_{B'B'}$, onde I representa os tipos de acoplamento J , K e M entre os rotores. A visualização dos hamiltonianos $\hat{H}_{qr}^{(2)}$, $\hat{H}_{qr}^{(3)}$, $\hat{H}_{qr}^{(4)}$ é facilitada pelo exame da Figura 2.1(b), em que, desta feita, os sítios A, B e B' devem ser entendidos como *estando ocupados, respectivamente, por um rotor quântico*.

Distinguem-se os dois casos de frustração estudados:

Frustração BB (intracelular)

$$\hat{H}_{qr}^{(BB)} = \hat{H}_{qr}^{(1)} + \hat{H}_{qr}^{(2)} + \hat{H}_{qr}^{(3)}. \quad (2.12)$$

Frustração AA–BB (intra- e intercelular)

$$\hat{H}_{qr}^{(AA--BB)} = \hat{H}_{qr}^{(1)} + \hat{H}_{qr}^{(2)} + \hat{H}_{qr}^{(3)} + \hat{H}_{qr}^{(4)}. \quad (2.13)$$

2.3.2 Tratamento de Campo Médio

Descreve-se resumidamente o tratamento usado.

Hamiltoniano-tentativa

O hamiltoniano-tentativa é a soma de três hamiltonianos *desacoplados* por sítio:

$$\hat{H}_{mf} = \sum_i \left[\frac{g}{2} (\hat{\mathbf{L}}_i^2 + \alpha (\hat{\mathbf{L}}_i^2)^2) + \mathbf{N}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_i + \mathbf{h}_i \cdot \hat{\mathbf{L}}_i \right], \quad (2.14)$$

onde o subscrito i percorre os sítios A, B, e B'. $\mathbf{N}$, $\mathbf{h}$ denotam os campos efetivos e tem-se $\mathbf{N} = (N_x, N_y, N_z)$, $\mathbf{h} = (h_x, h_y, h_z)$, o mesmo valendo para os operadores.

Cálculo dos Valores Esperados

A função de onda do estado fundamental de $\hat{H}_{mf}$ tem a forma de um produto tensorial das funções de onda dos respectivos sítios, isto é:

$$|\Psi_0\rangle = |\Psi_0\rangle_A \otimes |\Psi_0\rangle_B \otimes |\Psi_0\rangle_{B'} = |\Psi_0\rangle_A |\Psi_0\rangle_B |\Psi_0\rangle_{B'}, \quad (2.15)$$

onde $|\Psi_0\rangle_i$, $i = A, B, B'$, denota a função de onda do estado fundamental do sítio indicado. A energia do estado fundamental (autovalor de $\hat{H}_{mf}$) será, então, expressa por

$$E_0 \leq E_{0_A} + E_{0_B} + E_{0_{B'}} \quad (2.16)$$

com E_{0_i} denotando energia do estado fundamental da respectiva função de onda.

O cálculo dos valores esperados segue conforme exemplo abaixo:

$$\langle \Psi_0 | \hat{\mathbf{n}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_j | \Psi_0 \rangle = (\langle \Psi_0 |_i \langle \Psi_0 |_j \langle \Psi_0 |_k) | \hat{\mathbf{n}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_j | (|\Psi_0\rangle_i |\Psi_0\rangle_j |\Psi_0\rangle_k) =$$

$$\langle \Psi_0 |_i | \hat{\mathbf{n}}_i | \Psi_0 \rangle_i \cdot \langle \Psi_0 |_j | \hat{\mathbf{n}}_j | \Psi_0 \rangle_j \cdot \langle \Psi_0 |_k | \Psi_0 \rangle_k = \langle \hat{\mathbf{n}}_i \rangle_0 \cdot \langle \hat{\mathbf{n}}_j \rangle_0,$$

e assim por diante. Portanto,

$$\langle \Psi_0 | \hat{\mathbf{n}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_j | \Psi_0 \rangle = \langle \hat{\mathbf{n}}_i \rangle_0 \cdot \langle \hat{\mathbf{n}}_j \rangle_0, \quad (2.17)$$

designa o produto escalar das médias dos respectivos operadores em relação ao estado fundamental de $\hat{H}_{mf}$.

Energia de Campo Médio

Como de outras vezes, recorremos à desigualdade de Bogoliubov, Eq. (1.74), escrita na forma abaixo:

$$E_{mf} = E_0 + \langle \hat{H}_{qr} \rangle_0 - \langle \hat{H}_{mf} \rangle_0, \quad (2.18)$$

cujos valores esperados são tomados em relação ao estado fundamental de $\hat{H}_{mf}$. Portanto, resulta para a expressão da energia de campo médio:

- Frustração BB

$$E_{mf}^{(BB)} \leq E_{mf}^{(1)} + E_{mf}^{(2)} + E_{mf}^{(3)}, \quad (2.19)$$

- Frustração AA–BB

$$E_{mf}^{(AA-BB)} \leq E_{mf}^{(1)} + E_{mf}^{(2)} + E_{mf}^{(3)} + E_{mf}^{(4)}. \quad (2.20)$$

onde as $E_{mf}^{(\nu)}$, $\nu = 2, 3, 4$ correspondem aos $\hat{H}_{qr}^{(\nu)}$ respectivos e a $E_{mf}^{(1)}$ compreende a soma das energias dos estados fundamentais dos sítios e a parcela resultante da

atuação dos campos efetivos, a saber:

$$E_{mf}^{(1)} = \sum_i (E_0)_i - \sum_i (\mathbf{N}_i \cdot \langle \hat{\mathbf{n}}_i \rangle_0 + \mathbf{h}_i \cdot \langle \hat{\mathbf{L}}_i \rangle_0), \quad (2.21)$$

$$E_{mf}^{(2)} = \sum_{i < j} [J_{ij} \langle \hat{\mathbf{n}}_i \rangle_0 \cdot \langle \hat{\mathbf{n}}_j \rangle_0 + K_{ij} \langle \hat{\mathbf{L}}_i \rangle_0 \cdot \langle \hat{\mathbf{L}}_j \rangle_0 + \\ M_{ij} (\langle \hat{\mathbf{n}}_i \rangle_0 \cdot \langle \hat{\mathbf{L}}_j \rangle_0 + \langle \hat{\mathbf{n}}_j \rangle_0 \cdot \langle \hat{\mathbf{L}}_i \rangle_0)], \quad (2.22)$$

$$E_{mf}^{(3)} = \sum_{i > j, j=A} [J_{ij} \langle \hat{\mathbf{n}}_i \rangle_0 \cdot \langle \hat{\mathbf{n}}_j \rangle_0 + K_{ij} \langle \hat{\mathbf{L}}_i \rangle_0 \cdot \langle \hat{\mathbf{L}}_j \rangle_0 + \\ M_{ij} (\langle \hat{\mathbf{n}}_i \rangle_0 \cdot \langle \hat{\mathbf{L}}_j \rangle_0 + \langle \hat{\mathbf{n}}_j \rangle_0 \cdot \langle \hat{\mathbf{L}}_i \rangle_0)], \quad (2.23)$$

$$E_{mf}^{(4)} = \sum_i [J_{ii} \langle \hat{\mathbf{n}}_i \rangle_0 \cdot \langle \hat{\mathbf{n}}_i \rangle_0 + K_{ii} \langle \hat{\mathbf{L}}_i \rangle_0 \cdot \langle \hat{\mathbf{L}}_i \rangle_0 + \\ M_{ii} (\langle \hat{\mathbf{n}}_i \rangle_0 \cdot \langle \hat{\mathbf{L}}_i \rangle_0 + \langle \hat{\mathbf{n}}_i \rangle_0 \cdot \langle \hat{\mathbf{L}}_i \rangle_0)], \quad (2.24)$$

cujos índices devem ser lidos da mesma maneira que para as Eq. (2.8) a Eq. (2.11). As expressões dadas pelas Eq. (2.19) e Eq. (2.20) representam funções multi-dimensionais, possuindo cada uma dezoito variáveis (as componentes dos campos variacionais $\mathbf{N}$ e $\mathbf{h}$) e devem ser minimizadas numericamente, conforme exposto na sub-seção 1.7.2, para obtenção dos resultados de interesse físico.

2.3.3 Resultados Obtidos

Nos gráficos das Figuras 2.4 a 2.7, estudaram-se a energia de campo médio, a posição e o momento angular na forma explicitamente indicada nas figuras. Com exceção da energia, as grandezas de interesse foram examinadas através de produtos na forma de $\langle \hat{\mathcal{A}}_i \rangle \cdot \langle \hat{\mathcal{B}}_j \rangle$, onde $i, j = A, B_1(B), B_2(B')$, referem-se aos sítios da célula unitária. Esses produtos devem ser entendidos da seguinte forma:

$$\langle \hat{\mathcal{A}} \rangle \cdot \langle \hat{\mathcal{B}} \rangle = \langle \hat{\mathcal{A}}_x \rangle \cdot \langle \hat{\mathcal{B}}_x \rangle + \langle \hat{\mathcal{A}}_y \rangle \cdot \langle \hat{\mathcal{B}}_y \rangle + \langle \hat{\mathcal{A}}_z \rangle \cdot \langle \hat{\mathcal{B}}_z \rangle, \quad (2.25)$$

com $\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}} \rightarrow \hat{\mathbf{L}} \text{ e } \hat{\mathbf{h}}$.

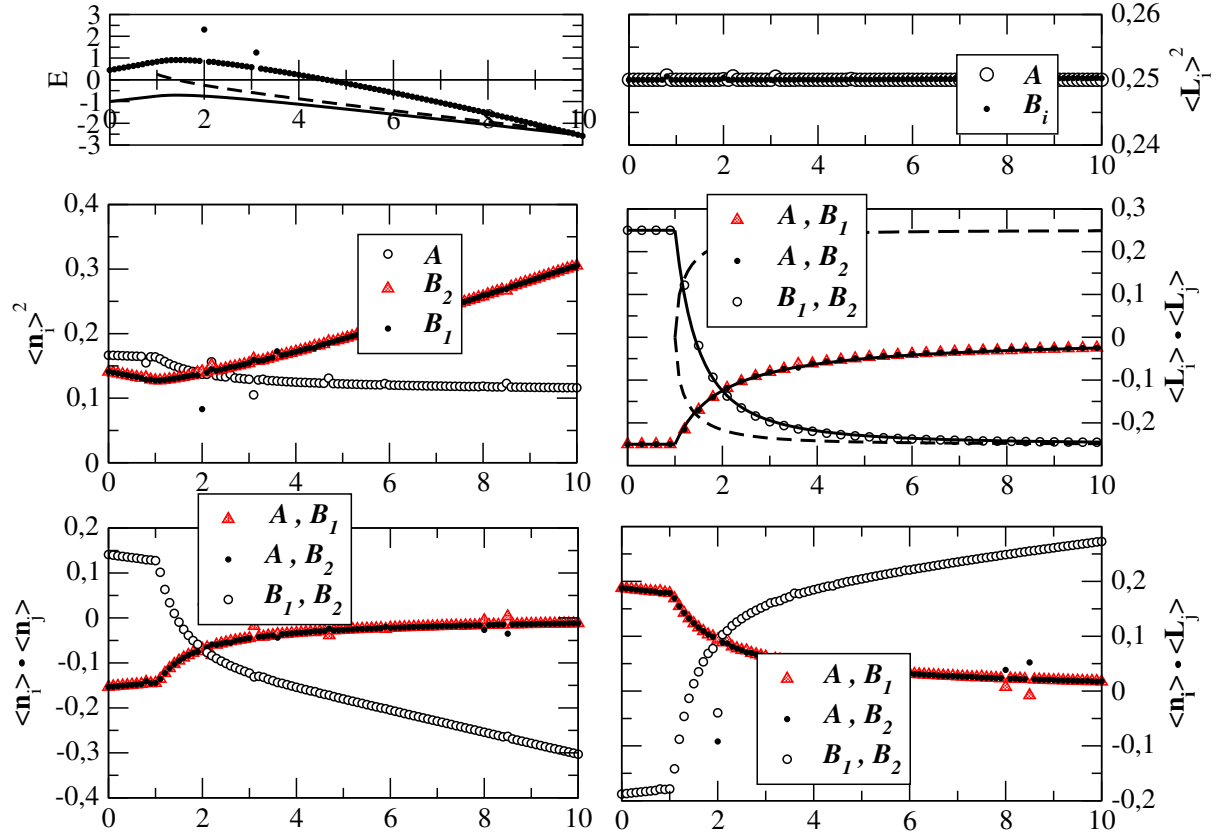


Figura 2.4: Frustração BB. Aqui fez-se $I_{AB} = I_{AB'} = I_{BA} = I_{B'A} = 1$. $I_{BB'} = x$ (abscissa, variando de 0 a 10). Demais $I_{ij} = 0$. Onde $I=J, K$. Estuda-se o caso $M_{ij} = 0$. Isto é, contempla-se o caso especial da frustração BB, onde todos os acoplamentos M são nulos e os acoplamentos da frustração são iguais ($I_{BB'} = x$, $I = J, K$). As linhas contínuas representam as curvas obtidas da interpretação elaborada com base na Configuração 1 (Figura 2.8(a)), enquanto que as linhas tracejadas representam aquelas obtidas com base na Configuração 2 (Figura 2.8(b)). Eliminaram-se alguns pontos do cálculo numérico, para melhorar a visualização.

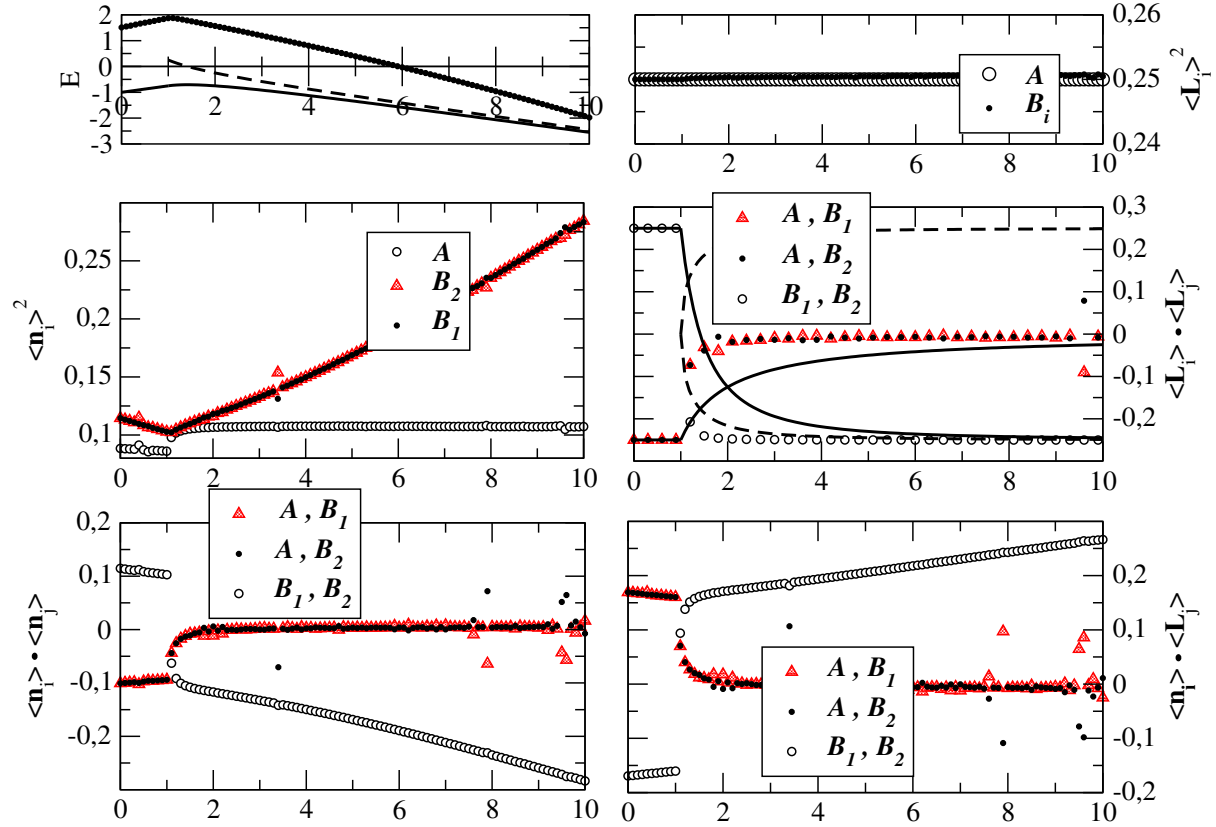


Figura 2.5: Frustração BB. Aqui fez-se $I_{AB} = I_{AB'} = I_{BA} = I_{B'A} = 1$. $I_{BB'} = x$ (abscissa, variando de 0 a 10). Demais $I_{ij} = 0$. Onde $I=J, K$. Estuda-se o caso $M_{ij} = 1$. Isto é, contempla-se o caso especial da frustração BB, onde todos os acoplamentos M estão fixados ($M=1$) e os acoplamentos da frustração são iguais ($I_{BB'} = x$, $I = J, K$). As linhas contínuas representam as curvas obtidas da interpretação elaborada com base na Configuração 1 (Figura 2.8(a)), enquanto que as linhas tracejadas representam aquelas obtidas com base na Configuração 2 (Figura 2.8(b)). Eliminaram-se alguns pontos do cálculo numérico, para melhorar a visualização.

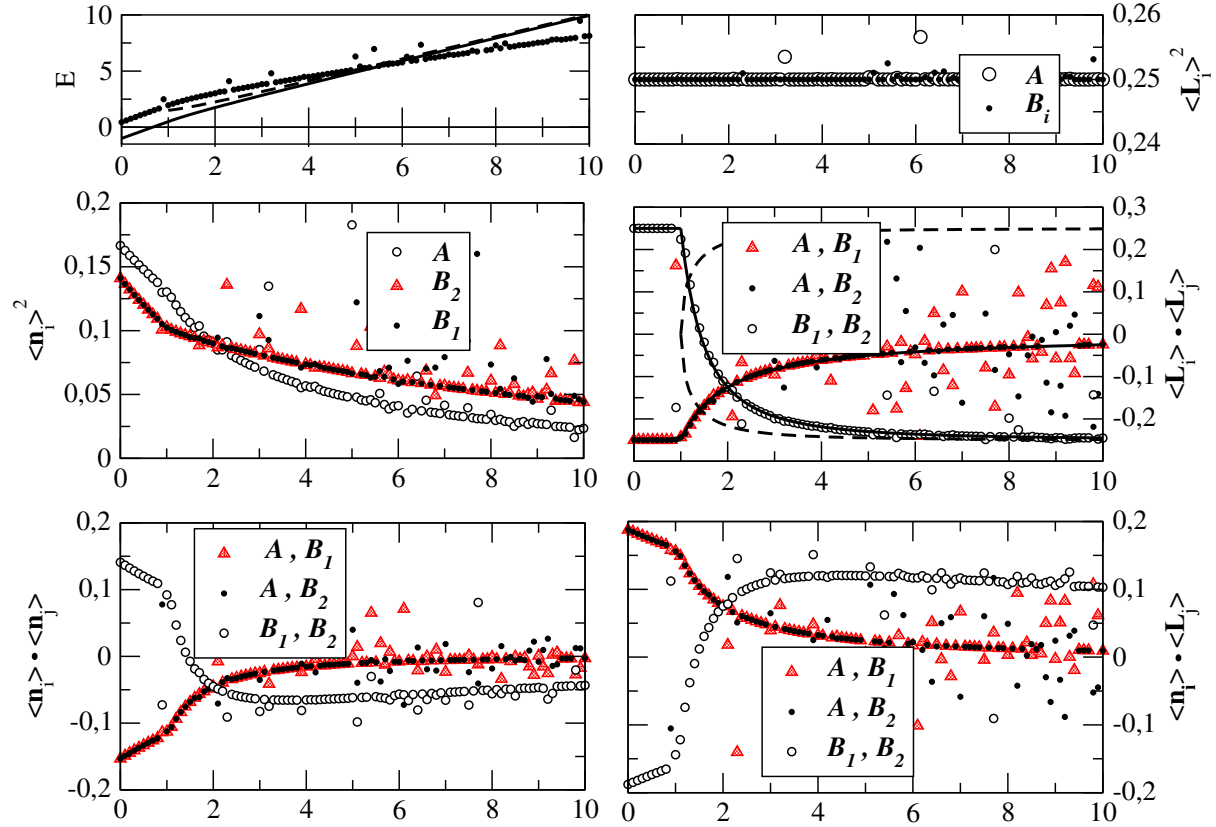


Figura 2.6: Frustração AA-BB. Aqui fez-se $I_{AB} = I_{AB'} = I_{BA} = I_{B'A} = 1$. Demais $I_{ij} = x$ (abscissa, variando de 0 a 10). Onde $I=J, K$. Estuda-se o caso $M_{ij} = 0$. Isto é, contempla-se o caso especial da frustração AA-BB, onde todos os acoplamentos M são nulos e os acoplamentos das frustrações são todos iguais ($I_{ij} = x, I = J, K, i$ e j marcam as frustrações da Figura 2.1(b)). As linhas contínuas representam as curvas obtidas da interpretação elaborada com base na Configuração 1 (Figura 2.8(a)), enquanto que as linhas tracejadas representam aquelas obtidas com base na Configuração 2 (Figura 2.8(b)). Eliminaram-se alguns pontos do cálculo numérico, para melhorar a visualização.

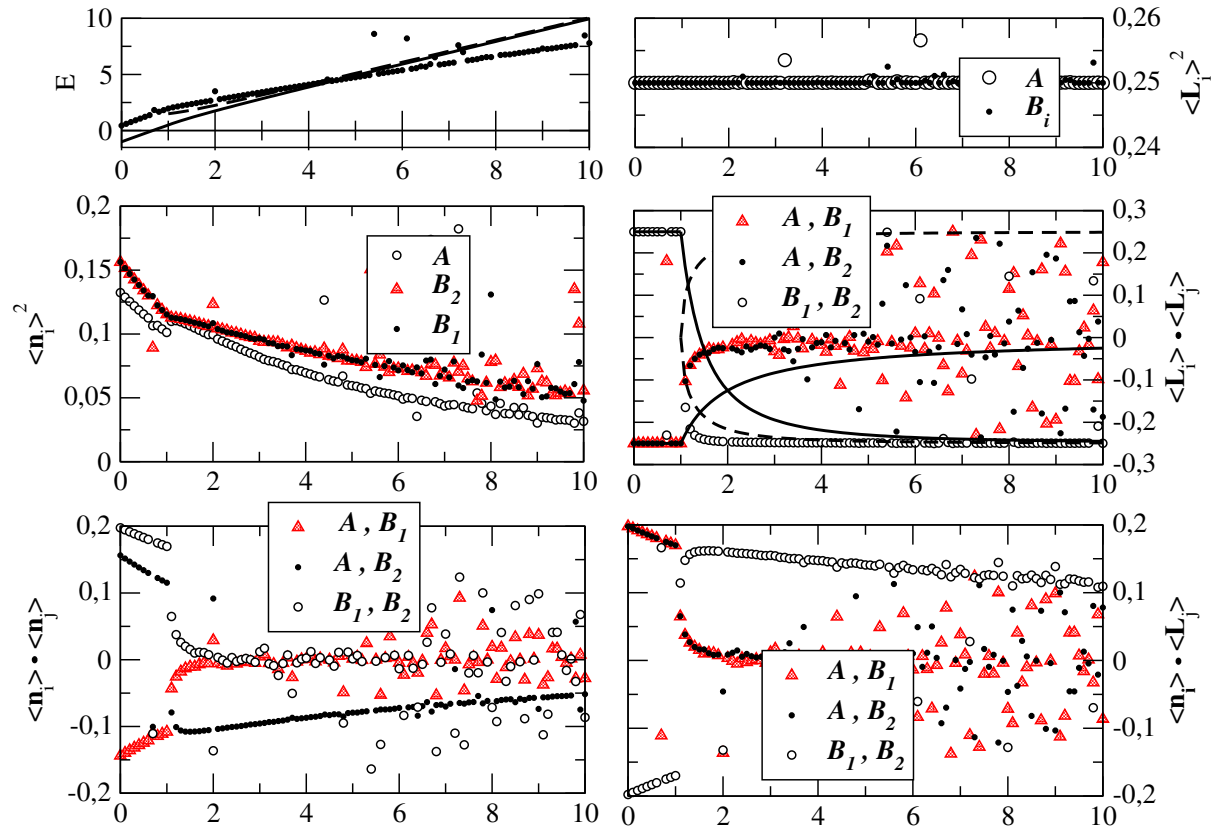


Figura 2.7: Frustração AA-BB. Aqui se fez $I_{AB} = I_{AB'} = I_{BA} = I_{B'A} = 1$. Demais $I_{ij} = x$ (abscissa, variando de 0 a 10). Onde $I=J, K$. Estuda-se o caso $M_{ij} = 1$. Isto é, contempla-se o caso especial da frustração AA-BB, onde todos os acoplamentos M estão fixados ($M=1$) e os acoplamentos das frustrações são todos iguais ($I_{ij} = x, I = J, K, i$ e j marcam as frustrações da Figura 2.1(b)). As linhas contínuas representam as curvas obtidas da interpretação elaborada com base na Configuração 1 (Figura 2.8(a)), enquanto que as linhas tracejadas representam aquelas obtidas com base na Configuração 2 (Figura 2.8(b)). Eliminaram-se alguns pontos do cálculo numérico, para melhorar a visualização.

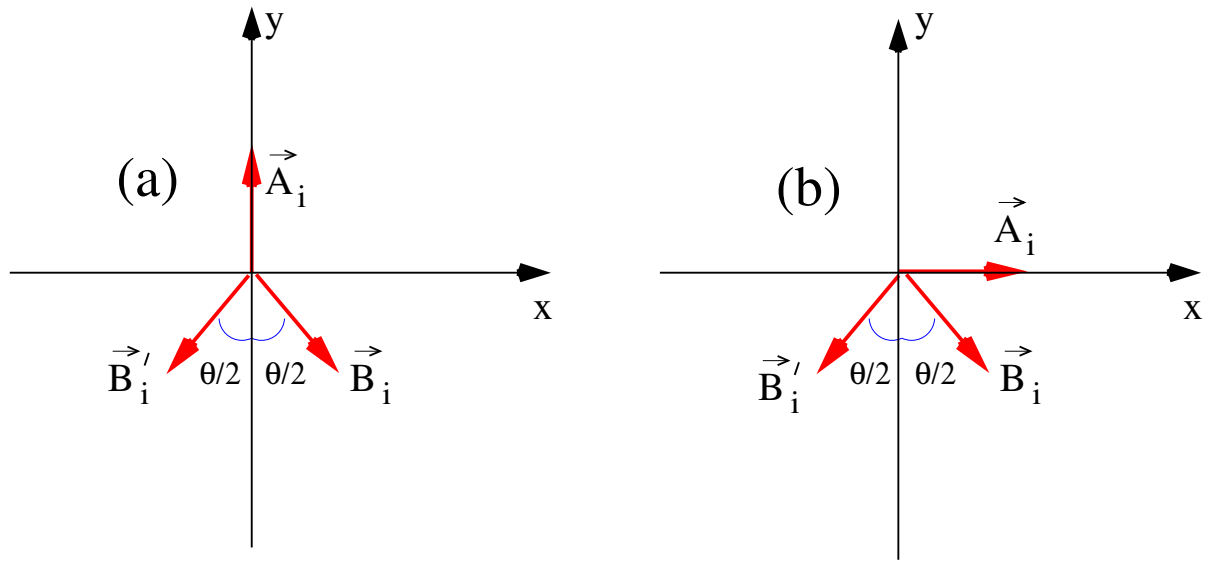


Figura 2.8: Interpretação clássica. As setas representam os spins como vetores. (a) Configuração 1: $\vec{A}$ paralelo ao eixo dos y; $\vec{B}$ e $\vec{B}'$ formam ângulos iguais com a direção negativa de y ($\theta/2$). (b) Configuração 2: $\vec{A}$ paralelo ao eixo dos X; $\vec{B}$ e $\vec{B}'$ formam ângulos iguais com a direção negativa de y ($\theta/2$).

2.3.4 Análise dos Resultados

Concentrou-se a atenção mormente na energia de campo médio, denotada por E (primeiro gráfico da esquerda) e para as funções $\langle \hat{\mathbf{L}}_i \rangle^2$ (primeiro gráfico da direita) e $\langle \hat{\mathbf{L}}_i \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{L}}_j \rangle$ (segundo gráfico da direita), em que i, j percorrem os sítios da célula unitária e $i \neq j$. Para agilizar a implementação numérica, utilizou-se um espaço de Hilbert com $l_{\text{máx}} = 5, 5$; suficiente para a obtenção dos resultados com a precisão requerida. Segue a discussão dos dois tipos de frustração separadamente.

Frustração BB (intracelular)

Estudou-se o caso particular de igualdade dos acoplamentos $J_{BB'} = K_{BB'}$, com M fixo ($M = 0$ e $M = 1$). O momento angular de cada sítio mantém-se fixo em $l = 1/2$. Isto significa que a energia cinética da célula unitária permanece constante. Portanto, as interações entre as células são as únicas responsáveis pela forma da curva da energia. Observam-se pelo menos dois comportamentos distintos nessa curva: (a) para $0 \leq x \approx 1$, um comportamento linear crescente e (b) para $1 \leq x$, a energia passa a decrescer, com um traçado aproximadamente linear. O exame das Figuras 2.4 e 2.5 revela ainda que os rotores localizados nos sítios B e B' comportam-se de forma exatamente igual (gráfico de $\langle \hat{\mathbf{n}}_i \rangle^2$, $i = B, B'$) como também exatamente igual em oposição ao rotor do sítio A (gráficos de $\langle \hat{\mathbf{L}}_i \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{L}}_j \rangle$, $\langle \hat{\mathbf{n}}_i \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{n}}_j \rangle$ e $\langle \hat{\mathbf{n}}_i \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{L}}_j \rangle$). Isto não teria nenhuma obrigação de acontecer, pois se usaram parâmetros variacionais independentes para cada sítio; esta constatação deve ser interpretada como reflexo das simetrias do hamiltoniano dado pela Eq. (2.12). Por outro lado, cada rotor representa uma torre de momentos, somente limitada pelo tamanho do espaço de Hilbert utilizado na implementação. Observa-se, entretanto, que os momentos dos sítios permanecem

sempre atrelados ao valor mínimo $l = 1/2 = q$, fato devido, é claro, ao *ambiente* em que estão inseridos os rotores, ambiente este modelado pelo hamiltoniano.

Estabelecendo-se a associação entre o momento angular do rotor e o spin do modelo de Heisenberg, volta-se a atenção agora sobre o gráfico de $\langle \hat{\mathbf{L}}_i \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{L}}_j \rangle$ (observa-se comportamento similar para a posição dos rotores, conforme se vê no gráfico de $\langle \hat{\mathbf{n}}_i \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{n}}_j \rangle$). No intervalo $0 \leq x \approx 1$, o estado fundamental da cadeia exibe uma fase ferrimagnética cuja configuração está de acordo com o teorema de Lieb para spins [20]. Para x grande ($x \approx 10$, para o caso $M=0$, e $x \approx 2$, para o caso $M=1$), o estado fundamental está configurado por uma fase paramagnética, onde os momentos (spins) nos sítios B e B' se opõem e o momento (spin) no sítio A fica desacoplado. Em ambos os casos, entre esses extremos, o sistema evolui para uma fase *canted* intermediária. No caso $M = 1$, esta fase está caracterizada no intervalo $1 \leq x \approx 2$ e a transição de fase no ponto $x = 1$ é de primeira ordem. O comportamento da cadeia muda significativamente, quando $M = 1$, daquele apresentado quando $M = 0$, fato não esperado, uma vez que o acoplamento M , para os rotores com $q \neq 0$, não acrescenta nem suprime simetrias (modelos com $q \neq 0$ não exibem simetria $\mathcal{P}$) [3]. Neste caso particular, não se buscou dar uma interpretação física relevante para o papel dos $\hat{\mathbf{n}}_i$, isto é, a orientação de cada rotor individualmente (no primeiro capítulo este papel, entretanto, foi importante, na medida em que forneceu indícios sobre o comportamento de uma coletividade de elétrons subjacentes; no presente caso, só há um único elétron subjacente, localizado em cada sítio da cadeia representado por um rotor). Acredita-se que os $\hat{\mathbf{L}}_i$ carregam as informações mais relevantes sobre as propriedades do sistema. Observe-se, entretanto, que a presença do acoplamento entre os $\hat{\mathbf{n}}_i$ e $\hat{\mathbf{L}}_i$, isto é, $M \neq 0$, muda drasticamente o comportamento do sistema.

Tentam-se mais adiante interpretações qualitativas que auxiliarão o melhor entendimento do comportamento observado.

Frustração AA–BB (intra- e intercelular)

Aqui se estudou também o caso particular de igualdade das frustrações $I_{AA} = I_{BB} = I_{BB'}$, onde $I = J, K$, com M fixo ($M = 0$ e $M = 1$). Observa-se que o ponto $x = 1$, igualmente ao caso anterior, continua sendo um ponto especial do diagrama, onde alguma transição de fase deve ocorrer. Aparentemente, surgem as mesmas fases do caso anterior, onde se ressaltam alguns aspectos. A curva da energia indica uma função crescente nas duas fases, com um comportamento linear na primeira fase e aproximadamente linear na segunda. Os momentos de cada sítio permanecem fixos ($l = 1/2$). O comportamento de $\langle \hat{\mathbf{L}}_A \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{L}}_B \rangle$, $\langle \hat{\mathbf{L}}_A \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{L}}_{B'} \rangle$ e de $\langle \hat{\mathbf{L}}_B \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{L}}_{B'} \rangle$ é idêntico ao caso visto para a frustração BB, o que não corresponde às expectativas do ponto de vista físico. Entretanto neste caso observa-se o aparecimento de flutuações com muito maior frequência. Essas flutuações aparentemente não têm muito a haver com a física do problema e surgem em todas as curvas. No caso da energia, vêem-se flutuações sempre *para cima* da curva. Nos produtos $\langle \hat{\mathbf{L}}_A \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{L}}_B \rangle$ e $\langle \hat{\mathbf{L}}_A \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{L}}_{B'} \rangle$, são simétricas com relação ao eixo dos x .

As interpretações fornecidas logo abaixo tentam clarificar esses aspectos.

2.3.5 Interpretação Clássica

Representam-se os spins por vetores, do plano XY, localizados nos sítios da cadeia AB₂:

$$\begin{aligned}\vec{A} &= \frac{1}{2}[\cos(nQ)\hat{\mathbf{i}} + \sin(nQ)\hat{\mathbf{j}}] \\ \vec{B} &= \frac{1}{2}[\cos(nQ + \phi_B)\hat{\mathbf{i}} + \sin(nQ + \phi_B)\hat{\mathbf{j}}] \\ \vec{B}' &= \frac{1}{2}[\cos(nQ + \phi_{B'})\hat{\mathbf{i}} + \sin(nQ + \phi_{B'})\hat{\mathbf{j}}]\end{aligned}\quad (2.26)$$

onde n é um número inteiro que indexa a célula unitária, $0 \leq Q \leq 2\pi$ e $0 \leq \phi_B, \phi_{B'} \leq \pi$ são as fases dos vetores $\vec{B}$ e $\vec{B}'$ em relação ao vetor $\vec{A}$, respectivamente. O hamiltoniano de uma única célula $i+1$ é escrito mediante as seguintes parcelas (veja a figura 2.1(b)):

$$\hat{H}_{cl}^{(1)} = \vec{A}_{i+1} \cdot [(\vec{B}_i + \vec{B}_{i+1}) + (\vec{B}'_i + \vec{B}'_{i+1})] + J\vec{B}_{i+1} \cdot \vec{B}'_{i+1} \quad (2.27)$$

$$\hat{H}_{cl}^{(2)} = J[\vec{A}_{i+1} \cdot \vec{A}_{i+2} + (\vec{B}_{i+1} \cdot (\vec{B}_i + \vec{B}_{i+2}) + \vec{B}'_{i+1} \cdot (\vec{B}'_i + \vec{B}'_{i+2}))] \quad (2.28)$$

onde se fez $J = J_2/J_1 = J_3/J_1$, $J_1 = 1$. J é um parâmetro de controle que dita o comportamento do sistema. De sorte que

$$\hat{H}_{cl}^{(BB)} = \hat{H}_{cl}^{(1)}, \quad (\text{frustração BB}), \quad (2.29)$$

e

$$\hat{H}_{cl}^{(AA-BB)} = \hat{H}_{cl}^{(1)} + \hat{H}_{cl}^{(2)}, \quad (\text{frustração AA-BB}). \quad (2.30)$$

Efetutando-se os produtos internos, considerada a invariância translacional ($Q = 2\pi$), resultam

$$\hat{H}_{cl}^{(BB)}(\phi_B, \phi_{B'}) = \frac{1}{2} \cos \phi_B + \frac{1}{2} \cos \phi_{B'} + \frac{J}{4} \cos(\phi_B - \phi_{B'}), \quad (2.31)$$

$$\hat{H}_{cl}^{(AA-BB)}(\phi_B, \phi_{B'}) = \frac{1}{2} \cos \phi_B + \frac{1}{2} \cos \phi_{B'} + \frac{J}{4} \cos(\phi_B - \phi_{B'}) + \frac{5J}{4}. \quad (2.32)$$

Para se obter a Configuração 1, esboçada na Figura 2.8(a), prossegue-se com a substituição

$$\phi_B = -\phi_{B'} = \pi - \theta/2, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad (2.33)$$

resultando

$$\hat{H}_{cl}^{(BB)}(\theta) = -\cos \theta/2 + \frac{J}{4} \cos \theta, \quad (2.34)$$

$$\hat{H}_{cl}^{(AA-BB)}(\theta) = -\cos \theta/2 + \frac{J}{4}(\cos \theta + 5). \quad (2.35)$$

Minimizando-se em relação a θ (para achar a energia do estado fundamental), obtêm-se as seguintes relações para o parâmetro de controle (frustração):

- $\theta = 0$

$$J \leq 1; \quad (2.36)$$

- $\theta \neq 0$

$$J = \frac{1}{\cos \theta/2}, \quad J \geq 1. \quad (2.37)$$

Desta forma, derivam-se as expressões desejadas para a energia e para as correlações:

- Energia

1. Frustração BB

$$\begin{aligned} E(J) &= \frac{J}{4} - 1, & (J \leq 1), \\ E(J) &= -\frac{J}{4} - \frac{1}{2J}, & (J \geq 1). \end{aligned} \quad (2.38)$$

2. Frustração AA-BB

$$\begin{aligned} E(J) &= \frac{3J}{2} - 1, & (J \leq 1), \\ E(J) &= J - \frac{1}{2J}, & (J \geq 1). \end{aligned} \quad (2.39)$$

• Produtos internos (correlações)

1. Frustração BB e Frustração AA-BB

$$\begin{aligned} \vec{A} \cdot \vec{B} = \vec{A} \cdot \vec{B}' &= -\frac{1}{4} & (J \leq 1), \\ \vec{B} \cdot \vec{B}' &= \frac{1}{4} \left(\frac{2}{J^2} - 1 \right) & (J \geq 1). \end{aligned} \quad (2.40)$$

Para se obter a Configuração 2 (figura 2.8(b)), usa-se a transformação

$$\phi_B = -\phi_{B'} = \frac{\pi}{2} - \theta/2, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad (2.41)$$

resultando, para $\theta > 0$, expressões que não minimizam a energia do sistema, exceto no ponto $\theta = \pi$. Usando a relação $J = (1/2) \cos \theta/2$, $J \geq 1$, tem-se para a energia e

correlações:

$$\begin{aligned} E(J) &= -\frac{J}{4} + \frac{1}{2J}, \quad (J \geq 1), \quad (\text{frustração BB}) \\ E(J) &= J + \frac{1}{2J}, \quad (J \geq 1) \quad (\text{frustração AA-BB}). \end{aligned} \quad (2.42)$$

$$\begin{aligned} \vec{A} \cdot \vec{B} = -\vec{A} \cdot \vec{B}' &= \frac{1}{4} \sqrt{1 - \frac{1}{J^2}} \quad (J \leq 1), \\ \vec{B} \cdot \vec{B}' &= \frac{1}{4} \left(\frac{2}{J^2} - 1 \right) \quad (J \geq 1). \end{aligned} \quad (2.43)$$

com as duas últimas expressões sendo válidas para ambas as frustrações.

Nas figuras 2.4, 2.5, 2.6 e 2.7, traçaram-se as curvas das equações Eq. (2.38) a Eq. (2.40), linhas cheias, e das equações Eq. (2.42) e Eq. (2.43), linhas tracejadas. Vê-se de imediato, no caso $M = 0$, que as correlações calculadas classicamente coincidem com aquelas obtidas para a cadeia de rotores. Essa interpretação ainda confirma o comportamento observado exatamente igual das correlações para os dois tipos de frustração. Nos dois casos, o sistema transita da fase ferrimagnética continuamente (em $J = 1$) para uma fase *canted* intermediária e, para $J \gg 1$, quando $\theta \approx \pi$, os momentos (spins) dos sítios B e B' assumem uma configuração de oposição, enquanto o momento (spin) do sítio A permanece totalmente desacoplado, conforme mostra a figura 2.8(a), quando $\theta = \pi$.

Para se entender o que ocorre é necessario observar que a energia cinética dos rotores é constante (momento total de cada sítio fixo em 1/2). Então, para $M=0$, o operador $\hat{n}$ atua de forma aparentemente independente de $\hat{\mathbf{L}}$, fato corroborado nesta interpretação pela perfeita coincidência das curvas das correlações dos momentos nos dois casos - rotor versus spin clássico. Entretanto, quando $M=1$, $\hat{n}$ se

acopla $\hat{L}$, forçando uma mudança no comportamento das correlações deste operador em relação ao modelo simples usado na interpretação. As curvas das energias descrevem de modo geral aquelas observadas para os rotores e a diferença entre elas está evidentemente nas parcelas da energia cinética constante do rotor e dos termos que contêm o operador $\hat{n}$. A Configuração 2 tem uma energia mais alta que a da Configuração 1, aproximando-se desta última quando a frustração cresce ($\theta \rightarrow \pi$). Observa-se que as curvas das energias para todos os casos sempre exibem flutuações para cima. Esta interpretação sugere o fato de que o sistema de rotores quânticos pode igualmente estar-se degenerando para uma energia ligeiramente maior, exibindo uma configuração de momentos que se aproxima daquela dada na figura 2.8(b). Portanto, as flutuações observadas (mais frequentes no caso da frustração AA–BB) podem estar relacionadas com instabilidades na implementação numérica.

Exceto pela fase ferrimagnética, o comportamento dos rotores produzido com esta abordagem não corresponde ao registrado pela literatura (frustração BB) [22] e dados disponíveis [26] (frustração AA–BB), para as correspondentes cadeias AB_2 de spins. Além do mais, o sistema parece não reconhecer uma frustração da outra, com respeito às correlações dos momentos e não se permitiu uma comparação clara com o que se conhece sobre estas cadeias [22, 23, 26]. Portanto, surge a necessidade de métodos alternativos que possibilitem melhor compreensão dos rotores nessa linha de trabalho.

2.4 Rotores Quânticos na Cadeia AB₂ com Interações Competitivas – Célula Estendida (Tratamento Coletivo)

Adotou-se um tratamento coletivo da estrutura unitária mostrada na Figura 2.9. Trata-se de uma cadeia de rotores quânticos, com um único rotor com $q = 1/2$ localizado em cada sítio (simulando semipreenchimento eletrônico por sítio), interagentes, conforme ilustrado.

2.4.1 O Hamiltoniano dos Rotores Quânticos - Célula Estendida

A célula estendida está descrita na figura 2.9, onde a notação para cada sítio está indicada. Como das outras vezes, escreve-se um hamiltoniano particularizado para cada tipo de frustração. Portanto, para maior clareza, consideram-se as seguintes parcelas:

- termo da energia cinética

$$\hat{H}_{qr}^{(1)} = \frac{g}{2} \sum_{l,i} [\hat{\mathbf{L}}_{li}^2 + \alpha(\hat{\mathbf{L}}_{li}^2)^2], \quad (2.44)$$

onde l indexa a célula estendida (seis sítios) e os índices i percorrem os sítios A₁, A₂, B₁, B₂, B₃ e B₄.

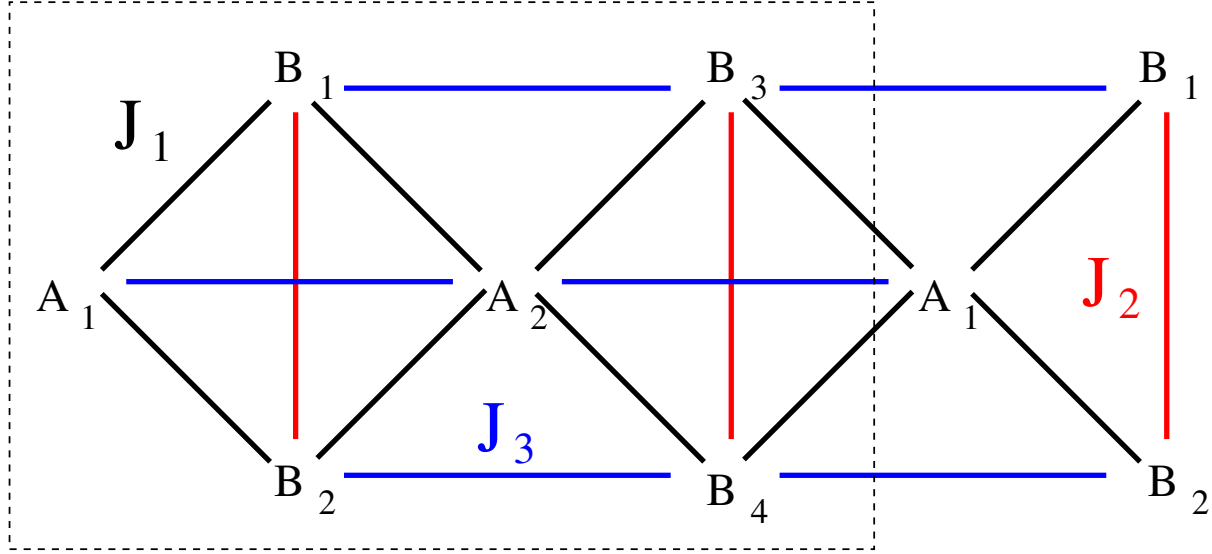


Figura 2.9: O retângulo delimita a célula estendida, composta de duas células unitárias da cadeia AB_2 , onde em cada sítio encontra-se um único rotor quântico com $q = 1/2$. (i) Frustração BB (intracelular): aqui se fez $I_{AB} = I_{AB'} = I_{BA} = I_{B'A} = 1$. $I_{B_1B_2} = I_{B_3B_4} = J_2$. Demais $I_{ij} = 0$, onde I ($= J, K$) representa de modo geral os acoplamentos entre os rotores. Estudou-se o caso $M_{ij} = 0$. Isto é, contemplou-se o caso especial da frustração BB, onde todos os acoplamentos M são nulos e os acoplamentos da frustração são iguais. (ii) Frustração AA–BB (intra- e intercelular): tem-se igualmente $I_{AB} = I_{AB'} = I_{BA} = I_{B'A} = 1$. Demais $I_{ij} = J_2 = J_3$. Os J_3 representam as frustrações intercelulares, e I ($= J, K$) representa de modo geral os acoplamentos entre os rotores. Estuda-se o caso $M_{ij} = 0$. Isto é, o caso especial da frustração AA–BB, onde todos os acoplamentos M são nulos e os acoplamentos das frustrações iguais.

- ligações (bonds)

$$\hat{H}_{qr}^{(2)} = \sum_l [(\hat{\mathbf{n}}_{lA_1} + \hat{\mathbf{n}}_{lA_2}) \cdot (\hat{\mathbf{n}}_{lB_1} + \hat{\mathbf{n}}_{lB_2}) + \hat{\mathbf{n}}_{lA_2} \cdot (\hat{\mathbf{n}}_{lB_3} + \hat{\mathbf{n}}_{lB_4}) + \hat{\mathbf{n}}_{l+1,A_1} \cdot (\hat{\mathbf{n}}_{lB_3} + \hat{\mathbf{n}}_{lB_4}) + (\hat{\mathbf{L}}_{lA_1} + \hat{\mathbf{L}}_{lA_2}) \cdot (\hat{\mathbf{L}}_{lB_1} + \hat{\mathbf{L}}_{lB_2}) + \hat{\mathbf{L}}_{lA_2} \cdot (\hat{\mathbf{L}}_{lB_3} + \hat{\mathbf{L}}_{lB_4}) + \hat{\mathbf{L}}_{l+1,A_1} \cdot (\hat{\mathbf{L}}_{lB_3} + \hat{\mathbf{L}}_{lB_4})] \quad (2.45)$$

- frustrações intracelulares

$$\hat{H}_{qr}^{(3)} = J_2 \sum_l [(\hat{\mathbf{n}}_{lB_1} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{lB_2}) + (\hat{\mathbf{n}}_{lB_3} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{lB_4}) + (\hat{\mathbf{L}}_{lB_1} \cdot \hat{\mathbf{L}}_{lB_2}) + (\hat{\mathbf{L}}_{lB_3} \cdot \hat{\mathbf{L}}_{lB_4})] \quad (2.46)$$

em que nos dois últimos houve indicação explícita.

- frustrações intercelulares

$$\hat{H}_{qr}^{(4)} = J_3 \sum_{l, \vec{X}=\hat{\mathbf{n}}, \hat{\mathbf{L}}} [(\hat{\mathbf{X}}_{lA_1} \cdot \hat{\mathbf{X}}_{lA_2} + \hat{\mathbf{X}}_{lB_1} \cdot \hat{\mathbf{X}}_{lB_3} + \hat{\mathbf{X}}_{lB_2} \cdot \hat{\mathbf{X}}_{lB_4}) + (\hat{\mathbf{X}}_{lA_2} \cdot \hat{\mathbf{X}}_{l+1,A_1} + \hat{\mathbf{X}}_{lB_3} \cdot \hat{\mathbf{X}}_{l+1,B_1} + \hat{\mathbf{X}}_{lB_4} \cdot \hat{\mathbf{X}}_{l+1,B_2})] \quad (2.47)$$

Portanto, tem-se, conforme o caso:

- para a frustração BB (intracelular):

$$\hat{H}_{qr}^{(BB)} = \hat{H}_{qr}^{(1)} + \hat{H}_{qr}^{(2)} + \hat{H}_{qr}^{(3)}, \quad (2.48)$$

- e para a frustração AA–BB (intra- e intercelular):

$$\hat{H}_{qr}^{(AA--BB)} = \hat{H}_{qr}^{(1)} + \hat{H}_{qr}^{(2)} + \hat{H}_{qr}^{(3)} + \hat{H}_{qr}^{(4)}, \quad (2.49)$$

2.4.2 Hamiltoniano-tentativa

Adotou-se um *único* hamiltoniano-tentativa *por célula estendida*. Aí reside a inovação no tratamento utilizado, diferente do anterior, onde se consideram três hamiltonianos-tentativa desacoplados. Trabalhou-se então com um espaço de Hilbert que é o produto tensorial dos espaços de cada sítio da célula estendida. No primeiro caso, a função de onda da célula unitária é separável; aqui isto não ocorre. O uso da célula estendida objetiva captar, nesta abordagem, as diversas correlações entre os rotores localizados nos sítios de duas células contíguas da cadeia AB₂. Com isso, intenta-se obter resultados que possam ser comparados com o conhecimento existente sobre as correspondentes cadeias AB₂ de spins de Heisenberg [22] e estudos em andamento [26]. Tem-se

- para a frustração BB:

$$\hat{H}_{mf}^{(BB)} = \hat{H}_{mf}^{(1)} + \hat{H}_{mf}^{(2)} + \hat{H}_{mf}^{(3)}, \quad (2.50)$$

- e para a frustração AA–BB:

$$\hat{H}_{mf}^{(AA-BB)} = \hat{H}_{mf}^{(1)} + \hat{H}_{mf}^{(2)} + \hat{H}_{mf}^{(3)} + \hat{H}_{mf}^{(4)}, \quad (2.51)$$

onde se escrevem

- termo da energia cinética mais campos efetivos

$$\hat{H}_{mf}^{(1)} = \frac{g}{2} \sum_i [\hat{\mathbf{L}}_i^2 + \alpha(\hat{\mathbf{L}}_i^2)^2 + \hat{\mathbf{N}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_i + \hat{\mathbf{h}}_i \cdot \hat{\mathbf{L}}_i], \quad (2.52)$$

em que os índices i percorrem os sítios A₁, A₂, B₁, B₂, B₃ e B₄, $\hat{\mathbf{N}}_i$ e $\hat{\mathbf{h}}_i$ são os

campos efetivos no sítio.

- ligações (bonds)

$$\begin{aligned}\hat{H}_{mf}^{(2)} = & (\hat{\mathbf{n}}_{A_1} + \hat{\mathbf{n}}_{A_2}) \cdot (\hat{\mathbf{n}}_{B_1} + \hat{\mathbf{n}}_{B_2}) + \hat{\mathbf{n}}_{A_2} \cdot (\hat{\mathbf{n}}_{B_3} + \hat{\mathbf{n}}_{B_4}) + \\ & (\hat{\mathbf{L}}_{A_1} + \hat{\mathbf{L}}_{A_2}) \cdot (\hat{\mathbf{L}}_{B_1} + \hat{\mathbf{L}}_{B_2}) + \hat{\mathbf{L}}_{A_2} \cdot (\hat{\mathbf{L}}_{B_3} + \hat{\mathbf{L}}_{B_4}).\end{aligned}\quad (2.53)$$

- frustrações intracelulares

$$\hat{H}_{mf}^{(3)} = J_2[(\hat{\mathbf{n}}_{B_1} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{B_2}) + (\hat{\mathbf{n}}_{B_3} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{B_4}) + (\hat{\mathbf{L}}_{B_1} \cdot \hat{\mathbf{L}}_{B_2}) + (\hat{\mathbf{L}}_{B_3} \cdot \hat{\mathbf{L}}_{B_4})] \quad (2.54)$$

- frustrações intercelulares

$$\hat{H}_{mf}^{(4)} = J_3 \sum_{\vec{X}=\hat{\mathbf{n}},\hat{\mathbf{L}}} = [(\hat{\mathbf{X}}_{A_1} \cdot \hat{\mathbf{X}}_{A_2} + \hat{\mathbf{X}}_{B_1} \cdot \hat{\mathbf{X}}_{B_3} + \hat{\mathbf{X}}_{B_2} \cdot \hat{\mathbf{X}}_{B_4})] \quad (2.55)$$

Aplicando-se a desigualdade de Bogoliubov, resulta a expressão da energia de campo médio

$$\begin{aligned}E_{mf}^{(BB)} = & E_0 + \langle \hat{\mathbf{n}}_{A_1} \rangle \cdot (\langle \hat{\mathbf{n}}_{B_3} \rangle + \langle \hat{\mathbf{n}}_{B_4} \rangle) + \\ & \langle \hat{\mathbf{L}}_{A_1} \rangle \cdot (\langle \hat{\mathbf{L}}_{B_3} \rangle + \langle \hat{\mathbf{L}}_{B_4} \rangle) - \sum_i (\hat{\mathbf{N}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_i + \hat{\mathbf{h}}_i \cdot \hat{\mathbf{L}}_i),\end{aligned}\quad (2.56)$$

onde os índices i percorrem os sítios A₁, A₂, B₁, B₂, B₃ e B₄

$$\begin{aligned}
 E_{mf}^{(AA--BB)} = & E_0 + \langle \hat{\mathbf{n}}_{iA_1} \rangle \cdot (\langle \hat{\mathbf{n}}_{B_3} \rangle + \langle \hat{\mathbf{n}}_{B_4} \rangle) + \\
 & \langle \hat{\mathbf{L}}_{A_1} \rangle \cdot (\langle \hat{\mathbf{L}}_{B_3} \rangle + \langle \hat{\mathbf{L}}_{B_4} \rangle) + \\
 & J_3 \sum_{i, \vec{X}=\hat{\mathbf{n}}, \hat{\mathbf{L}}} [(\langle \hat{\mathbf{X}}_{A_1} \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{X}}_{A_2} \rangle + \langle \hat{\mathbf{X}}_{B_1} \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{X}}_{B_3} \rangle + \\
 & \langle \hat{\mathbf{X}}_{B_2} \cdot \hat{\mathbf{X}}_{B_4} \rangle)] - \sum_i [(\hat{\mathbf{N}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_i + \hat{\mathbf{h}}_i \cdot \hat{\mathbf{L}}_i)]. \quad (2.57)
 \end{aligned}$$

Na implementação das médias $\langle \hat{\mathbf{n}}_{A_1} \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{n}}_{B_3} \rangle$ e $\langle \hat{\mathbf{n}}_{A_1} \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{n}}_{B_4} \rangle$ realizaram-se as substituições $\langle \hat{\mathbf{n}}_{A_1} \rangle \rightarrow (\langle \hat{\mathbf{n}}_{A_1} \rangle + \langle \hat{\mathbf{n}}_{A_2} \rangle)/2$, $\langle \hat{\mathbf{n}}_{B_3} \rangle \rightarrow (\langle \hat{\mathbf{n}}_{B_1} \rangle + \langle \hat{\mathbf{n}}_{B_3} \rangle)/2$ e $\langle \hat{\mathbf{n}}_{B_4} \rangle \rightarrow (\langle \hat{\mathbf{n}}_{B_2} \rangle + \langle \hat{\mathbf{n}}_{B_4} \rangle)/2$, com o objetivo de não privilegiar sítios nos acoplamentos externos da célula estendida, em detrimento da simetria da cadeia AB₂.

2.4.3 Resultados Obtidos

Nas figuras 2.10 a 2.13 estão esboçados os resultados os dois tipos de frustração.

Frustração BB

As fases das cadeias de spins de Heisenberg com a topologia AB₂, exibindo este tipo de frustração, estão descritas na literatura [22, 23]. Na figura 2.14 [23] mostram-se esquematicamente as fases TD e DM; a fase FERRI (ferrimagnética) é aquela prevista pelo teorema de Lieb [20]. O diagrama de fases apresenta as transições de primeira ordem, FERRI–TD em $J_2 = 0,909$ e TD–DM no ponto $J_2 = 2$. O primeiro ponto foi obtido numericamente, usando-se a técnica de Lanczos; o segundo foi calculado analiticamente sendo, portanto, exato. A fase TD é dupla-

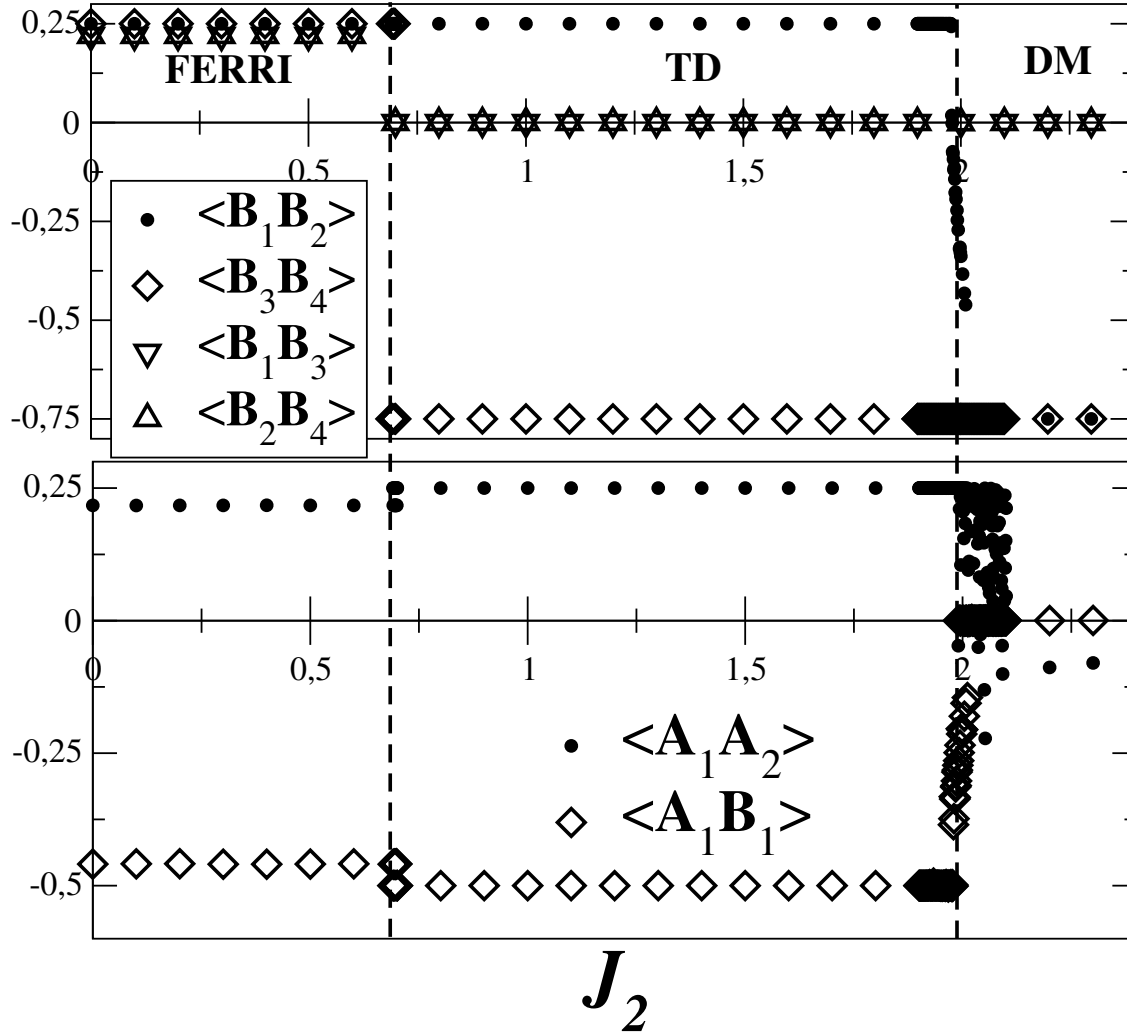


Figura 2.10: Frustração BB (intracelular). Estão indicados os valores esperados das correlações (na forma $\langle \mathbf{X} \cdot \mathbf{Y} \rangle$) relevantes entre os momentos angulares dos rotores localizados nos sítios da célula estendida). Observam-se três fases distintas: FERRI (ferrimagnética) - TD (tetrâmero-dímero) e DM (dímero-monômero).

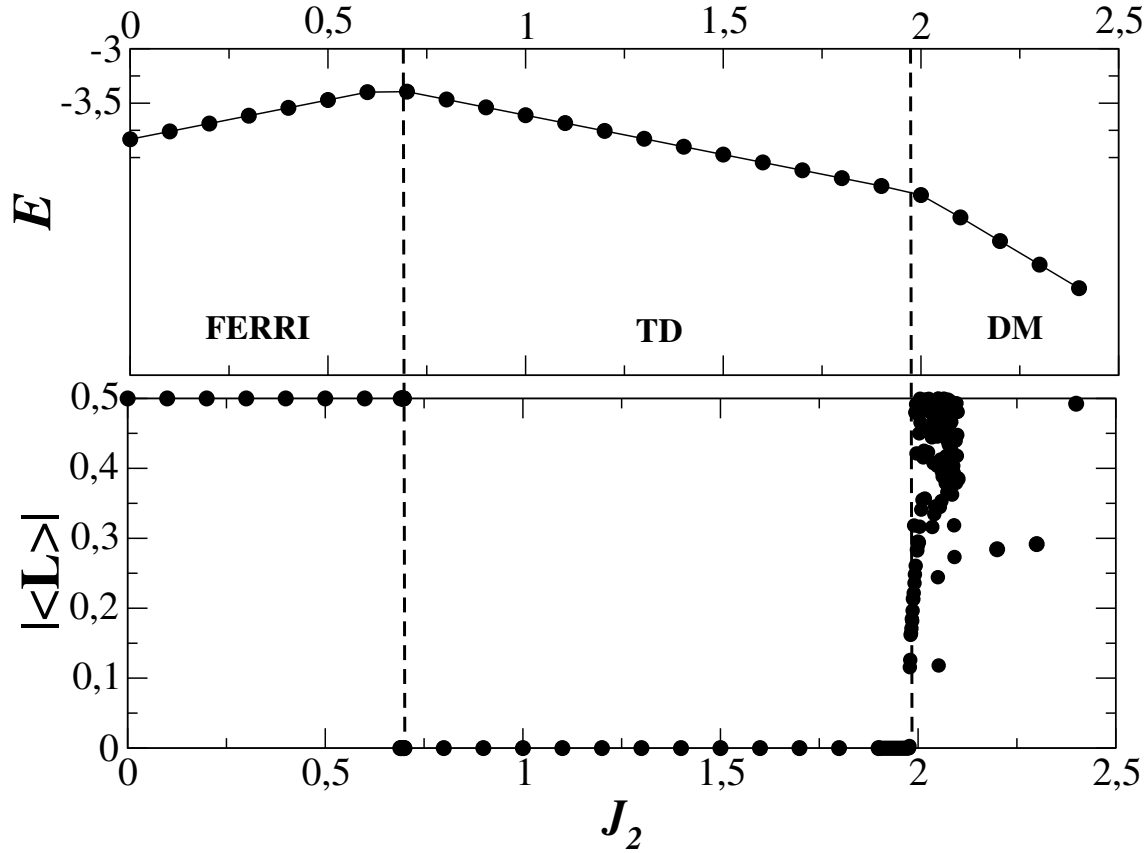


Figura 2.11: Frustração BB (intracelular). Estão indicados a energia (E) e valor esperado do momento angular total por célula unitária da cadeia AB₂, ou seja, $(|\langle \mathbf{L} \rangle| = 1/2(\langle L_x \rangle^2 + \langle L_y \rangle^2 + \langle L_z \rangle^2)^{1/2})$, onde L_μ ($\mu = x, y, z$) é a soma das seis componentes dos momentos dos respectivos sítios da célula estendida.

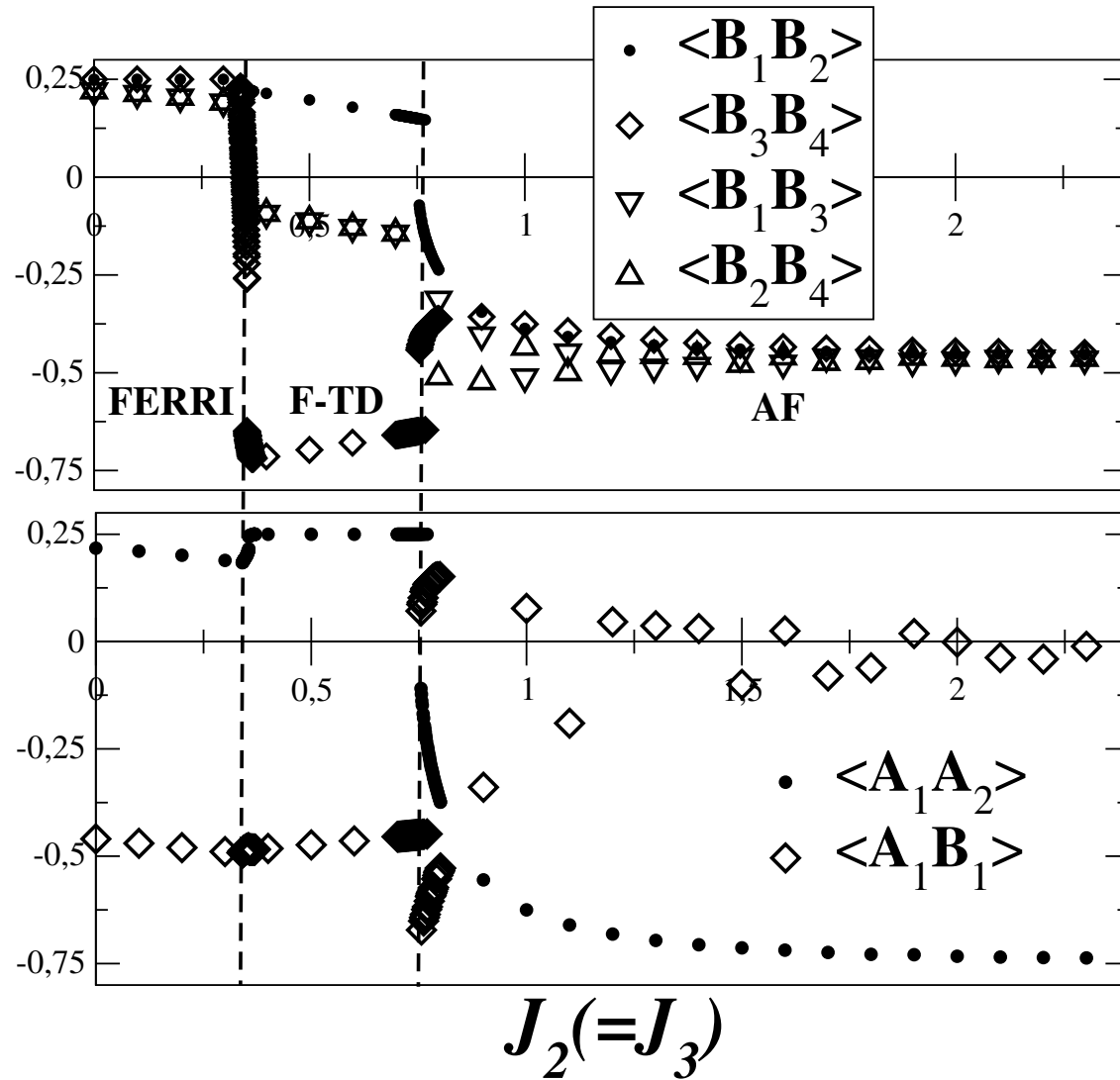


Figura 2.12: Frustração AA-BB (intra- e intercelular). Estão indicados os valores esperados das correlações (na forma $\langle \mathbf{X} \cdot \mathbf{Y} \rangle$) relevantes entre os momentos angulares dos rotores localizados nos sítios da célula estendida). Observam-se três fases distintas: FERRI (ferrimagnética) - F-TD (tetrâmero-dímero flutuante) e AF (antiferromagnética).

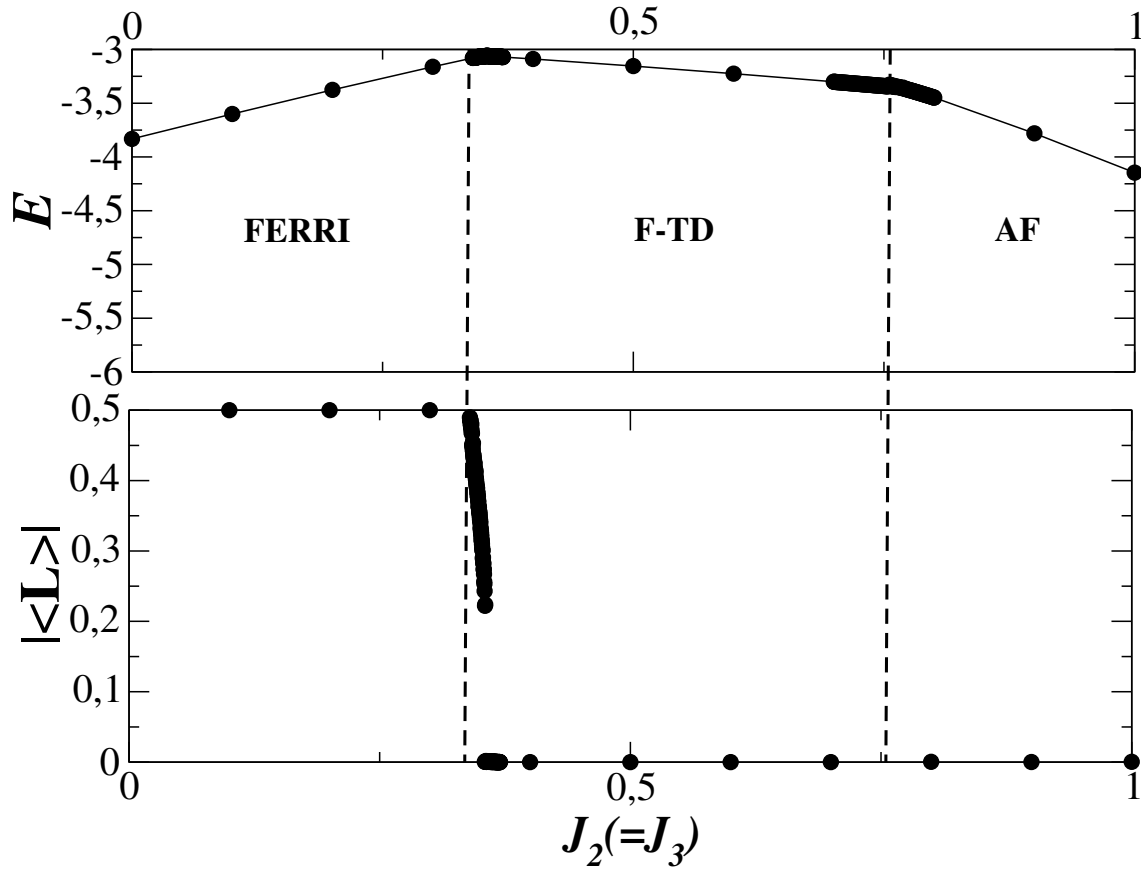


Figura 2.13: Frustração AA-BB (intra- e intercelular). Estão indicados a energia (E) e valor esperado do momento angular total por célula unitária da cadeia AB₂, ou seja, $(|\langle \mathbf{L} \rangle| = 1/2(\langle L_x \rangle^2 + \langle L_y \rangle^2 + \langle L_z \rangle^2)^{1/2})$, onde L_μ ($\mu = x, y, z$) é a soma das seis componentes dos momentos dos respectivos sítios da célula estendida.

mente degenerada, devida à quebra espontânea de simetria translacional (SBTS) e a fase DM, em virtude dos spins nos sítios A ficarem completamente livres, é exibida uma degenerescência de $2^{N/3}$.

Voltando à cadeia de rotores, constata-se, em contrapartida, pelo exame da figura 2.10 a configuração bastante clara das fases acima descritas, com a sequência correta.

Antes de se prosseguir com a análise, para melhor se acompanhar os valores das correlações constantes dos gráficos, verifica-se que para dois momentos angulares $\hat{\mathbf{L}}_1$ e $\hat{\mathbf{L}}_2$, com $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{L}}_1 + \hat{\mathbf{L}}_2$, tem-se

$$\hat{\mathbf{L}}_1 \cdot \hat{\mathbf{L}}_2 = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_1^2 - \hat{\mathbf{L}}_2^2) \quad (2.58)$$

para $l_1 = l_2 = 1/2$, resultam:

- tripleto ($l = 1$)

$$\hat{\mathbf{L}}_1 \cdot \hat{\mathbf{L}}_2 = \frac{1}{2}(2 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4}) = 0,25; \quad (2.59)$$

- singleto ($l = 0$)

$$\hat{\mathbf{L}}_1 \cdot \hat{\mathbf{L}}_2 = \frac{1}{2}(0 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4}) = -0,75; \quad (2.60)$$

Para se achar as correlações dos sítios A, faz-se o seguinte cálculo:

- se $\hat{\mathbf{L}}_{A_1} + \hat{\mathbf{L}}_{A_2} = -(\hat{\mathbf{L}}_{B_1} + \hat{\mathbf{L}}_{B_2})$ e $l_{A_1} + l_{A_2} = l_{B_1} + l_{B_2} = 1$ (singletos, fases FERRI e TD) resulta, conforme a Eq. (2.58),

$$(\hat{\mathbf{L}}_{A_1} + \hat{\mathbf{L}}_{A_2}) \cdot (\hat{\mathbf{L}}_{B_1} + \hat{\mathbf{L}}_{B_2}) = -2 \quad (2.61)$$

de onde se obtém

$$\hat{\mathbf{L}}_{A_1} \cdot \hat{\mathbf{L}}_{B_1} = \frac{1}{4}(-2) = -0,5 \quad (2.62)$$

em virtude da igualdade dos quatro produtos da Eq. (2.61).

Na fase FERRI, portanto, verifica-se que os momentos angulares nos sítios B₁/B₂ e B₃/B₄ formam tripletos, respectivamente e aqueles nos sítios A₁/A₂ também exibem um estado de tripleto, em oposição aos sítios B. Os valores esperados das correlações dos momentos dos sítios A₁/A₂, A₁/B₁, B₁/B₃ e B₂/B₄ sugerem a existência de flutuações quânticas que tendem ao desalinhamento dos momentos com relação a estes sítios. A transição de fase FERRI–TD é de primeira ordem e ocorre em $J_2 \approx 0,7$. A fase TD caracteriza-se pela ausência aparente de influências de flutuações quânticas. Conforme se vê na figura 2.12, as unidades tetraméricas se isolam completamente, as simetrias prevalecem nestas unidades, induzindo um perfeito alinhamento dos momentos. A transição de fase TD–DM ocorre no ponto $J_2 = 2$, sendo aparentemente de primeira ordem. Na fase DM, os momentos dos sítios A₁/A₂ se desacoplam totalmente, da cadeia (sítios B), exibindo valores esperados erráticos para a correlação A₁/A₂ perto da transição e uma pequena correlação negativa logo após. Portanto, todas as correlações apresentam valores de acordo com as expectativas para as fases observadas [22, 23]. Na última fase, entretanto, os resultados não estão muito claros com respeito à correlação dos momentos nos sítios A₁/A₂. O total desacoplamento dos momentos nestes sítios torna esta fase extremamente degenerada. A implementação numérica parece não captar bem o comportamento do sistema, resultando numa aparente magnetização residual, que também pode ser vista na figura 2.11.

Frustração AA–BB

Como referencial, dispõem-se de resultados de diagonalização exata para cadeias de spins AB₂ de tamanho finito (máximo de 24 sítios) [26]. Na figura 2.15 observa-se o surgimento da fase inicial ferrimagnética(FERRI) e o exame das curvas para 12, 18 e 24 sítios sugere uma transição de segunda ordem no limite termodinâmico (N grande), em um ponto que se aproxima de $J_3 = 0,34$. O spin total por célula após a transição é nulo. A curva da energia por sítio apresenta comportamento decrescente além deste ponto. Este fato por si só já indica que o estudo deste tipo de frustração via modelagem de rotores quânticos tratados conforme a sub-seção 2.3.1 (energia sempre crescente) não deve conduzir a resultados satisfatórios.

Nas cadeias de rotores, observaram-se três fases distintas, neste tipo de frustração, quando se variou J_2 ($J_2 = J_3$). As duas primeiras fases FERRI (ferrimagnética) e F–TD (tetrâmero flutuante) são análogas às do caso anterior. Entretanto, o acréscimo de interações competitivas intercelulares parece ser a origem de flutuações quânticas mais intensas, *distorcendo* as configurações, como se depreende do exame dos valores esperados cujas curvas se vêem na figura 2.12. A propósito, a denominação da segunda fase (F–TD) resume essa observação. A transição FERRI–TD ocorre no ponto $J_2 \approx 0,34$ e tem características de segunda ordem (contínua, entretanto a correlação dos momentos dos sítios B_3/B_4 mostram um *salto*, após uma variação contínua). O surgimento da fase F–TD não está claro no contexto dos dados disponíveis [26]. Como a frustração AA–BB é isotrópica, a expectativa era de não ocorrência de quebra de simetria translacional. Portanto, esta fase intermediária poder estar relacionada com o método utilizado (célula estendida, sem simetria translacional).

A terceira fase não tem analogia com o caso anterior. As correlações entre os

momentos dos sítios mostra um estado antiferromagnético (AF) em que os momentos dos sítios A assumem configuração de singletos, o mesmo ocorrendo com os sítios B, resultando um momento total médio nulo para toda a cadeia, conforme com o que se conclui do exame das correlações da figura 2.12, fazendo-se um cálculo semelhante ao da Eq.(2.62). Portanto, no limite de forte acoplamento (J_3 grande), a cadeia se desacopla em duas outras: uma linear, formada pelos sítios A (singletos) e outra, quadrada planar, formada pelos sítios B, com momentos ($l = 1/2$) opostos dois a dois. O efeito relativo das flutuações parece decrescer quando a frustração aumenta. Por outro lado, o valor esperado do momento total por célula se fixa em zero, corroborando a configuração visualizada. A transição F–TD/AF ocorre em $J_2 \approx 0,76$ e é de segunda ordem. Há, portanto, coerência com resultados existentes obtidos com a diagonalização exata para cadeias finitas de spins, sem entretanto, haver uma explicação cabal para a fase intermediária (F–TD) [26].

Implementação

A implementação desta segunda abordagem foi levada a cabo com uso de um espaço de Hilbert reduzido ($q_{\text{máx}} = q_{\text{máx}} = 1/2$), tendo em vista a premente necessidade de se agilizar o processamento via computador. Cabe, no futuro, o estudo com o emprego de espaços $q_{\text{máx}} = 3/2$ e mesmo maiores, até o limite da capacidade de processamento. Estudou-se apenas o caso particular em que os acoplamentos entre os momentos e as posições dos rotores foram iguais ($J=K$) e $M=0$. A justificativa: comodidade para a implementação. Tem-se, portanto, a prerrogativa de se escolher a melhor relação entre os diversos coeficientes, isto é, a melhor curva da superfície do diagrama de fases no espaço JKM, que se ajuste à modelagem das cadeias AB₂ spins.

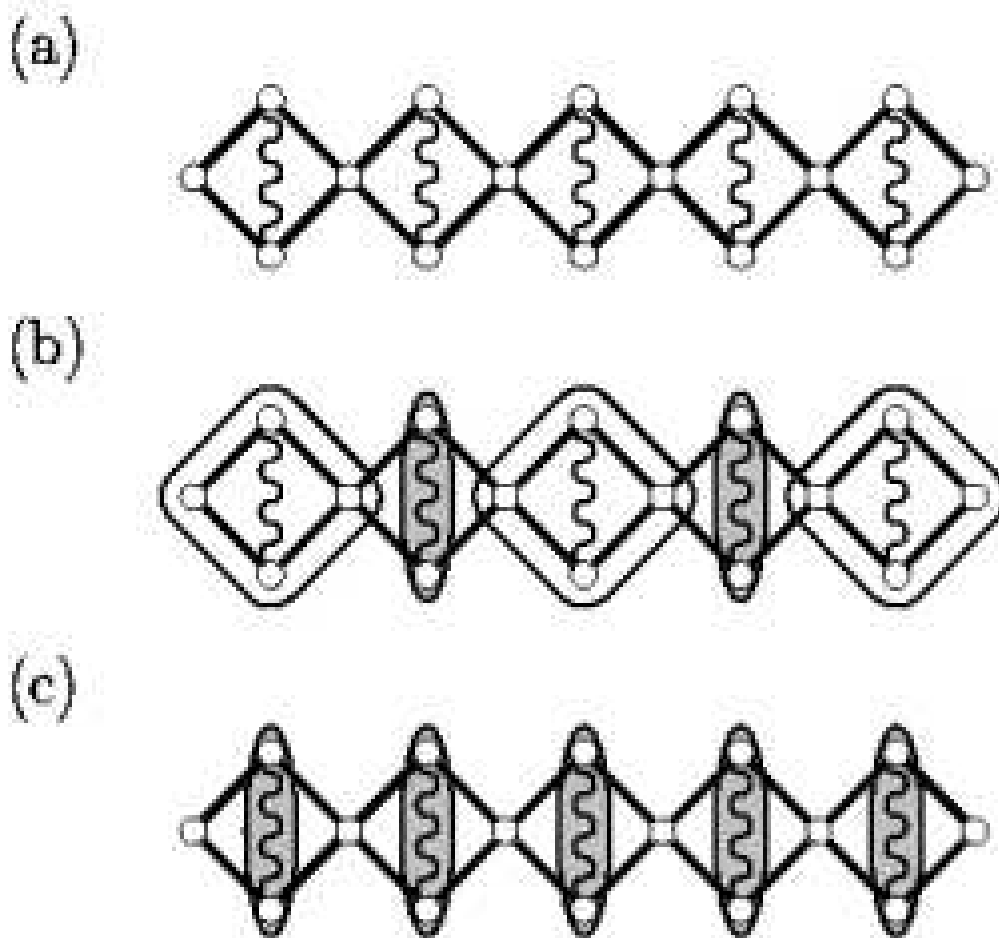


Figura 2.14: Cadeia AB_2 de spins (ou rotores). (a) A linha sinuosa mostra a frustração BB (intracelular). (b) O estado tetrâmero-dímero (TD), onde os retângulos representam tetrâmeros e as elipses, dímeros de singleto. (c) O estado dímero-monômero (DM). Reproduzido de K. Okamoto *et al.* (Figura 5) [23].

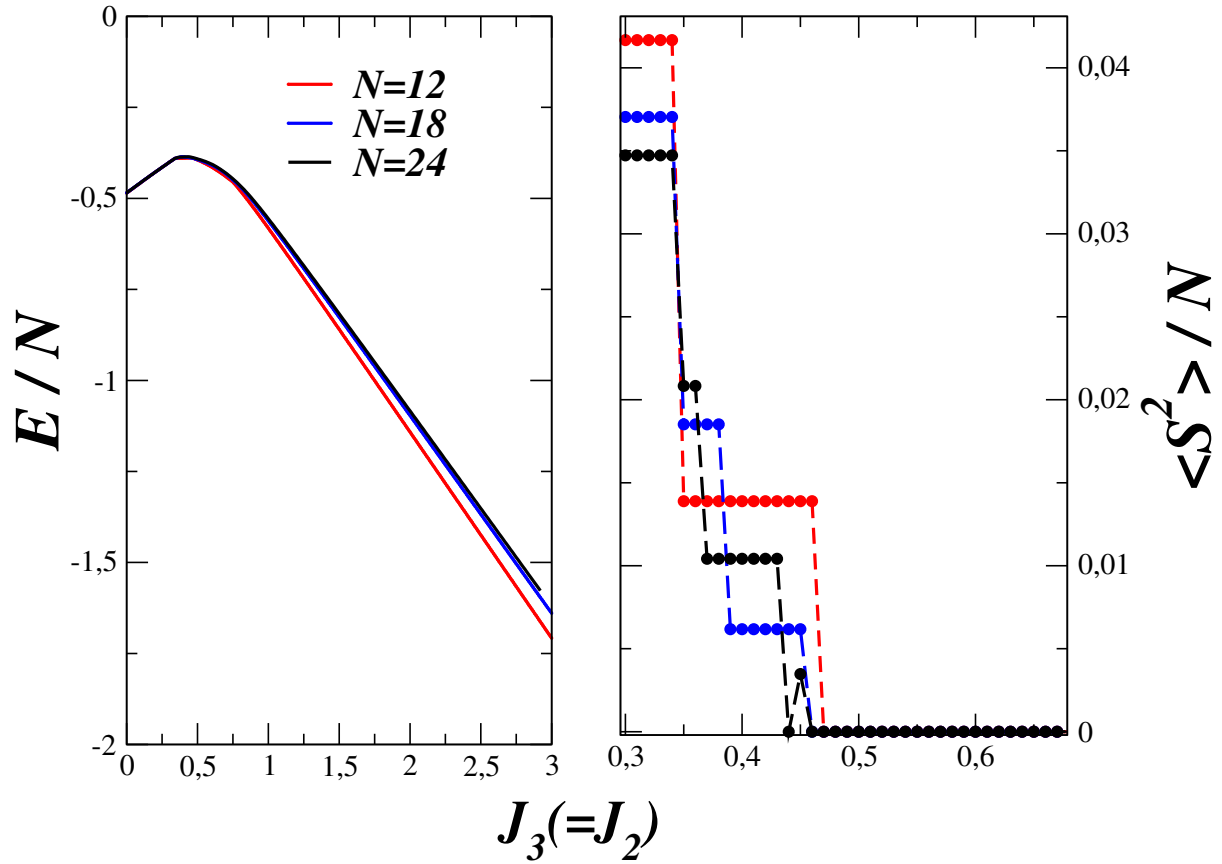


Figura 2.15: Diagonalização exata para cadeias finitas AB₂ de spins. Frustração AA–BB (intra- e intercelular). Reproduzido de R. R.Montenegro Filho [26].

Capítulo 3

Conclusões

O primeiro capítulo desta dissertação visou propiciar uma melhor compreensão dos modelos de rotores quânticos, compilando-se informações da literatura [2, 3]. Inicialmente se discorre sobre a conceituação e propriedades dos modelos com $q = 0$ (com momento angular mínimo nulo). Um mapeamento entre ferromagnetos de Heisenberg de dupla camada auxiliou a incutir uma visão mais intuitiva desses rotores. A extensão dos modelos para $q \neq 0$ (momento angular mínimo não nulo) foi contextualizada. Explicou-se a teoria de campo médio utilizada no tratamento desses modelos, fundamento deste trabalho. No que tange à representação do hamiltoniano, verificaram-se as derivações dos elementos de matrizes dos operadores $\hat{n}$ e $\hat{L}$, em espaços gerados por bases naturais (esféricos harmônicos e harmônicos de monopolo, para os casos $q = 0$ e $q \neq 0$, respectivamente). No caso dos modelos com $q \neq 0$, constatou-se divergência entre as derivações deste trabalho e aquilo que consta da literatura [3]. Atenção especial foi dedicada ao relacionamento dos rotores com sistemas compostos de spins de Heisenberg; viu-se que certos modelos de spins se reduzem a modelos de rotores quânticos com $N=3$ (dimensão do espaço). Esta

perspectiva embasou a continuação do trabalho.

No segundo capítulo, procurou-se especificamente estabelecer a ligação entre os rotores ($q = 1/2$) e as cadeias de spins de Heisenberg com topologia AB_2 . Antes, estudou-se um mapeamento já existente [18] para essas cadeias. Apesar de não se obter resultados físicos interessantes, este mapeamento incentivou a busca de métodos alternativos. Sendo assim, prosseguiu-se em busca de outras abordagens visando estabelecer a associação dos rotores com as cadeias AB_2 de spins.

Na primeira, aplicou-se a teoria de campo médio a uma cadeia com a topologia AB_2 , na qual cada sítio foi ocupado com um único rotor com $q = 1/2$, simulando o semipreenchimento eletrônico. Usou-se um hamiltoniano-tentativa distinto e desacoplado para cada sítio. O diagrama de fases (em $T=0$) produzido, para a frustração intracelular, exibiu uma fase inicial análoga à configuração prevista pelo teorema de Lieb para spins. Após uma transição de segunda ordem ($J=1$), sobreveio uma fase *canted*, que se torna paramagnética para J grande. No caso $M=0$, produziu-se uma interpretação clássica que explica totalmente as correlações (valores esperados dos produtos internos) entre os momentos angulares dos sítios. O caso $M=1$ revelou comportamento similar, com a natureza da transição aparentemente de primeira ordem e uma fase *canted* mais curta (até $J \approx 2$). Em geral, os resultados obtidos não mostraram concordância suficiente com o comportamento conhecido para as correspondentes cadeias AB_2 de spins [22, 23] e com dados de trabalhos em andamento [26]. Portanto, decidiu-se pela busca de um tratamento que logo de início pudesse produzir resultados mais claros, que motivassem, desta forma, a continuação dos estudos.

Na segunda e última abordagem, considerou-se a célula estendida - unidade formada por duas células contíguas da cadeia AB_2 de rotores. A inovação foi o

tratamento coletivo dado, quando se adotou um hamiltoniano-tentativa único para o conjunto de sítios da célula estendida, com os sítios exibindo seus respectivos campos efetivos independentes - um total de 36 parâmetros variacionais. Para a frustração intracelular, produziram-se diagramas de fase exibindo a sequência das fases: FERRI (ferrimagnética, dada pelo teorema de Lieb, no caso de spins), TD (tetramero-dímero) e DM (dímero-monômero), a natureza correta da primeira transição (FERRI-TD) e o ponto exato da ocorrência da segunda transição (TD-DM). A natureza desta última transição tem aparentemente características de primeira ordem. Obteve-se, portanto, como ponto de partida, concordância razoável com o comportamento estabelecido das correspondentes cadeias AB_2 de spins [22, 23]. Com respeito ao outro tipo de frustração em estudo (frustração intra- e intercelular), o diagrama de fases obtido com esta abordagem mostrou a sequência: FERRI, F-TD e AF, com transições de segunda ordem entre elas. Mais uma vez, os resultados mostram coerência com dados disponíveis sobre cadeias finitas, apesar da fase F-TD não ter ficado devidamente contextualizada [26].

Destarte, produziram-se resultados preliminares, mediante teoria de campo médio, que justificam investigações futuras nessa direção. Cabe salientar que este trabalho focalizou apenas o caso particular em que os acoplamentos J , K dos rotores foram todos feitos iguais e os $M = 0$, isto é, contemplou-se uma curva especial da superfície do diagrama de fases no espaço JKM , sem entretanto haver nenhuma justificativa plausível de teor físico para a escolha, senão a de facilitar a implementação. Outras relações entre estes parâmetros podem ser procuradas, com o fito de possivelmente se melhorarem os resultados.

Outro ponto importante a ser explorado é tentar aumentar o tamanho da célula estendida, com o objetivo de confirmar resultados – frustração intracelular – ou

melhorá-los – frustração intra- e intercelular. Mais precisamente, deve-se perseguir a seguinte dicotomia: *maior tamanho da célula estendida e maior dimensão do espaço de Hilbert*, cuja limitação é a capacidade de processamento disponível.

Referências Bibliográficas

- [1] C. Cohen–Tannoudji, B. Diu e F. Laloë, 1977, *Quantum Mechanics* (John Wiley & Sons).
- [2] S. Sachdev, 2001 *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press).
- [3] S. Sachdev e T. Senthil, Ann. Phys. **251**, 76 – 122 (1996).
- [4] M. Azuma, Z. Hiroi, M. Takano, K. Ishida e Y. Kitaoka, Phys. Rev. Lett.**73**, 3463 (1994); E. Dagotto e T. M. Rice, Science 271, 618 (1996); N. Elstner e R. R. P. Singh, Phys. Rev. B **57**, 7740 (1998); T. Masuda e K. Hida, J. Phys. Rev. Soc. Jpn. **59**, 2223 (1990); A. J. Mills e H. Monien, Phys. Rev. B **50**, 16606 (1994); A. W. Sandvik e D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett.**72**, 2777 (1994); A. W. Sandvik, A. V. Chubukov e S. Sachdev, Phys. Rev. B **51**, 16483 (1995); J. M. Trankada, G. Shirane, B. Keimer, S. Shamamoto e M. Sato, Phys. Rev. B **40**, 4503 (1989); J. M. Trankada, G. Shirane, B. Keimer, S. Shamamoto e M. Sato, Phys. Rev. B **46**, 5561 (1992).
- [5] G. B. Arfken e H. Weber, 1995, *Mathematical Methods for Physicists* (Academic Press).
- [6] T. T. Wu e C. N. Yang, Nucl. Phys. B **107**, 365-380 (1976).

- [7] J. J. Sakurai, S. F. Tuan (editor), 1994, *Modern Quantum Mechanics* (Adison–Wesley Publishing Company)
- [8] H. Goldstein, 1980, *Classical Mechanics* (Adison–Wesley Publishing Company)
- [9] A. Ederlyi (editor), 1953, *Higher Transcendental Functions (Bateman Project)* (McGraw–Hill Book Company, Inc)
- [10] A. R. Edmonds, 1960, *Angular Momentum in Quantum Mechanics* (Princeton University Press)
- [11] H. B. Callen, 1985, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics* (John Wiley & Sons, Inc.)
- [12] R. P. Feynman, 1972, *Statistical Mechanics—A Set of Lectures* (The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc)
- [13] *Numerical Recipes Inc: The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press) (1988–1992)
- [14] C. Lanczos, J. Res. Natl. Bur. Stand. **45**, 255 (1950)
- [15] J. Silvestre e R. Hoffmann, Inorg. Chem. **24**, 4108 (1985); M. Drillon *et al.*, J. Magn. Magn Mater. **128**, 83 (1993); A. Shengelaya, G. I. Meijer, J. Karpinski, G.-m Zhao, H. Schwer, E. M. Kopnin, C. Rossel e H. Keller, Phys. Rev. Lett. **80**, 3626 (1998); P. Horsch, M. Sofin, M. Mayr e M. Jansen, Phys. Rev. Lett. **94**, 076403 (2005); H. Kikuchi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**, 227201 (2005).
- [16] A. M. S. Macedo, M. C. dos Santos, M. D. Coutinho-Filho e C. A. Macedo, Phys. Rev. Lett. **74**, 1851 (1995); G.-S. Tian e T.-H. Lin, Phys. Rev. B **53**,

- 8196 (1996); G. Sierra, M. A. Martín-Delgado, S.R. White, D. J. Scalapino e J. Dukelsky, Phys. Rev. B **59**, 7973 (1999); R. R. Montenegro-Filho, M. D. Coutinho-Filho, Physica. A (article in press), cond-mat/0503058 (2005).
- [17] F. C. Alcaraz e A. L. Malvezzi, J. Phys. A: Math. Gen. **30**, 767 (1997); T. Nakanishi e S. Yamamoto, Phys. Rev. B **65**, 214418 (2005).
- [18] E. P. Raposo e M. D. Coutinho-Filho, Phys. Rev. Lett. **78**, 4853 (1997); *ibid* Phys. Rev. B **59**, 14384 (1999).
- [19] C. Vitoriano, M. D. Coutinho-Filho e E. P. Raposo, J. Phys. A: Math. Gen. **35**, 9049 (2002); C. Vitoriano, F. B. de Brito, E. P. Raposo e M. D. Coutinho-Filho, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **374**, 185 (2002);
- [20] E. H. Lieb e D. Mattis, J. Math. Phys. **3**, 749 (1962); E. H. Lieb, Phys. Rev. Lett. **62**, 1201 (1989).
- [21] Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10**, 159 (1963); J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. **A276**, 238 (1963).
- [22] T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Hikiyara, Y. Takahashi e M. Kaburagi, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 332 (2000); K. Sano e K. Takano, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 2710 (2000); K. Okamoto, T. Tonegawa, Y. Takahashi e M. Kaburagi, J. Phys.: Condens. Matter **11**, 10485 (1999); K. Takano, K. Kubo e H. Sakamoto, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 6405 (1996); H. Niggemann, G. Uimin e J. Zittartz, J. Phys.: Condens. Matter **9**, 9031 (1997).
- [23] K. Okamoto, T. Tonegawa e M. Kaburagi, J. Phys.: Condens. Matter **15**, 5979 (2003).

-
- [24] H. Niggemann, G. Uimim e J. Zittartz, J. Phys.: Condens. Matter **10**, 5217 (1998).
- [25] A. Honecker e A. Läuchli, Phys. Rev. B **63**, 174407 (2001); T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Hikihara, Y. Takahashi, M. Kaburagi, J. Phys. Chem. Solids **62**, 125 (2001).
- [26] R. R. Montenegro-Filho, *Diagonalização exata da cadeia AB_2 para segmentos finitos com máximo de 24 sítios, trabalho em andamento*, (2005)