

ANTÔNIO RIBEIRO DE MOURA

ESTUDO ANALÍTICO DE SISTEMAS DE HEISENBERG
BIDIMENSIONAIS DOPADOS E COM ACOPLAMENTOS
ANISOTRÓPICO E BIQUADRÁTICO

Tese apresentada à Universidade Federal
de Viçosa, como parte das exigências do
Programa de Pós-Graduação em Física,
para obtenção do título de *Doctor Scien-
tiae*.

VIÇOSA
MINAS GERAIS-BRASIL
2011

ANTÔNIO RIBEIRO DE MOURA

ESTUDO ANALÍTICO DE SISTEMAS DE HEISENBERG
BIDIMENSIONAIS DOPADOS E COM ACOPLAMENTO
ANISOTRÓPICO E BIQUADRÁTICO

Tese apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Doctor Scientiae*.

APROVADA: 08 de dezembro de 2011.

Prof. Winder A. de Moura Melo
(Co-orientador)

Prof. Marcelo Barbosa da S. Neto

Prof. Daniel H. Theodoro Franco
(Co-orientador)

Prof. Gary W. Wysin

Prof. Afrânio Rodrigues Pereira
(Orientador)

AGRADECIMENTOS

À minha mãe Sônia e meus irmãos Mário, Flávio e Camila pelo apoio durante todos esse anos.

À todo o Departamento de Física da Universidade Federal de Viçosa, principalmente ao meu orientador Afrânio Rodrigues Pereira e co-orientadores Winder Alexander de Moura-Melo e Daniel Heber Theodoro Franco pela orientação não apenas no desenvolvimento desse trabalho mas em toda minha vida acadêmica.

Ao professor Antônio Sérgio Teixerias Pires pelos e-mails e conversas que me foram de imensa ajuda.

Às minhas amigas Marcela e Raquel pela paciência e à todos os colegas do Kung Fu em especial ao Robson, Cayo, Caio e Samuel que dividiram comigo o gosto pela música.

À FAPEMIG pelo suporte financeiro que me permitiu concluir esse trabalho.

Sumário

LISTA DE FIGURAS	v
RESUMO	vii
ABSTRACT	viii
Introdução	1
1 Aspectos gerais	5
1.1 A hamiltoniana de Heisenberg	5
1.2 O ferromagneto unidimensional	10
1.3 O antiferromagneto unidimensional	12
2 O modelo sigma não-linear $O(3)$	15
2.1 Introdução	15
2.2 A aproximação contínua para o magnetismo	18
2.3 A fase de Berry e o gap no espectro de energia	20
2.4 Soluções topológicas	23
3 Interação entre spinons via energia de Casimir	33
3.1 Modelo sigma não-linear anisotrópico	34
3.2 Perturbações quânticas	37
4 Influência de defeitos não magnéticos nas soluções topológicas	42
4.1 O MSNL dopado	43

5	Bósons de Schwinger	50
5.1	Representações bosônicas	50
5.2	Representação via bósons de Schwinger $SU(2)$	52
5.3	Representação via bósons de Schwinger $SU(3)$	54
5.4	Solução para o antiferromagneto	54
6	O modelo biquadrático anisotrópico	60
6.1	A fase de D pequeno	61
6.2	A fase de D grande	67
7	O modelo biquadrático na rede hexagonal de honeycomb	73
7.1	Descrição bosônica do modelo	75
7.2	Soluções em temperatura nula	81
7.3	Resultados para baixas temperaturas	85
	Conclusões e perspectivas	89
	A Transformação de Hubbard-Stratonovich	92
	B Transformação de Bogoliubov	94
	Referências	96

Lista de Figuras

1	Grafeno.	2
1.1	O alinhamento ferromagnético	6
1.2	O alinhamento antiferromagnético	6
1.3	Estado de Néel e líquido de spin bidimensionais	9
1.4	Frustração na rede triangular	9
1.5	Estado excitado para o ferromagneto	11
1.6	A cadeia antiferromagnética	13
2.1	Mapeamento topológica entre a xícara e a rosquinha	27
2.2	Projeção estereográfica	28
2.3	Soluções do tipo Skyrmion	30
2.4	Skyrmion em filmes finos	31
3.1	Diferença entre um skyrmion e o par vórtice-antivórtice	37
3.2	Energia em função de R para $-1 < \lambda < 0$	39
3.3	Energia para diversos tamanhos L do sistema	40
3.4	Energia em função de R para $\lambda > 0$	41
4.1	Carga topológica em função do deslocamento s	47
4.2	Frequência de oscilação em função de R	48
4.3	Frequência de oscilação em função de ρ	49
6.1	Condensação em função de D na fase de D pequeno	66
6.2	Condensação em função de J_2 na fase de D pequeno	67
6.3	Energia do modelo biquadrático anisotrópico	67

6.4	Gap de energia em função de D	71
6.5	Valores críticos D_c em função de J_2	72
7.1	A colmeia de abelhas e rede de kagomé	74
7.2	A rede de <i>honeycomb</i> e a zona de Brillouin	75
7.3	Parâmetros A e B para a rede <i>honeycomb</i>	82
7.4	Condensação em função de J_2	83
7.5	Velocidade das ondas de spin	84
7.6	Valor crítico S_c em função de J_2	85
7.7	Gap de energia para temperaturas finitas	88

RESUMO

MOURA, Antônio Ribeiro de, Universidade Federal de Viçosa, dezembro de 2011. **Estudo analítico de sistemas de Heisenberg bidimensionais dopados e com acoplamentos anisotrópico e biquadrático.** Orientador: Afrânio Rodrigues Pereira Co-Orientadores: Winder Alexander de Moura-Melo e Daniel Heber Theodoro Franco.

No trabalho desenvolvido estudamos alguns modelos magnéticos por meio de duas abordagens diferentes. Nos dois primeiros foi usada a aproximação contínua para o antiferromagnetismo dada pelo modelo sigma não-linear $O(3)$ (MSNL). Tal modelo é semelhante à teoria de Yang-Mills e possui como soluções configurações de origem topológica, os chamados skyrmions. Inicialmente estudamos como um termo anisotrópico (semelhante à uma anisotropia magnética) influencia nas soluções. Notamos que devido à perturbações quânticas surgem interações no campo de spin que não existem no nível semi-clássico. No outro trabalho verificamos que a inclusão de uma impureza não magnética cria um potencial do tipo harmônico entre o skyrmion e o defeito, que leva ao aprisionamento da solução topológica. Tal característica tem se mostrado importante para diversas aplicações em materiais magnéticos. Também estudamos outros dois modelos por meio das transformações bosônicas de Schwinger. Mostramos que devido ao termo de anisotropia para o modelo biquadrático na rede quadrada ocorre a separação entre uma fase ordenada e outra desordenada. Por último, aplicamos a teoria bosônica para o modelo biquadrático na rede hexagonal de honeycomb e fazemos um estudo tanto para $T = 0$ quanto baixas temperaturas.

ABSTRACT

MOURA, Antônio Ribeiro de, Universidade Federal de Viçosa, Dezember, 2011. **Analytical study of bidimensional Heisenberg systems doped and with anisotropic and biquadratic couplings.** Advisor: Afrânio Rodrigues Pereira Co-Advisors: Winder Alexander de Moura-Melo and Daniel Heber Theodoro Franco.

In the work development we have studied magnetic models by two different approaches. In the two first models was used the continuum approximation to anti-ferromagnetic given by $O(3)$ non-linear sigma model (NLSM). This model is similar to the Yang-Mills theory and it is well known that it supports topological configurations as solutions, the so-called skyrmions. Initially we have studied how an anisotropic term (similar to magnetic anisotropy) influences in the solutions. We have noted that quantum perturbations are responsible for spin field interactions that do not exist in a semi-classical limit. In another work, we verified that the inclusion of a non-magnetic impurities creates a harmonic potential interaction between the skyrmion and the defect. The topological solution is restrained by defect and that capture is important to many applications in magnetic devices. We also have studied other two models by Schwinger bosonic transformations. In one of them, it has shown a separation between an ordered and disordered phases to biquadratic model due to an anisotropic term. Finally, we have applied the bosonic theory to biquadratic model in a honeycomb hexagonal lattice to $T = 0$ and low temperatures.

Introdução

Podemos dizer com bastante certeza que física da matéria condensada (FMC) é uma das áreas mais promissoras e atraentes da física atual. Inúmeros avanços tecnológicos e científicos se devem ao estudo de novos materiais e suas propriedades. Como exemplo, podemos citar o mais novo candidato a revolucionar a indústria eletrônica, o grafeno. O grafeno é uma material bidimensional formado por átomos de carbono dispostos em uma rede hexagonal do tipo *honeycomb* (algo como a estrutura de uma colmeia de abelhas). Embora os primeiros trabalhos sobre o grafeno datem do final da década de 40 (Wallace [1] foi o primeiro a escrever sobre a estrutura de bandas e a mostrar o comportamento semi-metálico incomum do grafeno) apenas recentemente foi possível a fabricação de tal material. O grafeno tem se mostrado muito promissor, não só pelo seu potencial para ser o substituto do silício na fabricação de transistores (modelos de 100 GHz já foram construídos pela IBM [2]) mas também por ser um ótimo laboratório para teorias ainda não comprovadas. O paradoxo de Klein é uma dessas teorias. Em 1929, Oscar Klein [3] obteve um resultado surpreendente ao estudar o problema do tunelamento de partículas no limite de altas energias. Usando a equação de Dirac, Klein mostrou que quanto maior a diferença entre o potencial e a energia de repouso da partícula (mc^2) maior será a taxa de transmissão através da barreira. No limite no qual as partículas envolvidas não tem massa, é possível verificar o paradoxo de Klein para um potencial finito (para partículas massivas, a taxa de transmissão máxima ocorre para um potencial infinito). No caso do grafeno, devido ao potencial periódico da rede, os elétrons têm uma massa efetiva nula e portanto ele é um meio ideal para se testar a hipótese de Klein. O grafeno também tem sido usado como um meio para testar a teoria gravitacional em superfícies curvas. Até pouco tempo

experimentos dessa espécie só eram imagináveis de realização em escalas astronômicas mas em certas circunstâncias eles podem ser reproduzidas dentro de um laboratório. A física de um cone formado através do corte de um setor circular de uma folha bidimensional de grafeno é descrita pelas mesmas equações da teoria gravitacional de Einstein. É realmente incrível pensar na possibilidade de reproduzir eventos estelares na ponta do lápis.

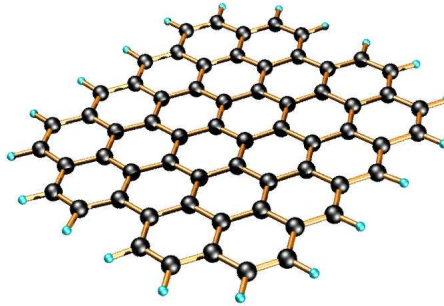


Figura 1: Estrutura hexagonal dos átomos de carbono no grafeno. Essa estrutura denominada *honeycomb* tem geometria semelhante a uma colmeia de abelha.

Mas não é somente como laboratório para outras teorias que a FMC sobrevive. Muitas vezes, outras áreas tomam emprestados conceitos desenvolvido em matéria condensada e os aplicam em teorias mais 'elementares'. Vejamos o caso do mecanismo de Anderson-Higgs que explica porque fótons não tem massa enquanto as partículas mediadoras da força eletrofraca, Z^0 , W^- e W^+ são massivas. Segundo essa teoria, o bóson de Higgs, cuja comprovação experimental pelo LHC é esperada para os próximos anos, é o responsável por essa diferença. Embora a teoria de Anderson-Higgs descreva uma questão fundamental e de extrema importância, ela é baseada no efeito Meissner da teoria BCS para a supercondutividade. Outro exemplo entre a conexão de física de altas energia e matérias condensada é a semelhança entre a teoria de Yang-Mills e o modelo sigma não-linear $O(3)$. Enquanto a primeira descreve a interação eletrofraca, a segunda é usada para explicar sistemas ferro e antiferromagnéticos. Podemos esperar portanto que mesmo modelos simples quando aplicados em física da matérias condensada forneçam importantes ideias para a solução de problemas mais complicados.

Em especial, sistemas magnéticos são de grande interesse para a física da matéria

condensada. Ao contrário de outras áreas de pesquisa, como supercondutividade, que ainda está longe de ser amplamente aplicada, dispositivos magnéticos são encontrados em praticamente todo tipo de aparelho eletrônico. Com o crescente uso da mídia digital, a demanda por dispositivos de armazenamento magnético é crescente, o que tem contribuído para enormes incentivos financeiros nessa pesquisa. Por outro lado, sistemas magnéticos também têm se mostrado úteis na área médica. Recentemente, um grupo de pesquisadores americanos desenvolveram um tratamento para um tipo específico de câncer que tem como base sistemas magnéticos [4]. Após a injeção de microdiscos magnéticos nas células cancerígenas, os médicos aplicaram um campo magnético oscilante que em poucos minutos foi capaz de matar quase a totalidade das células doentes. Esse trabalho pioneiro é baseado na existência de vórtices magnéticos nos microdiscos, fato comumente estudado pelos físicos da matéria condensada há mais de uma década. Do ponto de vista teórico sistemas magnéticos também se mostram atraentes. Vários fenômenos em teoria quântica de campos são facilmente observados e estudados sob o olhar do magnetismo em matéria condensada. Podemos citar por exemplo a quebra espontânea de simetria $O(3)$ no ferromagneto que origina os mágnons (famosos modos de Goldstone) ou mesmo as transições entre fases com ordem de longo alcance e fases desordenadas.

Nos próximos capítulos serão apresentados quatro trabalhos desenvolvidos em sistemas magnéticos de interesse para a comunidade científica. Os dois primeiros foram realizados por meio de uma aproximação contínua do antiferromagnetismo, o conhecido modelo sigma não-linear e tem como objetivo estudar as soluções topológicas do modelo assim como o efeito de impurezas magnéticas e termos de anisotropia. Nos outros dois trabalhos é adotado o formalismo dos bósons de Schwinger para identificar as transições de fase quântica no modelo biquadrático anisotrópico e os aspectos principais do modelo biquadrático em uma rede não convencional, no caso a *honeycomb* hexagonal. A divisão dos capítulos é como segue. No primeiro capítulo é dada uma introdução sobre sistemas ferro e antiferromagnéticos incluindo os métodos mais utilizados em seu tratamento e as principais características de tais sistemas. No capítulo 2 é apresentado em mais detalhes o modelo sigma não-linear, suas soluções e aplicações em especial

nos sistemas antiferromagnéticos. O terceiro capítulo é dedicado ao estudo do modelo sigma não-linear acrescentado de um termo anisotrópico, que como veremos influencia drasticamente no comportamento geral do sistema. No capítulo seguinte é estudado como defeitos não magnéticos interagem com as soluções topológicas para antiferromagnetos bidimensionais. No capítulo 5 é feita uma revisão sobre representações bosônicas, de Schwinger em especial, e os métodos utilizados juntamente com tais representações para a solução dos problemas apresentados nos dois capítulos seguintes. O modelo biquadrático anisotrópico é tema do capítulo 6 enquanto o modelo biquadrático na rede *honeycomb* é tratado no capítulo 7. Finalmente são apresentadas as conclusões e perspectivas para trabalhos futuros.

Capítulo 1

Aspectos gerais

Nesse capítulo trataremos de alguns aspectos gerais a respeito dos sistemas ferro e antiferromagnéticos, em especial o segundo caso. Vamos analisar alguns termos extras que podem ser adicionados à hamiltoniana e também o papel do tipo de rede (quadrada, triangular, hexagonal, entre outras) sobre o sistema. Veremos as diferenças entre as soluções clássicas e quânticas e como o spin influencia fortemente o caso quântico, principalmente em baixas dimensões. Será apresentada uma rápida revisão sobre os principais métodos para o tratamento do magnetismo em matéria condensada (os métodos mais utilizados durante o trabalho são tratados em mais detalhes nos capítulos posteriores) bem como os teoremas de maior relevância para nossa pesquisa.

1.1 A hamiltoniana de Heisenberg

Vamos começar pelo ponto comum em todos trabalhos sobre magnetismo: a hamiltoniana de Heisenberg, descrita pela equação:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.1)$$

na qual a soma $\langle i, j \rangle$ é feita sobre vizinhos (geralmente sobre primeiros vizinhos, porém casos com interações mais distantes também podem ser considerados) e J_{ij} é a chamada constante de troca (*exchange*) e mede a intensidade da interação entre os spins. Juntamente com a hamiltoniana de Heisenberg é imposto um vínculo não-linear sobre os

spins do tipo $S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2$ (quando consideramos as três componentes do spin, porém em alguns casos o vínculo é desprovido de uma das componentes, em geral S^z). Grande parte da diversidade dos fenômenos observados em sistemas magnéticos provêm da não-linearidade desse vínculo, assim como a complexidade que os acompanha. Na maioria dos casos (inclusive nos trabalhos apresentados nos próximos capítulos) é costume adotar um valor constante de forma que $J_{ij} = J$. Valores negativos de J caracterizam sistemas ferromagnéticos que tem a energia minimizada quando os spins (imaginados como vetores no caso clássico) se alinham numa mesma direção, como é mostrado na figura (1.1).



Figura 1.1: No alinhamento ferromagnético todos os spins apontam na mesma direção.

Já para valores positivos de J temos o antiferromagnetismo, para o qual a energia alcança o valor mínimo quando os spins estão alinhados antiparalelamente (no nível clássico), figura (1.2).



Figura 1.2: No caso antiferromagnético, o alinhamento entre sítios vizinhos é antiparalelo.

No formalismo quântico, interpretamos as quantidades \mathbf{S}_i como operadores de spin atuando sobre funções de onda porém em uma aproximação semi-clássica eles podem ser identificados como vetores do tipo $\mathbf{S} = (\text{sen}\theta\cos\phi, \text{sen}\theta\text{sen}\phi, \cos\theta)$ com θ e ϕ sendo os ângulos polar e azimutal, respectivamente. À hamiltoniana (1.1) podem ser adicionados termos extras que desempenham papéis de correção, novas interações entre spins e/ou campos magnéticos e anisotropias. Abaixo listamos alguns deles:

- Campo magnético: $\sum_i \mathbf{B} \cdot \mathbf{S}_i$.

Esse termo inclui a interação dos spins com um campo magnético externo, \mathbf{B} ,

geralmente uniforme para o caso ferromagnético e alternado (*staggered*) no caso antiferromagnético. Como principal efeito, ele cria um alinhamento entre os spins provocando uma magnetização resultante não nula.

- Anisotropia: $J \sum_{\langle i,j \rangle} \lambda S_i^z S_j^z$.

Dependendo do valor de λ obtemos diversos modelos, cada um com características próprias. Para $\lambda = -1$ e o vínculo $S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2$ temos o modelo *XY* (famoso por suas soluções tipo vórtice e a transição de Berezin-sky–Kosterlitz–Thouless [5,6]), e quando o vínculo é dado por $S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2$ temos o rotor planar cujo spin tem apenas duas componentes e não apresenta nenhuma dinâmica. Outros casos possíveis são $\lambda < 0$, o chamado eixo-fácil com tendência dos spins a se alinharem com o eixo z , e o plano-fácil com um alinhamento no plano xy quando $0 < \lambda < 1$.

- Anisotropia de sítio único: $\sum_i D(S_i^z)^2$.

Termo importante por descrever uma transição de fase quântica entre regiões com gap e sem gap. Geralmente considerado em sistemas com spin-1, pois para spin 1/2 temos apenas dois auto-estados possíveis (up e down) que produzem o mesmo desdobramento da energia. Será visto em detalhes no capítulo 6, o qual é dedicado ao estudo de sistemas biquadráticos com anisotropia de sítio único.

- Dzyaloshinskii-Moriya: $\sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{D} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j)$.

É um termo de correção que tem origem na interação spin-órbita cuja presença quebra a simetria de rotação do modelo de Heisenberg [7, 8]. Trabalhos experimentais têm mostrado que o termo de Dzyaloshinskii-Moriya é responsável pela observação de skyrmions (soluções de origem topológica) em filmes finos [9]. Também tem se mostrado importante na procura por estados de líquido de spin (que não apresentem ordenamento mesmo em temperatura nula) bidimensionais [10, 11]. Em geral a constante \mathbf{D} é pequena quando comparada ao J , porém existem casos no qual esse termo é mais importante que a própria interação de troca como por exemplo no composto $\text{RbCoCl}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ onde $J = 0$ e $DS^2 = 59K$. Muitas vezes o termo de Dzyaloshinskii-Moriya é tratado através de represen-

tações bosônicas embora também existam trabalhos teóricos realizados por meio de um modelo contínuo.

- Termo biquadrático: $J_{bq} \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2$.

Termo responsável por acrescentar diversas fases ao modelo de Heisenberg. A sua influência é mais conhecida em sistemas unidimensionais [12–18] enquanto o caso bidimensional ainda apresenta diversas lacunas [19–21]. É comum expressar as interações bilinear (Heisenberg) e biquadrática respectivamente como $J_1 = J \cos \theta$ e $J_2 = J \sin \theta$. Para $\theta = 0$ temos o antiferromagneto de Heisenberg, já para $\theta = \pi$ recuperamos o ferromagneto. No caso em que $\tan \theta = 1/3$ é possível resolver o sistema exatamente (em uma dimensão) e tal modelo é conhecido como AKLT [22]. Uma análise mais detalhada desse termo será dada no capítulo 6.

O tipo de rede que conecta os spins vizinhos é outro tópico importante no estudo de sistemas magnéticos. Para modelos bidimensionais com acoplamento ferromagnético, o tipo de rede é irrelevante uma vez que classicamente o estado fundamental é dado pelo alinhamento conjunto de todos spins. Se o spin em um sítio qualquer i aponta na direção $+z$, a energia será minimizada quando todos seus vizinhos apontarem na mesma direção seja a rede quadrada, triangular, hexagonal ou qualquer outra. No caso antiferromagnético a situação já não é tão simples. Na rede é quadrada, por exemplo, se o spin no sítio i aponta na direção $+z$ é possível colocar todos quatro vizinhos na direção $-z$ e os vizinhos destes na direção $+z$, de modo que no estado fundamental (lembrando novamente que estamos tratando um caso semi-clássico) temos duas sub-redes: uma composta pelos spins que apontam na direção $+z$ e outra pelos spins que apontam na direção oposta. Toda rede que torna possível esse tipo de configuração é chamada bipartite e a configuração de menor energia é denominada estado de Néel.

Porém, existem redes nas quais esse tipo de configuração não acontece. Na rede triangular mostrada figura (1.4) não é possível que os três spins se alinhem antiparalelamente. Nesse caso acontece uma frustração na rede que tende a desordenar o sistema, o que poderia levar ao estado de líquido de spin (quando o sistema é desordenado mesmo

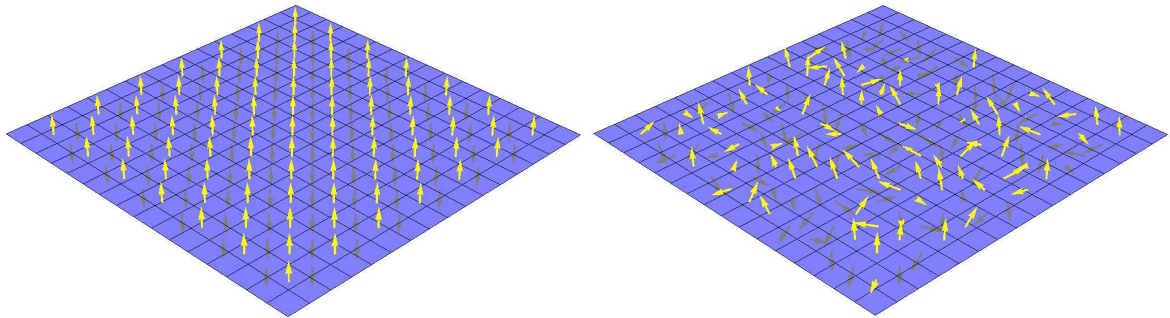


Figura 1.3: O estado de Néel bidimensional (à esquerda) e um líquido de spin (à direita). O estado de líquido é característico por ser desordenado mesmo em temperatura nula.

em temperatura zero). Note que nesse caso o estado fundamental é degenerado uma vez que existem seis configurações diferentes com a mesma energia, como mostrado na figura (1.4). Na verdade, o antiferromagneto na rede triangular é ordenado em $T = 0$ embora não possua uma configuração de Néel, mas outras redes frustradas (por exemplo, a rede de kagomé) juntamente com interações além dos primeiros vizinhos têm sido cotadas como candidatas a suportar um estado de líquido de spin bidimensional [23, 24].



Figura 1.4: Exemplo de uma rede frustrada. Na esquerda, a impossibilidade dos três spins se alinhem antiparalelamente entre si e na direita os vários estados degenerados da rede triangular.

Existem diversos métodos para se estudar magnetismo em física da matéria condensada, dentre os quais podemos citar as representações fermiônicas (transformação de Jordan-Wigner) e bosônicas (Holstein-Primakoff, Dyson-Maleev, Schwinger), os métodos numéricos (DMRG), modelos contínuos (estados coerentes, modelo sigma

não-linear), campo médio (aproximação de ondas de spin, SCHA) e simulações computacionais (Monte Carlo, Runge Kutta, Suzuki-Trotter) como exemplos. No trabalho desenvolvido focaremos principalmente no formalismo contínuo por meio do modelo sigma não-linear $O(3)$ e na representação bosônica de Schwinger. Métodos computacionais também fizeram parte do trabalho, porém não levaram a resultados conclusivos.

1.2 O ferromagneto unidimensional

O modelo mais simples para a hamiltoniana (1.1) é o ferromagneto unidimensional ($J < 0$). Classicamente, o estado de menor energia é aquele no qual todos os spins estão alinhados na mesma direção, como mostrado na Figura (1.1), o que fornece $E_0^{\text{cl}} = JNS^2$ como a energia do estado fundamental. O tratamento quântico é feito substituindo as componentes do vetor \mathbf{S}_i pelos operadores de spin correspondentes. Por meio dos operadores $S^+ = S^x + iS^y$ e $S^- = S^x - iS^y$ a hamiltoniana é escrita como:

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[S_i^z S_j^z + \frac{1}{2}(S_i^- S_j^+ + S_i^+ S_j^-) \right]. \quad (1.2)$$

Esperamos que o estado clássico (no qual todos spins estão alinhados) seja também solução para o estado fundamental no caso quântico. De fato, o estado definido como $|\Psi_0\rangle = |\uparrow_1, \uparrow_2, \dots, \uparrow_N\rangle$ que corresponde a situação na qual cada spin possui o valor máximo para o operador S^z (a direção para a qual os spins apontam pode ser escolhida aleatoriamente devido a invariância sobre rotações apresentada pelo modelo) é um autoestado para a hamiltoniana (1.2) com energia $E_0 = JN(s\hbar)^2$ (somente o termo $S_i^z S_j^z$ contribui para a energia pois os operadores $S_i^- S_j^+$ e $S_i^+ S_j^-$ resultam em valores nulos para qualquer estado). Pode se mostrar que essa é a menor energia alcançada pelo sistema o que comprova que o estado $|\Psi_0\rangle$ é realmente o estado fundamental do ferromagneto unidimensional. Observe que raciocínio apresentado vale para sistemas com qualquer valor de spin ($S = 1/2, 1, 3/2, \dots$) o que não será verdade no caso do antiferromagneto.

Uma vez encontrado o estado fundamental, o próximo passo é determinar quais são os estados excitados. Pode se imaginar que o estado de mais baixa energia, acima do

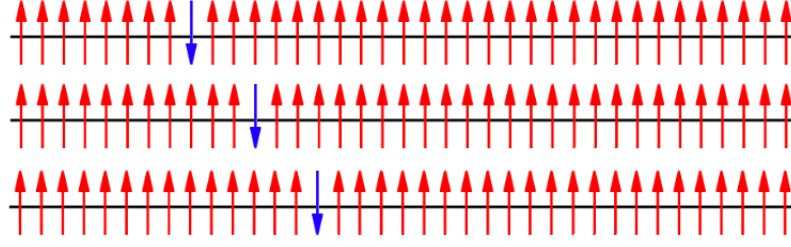


Figura 1.5: A excitação de mais baixa energia no ferromagneto unidimensional (com spin-1/2) é alcançada ao inverter um dos spins. O autoestado nesse caso é uma onda de spin que se propaga com a inversão do spin, representada pelo spin em azul em três instantes de tempo diferentes.

estado fundamental, seja alcançado invertendo-se qualquer um dos spins, digamos o do sítio i , de *up* para *down* (no caso de $S = 1/2$) aumentando a energia por uma quantidade igual a $-J\hbar^2/2$. Vamos chamar esse estado de $|\downarrow_i\rangle$. Porém esse novo estado não é mais um autoestado para a hamiltoniana visto que ao aplicar o operador $S_i^+ S_j^-$ não obtemos mais um valor nulo como resposta. O resultado de aplicar o operador $S_i^+ S_j^-$ ao ket $|\downarrow_i\rangle$ é deslocar o spin down do sítio i para o sítio j , ou seja $S_i^+ S_j^- |\downarrow_i\rangle = |\downarrow_j\rangle$. O primeiro autoestado excitado pode ser obtido então como uma combinação linear de estados do tipo $|\downarrow_i\rangle$ e é interpretado como uma onda de spin que se propaga através da cadeia ferromagnética, como mostrado na figura (1.5). Após alguns cálculos (os detalhes fogem do objetivo do trabalho e podem ser conferidos em [25]) encontramos que a energia dos estados excitados é dada por:

$$E(k) = \hbar(1 - \cos k), \quad (1.3)$$

com $k = \frac{2\pi m}{N}$ e $m = 0, 1, \dots, N - 1$. Podemos observar que a energia do estado excitado não possui um gap o que significa excitações sem massa. Tais excitações são conhecidas como mágnons (ondas de spin) e qualquer quantidade de energia é suficiente para excitá-las. Outra característica dos mágnons diz respeito ao seu spin inteiro que pode ser visto como a mudança ocorrida na magnetização do sistema após sua excitação. Esse resultado é consequência do famoso Teorema de Goldstone [26] que afirma que qualquer simetria contínua espontaneamente quebrada dá origem a excitações (modos ou bósons de Goldstone) não massivas que tendem a restaurar a

simetria perdida. A hamiltoniana de Heisenberg possui uma simetria contínua $O(3)$ que é quebrada quando os spins escolhem uma direção preferencial para apontarem. Essa quebra dá origem aos mágnons que tendem a desordenar o sistema de modo a recuperar a invariância à rotação. O Teorema de Goldstone é geral e não se aplica somente a sistemas magnetismo, embora esse seja um dos casos mais simples onde ele se aplica.

1.3 O antiferromagneto unidimensional

Vamos agora analisar o caso de um antiferromagneto unidimensional. No caso clássico não temos nenhuma surpresa em relação ao que já foi visto no ferromagneto. A única diferença é que ao invés de todos spins apontarem no mesmo sentido, eles assumem uma configuração de Néel com spins vizinhos alinhados anti-paralelamente. O caso quântico por outro lado se torna bastante complicado se comparado com o respectivo modelo ferromagnético. Pra começar, o estado fundamental não é mais representado pelo estado de Néel, além de ser desordenado mesmo em temperatura nula devido a perturbações quânticas (esse é o primeiro exemplo de um líquido de spin unidimensional). Como o estado fundamental não quebra a simetria $O(3)$ as excitações que surgem não são mais modos de Goldstone e podem inclusive ser massivas em alguns casos. Outra característica marcante é o papel do spin na cadeia antiferromagnética. Ao contrário do caso anterior, no qual o resultados eram válidos para qualquer valor de S , a situação agora é drasticamente diferente para spins inteiros ($S = 1, 2, 3, \dots$) e spins semi-inteiros ($S = 1/2, 3/2, \dots$), como mostrado por Haldane [27]. O caso de spin meio é o único cuja solução é conhecida exatamente, dada pelo Ansatz de Bethe [28] (os outros casos podem ser aproximados pelo modelo sigma não-linear como é visto no capítulo seguinte). Partindo da solução para $S = 1/2$, Cloizeaux e Pearson [29] encontraram que as excitações também não possuem gap, porém são dadas no limite termodinâmico por:

$$E(k) = \frac{\pi}{2} |\text{sen}k|, \quad (1.4)$$

com $-\pi \leq k \leq \pi$. Note que tais excitações não são ondas de spin pois não tem origem em flutuações de um estado ordenado e a relação de dispersão é linear ($E \propto k$) ao contrário das excitações no ferromagneto ($E \propto k^2$). No trabalho de Cloizeaux e Pearson também é mostrado que tais modos tem spin-1 porém, um cálculo mais preciso feito por Faddeev e Takhtain mostrou que elas são na verdade compostas de duas excitações de spin 1/2, denominadas spinons. Tais spinons serão importantes no capítulo 3 no qual é estudada a interação entre eles em função de um parâmetro anisotrópico.



Figura 1.6: A cadeia antiferromagnética quântica é desordenada mesmo em $T = 0$ e as ondas excitações nesse caso não são ondas dadas por ondas de spin.

Já a cadeia antiferromagnética de spin inteiro, embora seja também desordenada em temperatura nula, apresenta uma gap de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado. Tal lacuna se deve unicamente a presença do spin inteiro e é conhecido como gap de Haldane (visto em mais detalhes no próximo capítulo). Embora nenhum dos casos possuam ordem de longo alcance em $T = 0$, a presença do gap torna o sistema de spin inteiro mais desordenado que modelos de spin semi-inteiro. De fato, enquanto no caso semi-inteiro o comprimento de correlação tem um decaimento algébrico, para spin inteiro o comprimento de correlação decai exponencialmente.

Até agora vimos basicamente o comportamento de sistemas magnéticos unidimensionais em temperatura zero. Os casos bidimensionais serão tratados no capítulo seguinte após a apresentação do modelo sigma não-linear, porém alguns resultados em temperatura finita já podem ser previstos com base no Teorema de Mermin-Wagner [30]. Segundo esse teorema, simetrias contínuas não podem ser espontaneamente quebradas em temperaturas finitas para sistemas uni ou bidimensionais que apresentem somente interações de curto alcance. O modelo de Heisenberg (uni ou bidimensional) é um caso típico que apresenta somente interações entre primeiros vizinhos, o que caracteriza curto alcance, e portanto ele não pode ter sua simetria $O(3)$ quebrada

espontaneamente em temperaturas finitas. De modo equivalente, podemos dizer que o teorema de Mermin-Wagner implica em comprimentos de correlação finitos para sistemas magnéticos em uma ou duas dimensões (geralmente com decaimento algébrico ou exponencial) em temperaturas não nulas. Observe que embora um campo magnético seja capaz de ordenar o sistema magnético, quebrando sua simetria, em temperaturas finitas tal fato não ocorre espontaneamente. Novamente as excitações responsáveis pelo desordenamento são os bósons de Goldstone, que devido ao fato de serem não massivos surgem com qualquer aumento infinitesimal na temperatura.

Capítulo 2

O modelo sigma não-linear $O(3)$

O modelo sigma não-linear $O(3)$ (MSNL) será a base para o desenvolvimento dos próximos dois capítulos, portanto esse capítulo é destinado a uma breve revisão sobre ele. Embora tal modelo seja muito útil em física da matéria condensada, ele também é conhecido pelos teóricos de campo devido suas semelhanças com a teoria de Yang-Mills em quatro dimensões [31]. Veremos que ele aparece como uma aproximação contínua semi-clássica para sistemas ferro e antiferromagnéticos. Também é apresentada uma revisão a respeito das soluções topológicas suportadas pela teoria.

2.1 Introdução

Na forma mais geral, o modelo sigma não-linear $O(N)$ em $(d + 1)$ dimensões é representado pela densidade lagrangeana ¹:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^d \sum_{a=1}^N (\partial_{\mu} n_a)(\partial^{\mu} n^a) = \frac{1}{2} (\partial_{\mu} \mathbf{n}) \cdot (\partial^{\mu} \mathbf{n}). \quad (2.1)$$

Note que são realizadas duas somas, a primeira sobre o índice espaço-temporal μ que é invariante de Lorentz e a segunda sobre o índice a que especifica o espaço interno. No caso, o espaço interno é N -dimensional e apresenta simetria quanto a rotações $O(N)$.

¹A revisão sobre o MSNL é em grande parte baseada no livro do Nagaosa [32].

A não-linearidade do modelo surge do vínculo:

$$\sum_{a=1}^N n_a^2 = \mathbf{n}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r}, t) = 1, \quad (2.2)$$

que é imposto a campo $\mathbf{n}(\mathbf{r}, t)$. Vamos tratar somente do caso $N = 3$ que, como veremos, é associado a sistemas de spin onde cada componente contribui com um grau de liberdade. No formalismo de integrais de caminho temos:

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}[\mathbf{n}] (\mathbf{n}(\mathbf{r}, t)^2 - 1) e^{-i\mathcal{A}}, \quad (2.3)$$

na qual a medida de integração $\mathcal{D}[\mathbf{n}]$ é realizada sobre o campo \mathbf{n} em todo espaço. O funcional \mathcal{Z} mede a probabilidade do sistema evolui do estado inicial em $t_i = 0$ para o estado final no tempo t_f com o peso de cada caminho sendo dado pela ação \mathcal{A} . A trajetória com maior probabilidade será aquela que minimiza a ação, que no nosso caso é dada por:

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &= \int_0^{t_f} dt L = i \int_0^\beta d\tau \frac{1}{2g} \left[\frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial t} \right)^2 + \sum_{i=1}^d \left(\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial x_i} \right) \right] \\ &= i \int dx_0 \frac{1}{2g} (\partial_\mu \mathbf{n}) \cdot (\partial^\mu \mathbf{n}), \end{aligned} \quad (2.4)$$

na qual foi introduzido o termo adimensional g que faz o papel de uma constante de acoplamento e c é a velocidade de propagação das excitações sobre o estado fundamental. Na equação acima usamos o formalismo de tempo imaginário no qual $t = -i\tau$. Por meio dessa transformação, trocamos a métrica de Minkowski ($ds^2 = -dt^2 + dx_i dx^i$) pela métrica euclidiana ($ds^2 = d\tau^2 + dx_i dx^i$) e, ao invés de tratar o modelo dinâmico em $(d+1)$ dimensões, trabalhamos com um caso estático em $(d+1)$ dimensões espaciais. Por meio do formalismo de tempo imaginário também podemos ver a correspondência entre integrais de caminho e mecânica estatística. Ao adotar $t = -i\tau$, a função (2.3) assume a mesma forma matemática da função partição $\mathcal{Z} = \text{Tre}^{-\beta H}$ (obviamente não levando em conta o vínculo e considerando o traço sobre um espaço contínuo). De fato, muitas características de sistemas termodinâmicos são obtidas por meio dessa ligação (e vice-versa), sendo comum chamar a equação (2.3) também de função partição.

O vínculo na equação (2.3) é representado por meio de um multiplicador de

Lagrange $\lambda(\mathbf{r})$ e dessa forma a função partição é expressa como:

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\lambda(\mathbf{r})\mathcal{D}[\mathbf{n}] \exp \left\{ \int d^{d+1}\mathbf{x} \left[\frac{1}{2g}(\partial_\mu \mathbf{n})(\partial^\mu \mathbf{n}) + \lambda(\mathbf{r})(\mathbf{n}(\mathbf{r})^2 - 1) \right] \right\}, \quad (2.5)$$

Uma vez que a ação é quadrática no campo \mathbf{n} , ela pode ser integrada de modo a fornecer:

$$\mathcal{Z} = \int d\mathcal{D}\lambda(\mathbf{r}) \exp \left[\int d^{d+1}\mathbf{r} \lambda(\mathbf{r}) - \frac{3}{2} \text{Tr} \ln \left(\frac{1}{2g} \partial_\mu^2 + \lambda(\mathbf{r}) \right) \right]. \quad (2.6)$$

A não linearidade da equação (devido ao traço) torna impossível a integração sobre $\lambda(\mathbf{r})$ e vamos então aproximá-lo por um valor constante $\lambda(\mathbf{r}) = \lambda$, que é encontrado pelo método do ponto de sela. Minimizando a ação com respeito a λ temos:

$$\text{Tr} \left[\left(\frac{1}{2g} \partial_\mu^2 + \lambda \right)^{-1} \right] = \frac{2}{3}. \quad (2.7)$$

O traço é realizado no espaço de energia-momento e assim a equação acima é reescrita como:

$$\frac{2}{3} = \int_{|\mathbf{k}| < \Lambda} \frac{d^{d+1}\mathbf{k}}{(2\pi)^{d+1}} \frac{2g}{\mathbf{k}^2 + 2g\lambda}, \quad (2.8)$$

onde foi introduzido um corte Λ na integral para evitar divergências no infra-vermelho (esse corte está associado à natureza discreta dos sistemas estudados). Definimos o termo $\Delta^2 = 2g\lambda$ como a massa das excitações sobre o estado fundamental (gap de energia) e para o caso unidimensional a equação (2.8) apresenta uma divergência logarítmica no limite $\Delta \rightarrow 0$, de forma que $\Delta \sim \Lambda e^{-2\pi/3g}$ para $g \ll 1$. Pode ser mostrado facilmente que as excitações são modos de Goldstone com relação de dispersão $E = kc$. Em duas dimensões espaciais essa divergência não ocorre e após integrar a equação (2.8) obtemos:

$$g = \frac{2\pi^2}{3} \left[\Lambda - \Delta \arctan \left(\frac{\Lambda}{\Delta} \right) \right]^{-1}, \quad (2.9)$$

e nesse caso é possível termos $\Delta \neq 0$ de modo que a relação de dispersão é dada por $E = \sqrt{\Delta^2 + k^2 c^2}$. A equação (2.9) é dividida em duas fases separadas por valor crítico g_c . Acima de g_c o gap é finito enquanto para valores abaixo de g_c a única solução possível é $\Delta = 0$. No ponto crítico uma análise sobre as soluções é complicada e está fora do nosso escopo. Veremos na próxima seção que g_c é responsável pela separação

entre fases com ordem de longo alcance e fases desordenadas em sistemas magnéticos. O caso tridimensional pode ser tratado semelhantemente mas não será feito aqui uma vez que nosso maior interesse são os modelos bidimensionais.

2.2 A aproximação contínua para o magnetismo

Naturalmente, sistemas magnéticos assim como qualquer outro tipo não são sistemas contínuos. Na própria hamiltoniana de Heisenberg é realizado um somatório sobre todos os sítios da rede, deixando clara a natureza discreta do modelo. Entretanto, em muitas ocasiões é conveniente abandonar o conceito de um número finito de constituintes e partir para a abordagem contínua. Geralmente essa transição é feita ao considerar que a distância entre sítios vizinhos (ou seja a menor distância relevante entre dois pontos) é muito pequena quando comparada com as dimensões macroscópicas do material estudado. Muitas vezes também é necessário supor que as grandezas físicas mensuráveis não sofrem variações bruscas de modo a obter uma teoria contínua e suave. Nesse caso os somatórios são tomados como integrais assim como as diferenças podem ser expressas em favor de derivadas, e as equações que descrevem os sistemas físicos são representadas quase sempre como equações diferenciais.

Em uma aproximação semi-clássica (para S grande) na qual consideramos os operadores de spin \mathbf{S} como vetores é possível encontrar uma teoria contínua para o ferromagneto bidimensional expandindo \mathbf{S}_j em torno de \mathbf{S}_i até termos de segunda ordem no espaçamento de rede. Tal procedimento leva à seguinte hamiltoniana (para o caso estático):

$$H = \frac{JS^2a^{2-d}}{2} \int d^d\mathbf{r} \sum_{i=1}^d \left(\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial x^i} \right), \quad (2.10)$$

onde d é a dimensão espacial e a é o espaçamento de rede (a menor distâncias entre sítios vizinhos). O campo \mathbf{n} possui três componentes (correspondente às componentes do spin S^x , S^y e S^z) e sobre ele atua o vínculo $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = 1$. Dessa forma, o ferromagneto é descrito pelo já apresentado modelo sigma não-linear $O(3)$.

Porém o caso mais interessante ocorre na descrição contínua para o antiferromagneto. Como vimos no capítulo passado, cadeias antiferromagnéticas não apresen-

tam ordenamento mesmo em temperatura nula, ou seja, a simetria $O(3)$ é conservada. Devido à esse fato, a aplicação direta de uma teoria de ondas de spin (como no caso ferromagnético) não é possível e a aproximação semi-clássica deve ser realizada por outros métodos. Tal problema foi solucionado por Haldane no limite de baixas temperaturas e longos comprimentos de onda de spin [27, 33, 34]. O procedimento envolve separar as excitações sobre o estado de Néel entre ondas de spin com curtos e longos comprimentos de onda e depois integrar sobre as ondas curtas de modo a preservar a simetria $O(3)$. Começamos pela função partição:

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}[\mathbf{S}_i] e^{-\mathcal{A}}, \quad (2.11)$$

na qual a medida de integração $\mathcal{D}[\mathbf{S}_i]$ indica a integração sobre todos os sítios. A ação por sua vez é dada por:

$$\mathcal{A} = iS \sum_i \omega([\mathbf{S}_i]) + \int_0^\beta d\tau \left(J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i(\tau) \cdot \mathbf{S}_j(\tau) \right), \quad (2.12)$$

onde usamos a correspondência entre temperatura e tempo imaginário ($\tau = iT$). O primeiro termo é a chamada fase de Berry [35] e tem um papel muito importante principalmente nos casos unidimensionais (ela será responsável pela distinção entre os sistemas de spin inteiro e semi-inteiro). Essa fase mede o ângulo sólido subtendido pelo vetor $\mathbf{n}_i = \mathbf{S}_i/S$ quando ele evolui de $\tau = 0$ até $\tau = \beta$. O segundo termo na ação é hamiltoniana de Heisenberg com $J < 0$. O passo seguinte é aplicar o mapeamento de Haldane de modo a separar as flutuações entre longos e curtos comprimentos de onda. Isso é feito escrevendo o campo \mathbf{S}_i como:

$$\mathbf{S}_i(\tau) = (-1)^i S \mathbf{n}(\mathbf{r}_i, \tau) + a \mathbf{L}(\mathbf{r}_i, \tau), \quad (2.13)$$

no qual o campo staggered \mathbf{n} é unitário ($|\mathbf{n}| = 1$), a é o espaçamento de rede e \mathbf{L} é uma perturbação sobre \mathbf{n} . Mantendo termos de até segunda ordem, a condição $\mathbf{S}_i(\tau)^2 = S^2$ implica que $\mathbf{n} \cdot \mathbf{L} = 0$ e após expandir \mathbf{S}_j em torno de \mathbf{S}_i a hamiltoniana se torna:

$$H = -JS^2N + \int d^d \mathbf{r} \left[\frac{JS^2 a^{2-d}}{2} |\nabla \mathbf{n}(\mathbf{r}, \tau)|^2 + Jda^{2-d} \mathbf{L}(\mathbf{r}, \tau)^2 \right]. \quad (2.14)$$

O termo da fase de Berry desempenha o papel de um termo cinético (a hamiltoniana representa o termo de potencial) e nessa expansão é escrito como:

$$S \sum_i \omega([\mathbf{S}_i(\mathbf{r}_i, \tau)]) = S \sum_i (-1)^i \omega([\mathbf{n}(\mathbf{r}_i, \tau)]) + \sum_i \int_0^\beta d\tau a \mathbf{L}(\mathbf{r}_i, \tau) \cdot \frac{\partial \mathbf{n}(\mathbf{r}_i, \tau)}{\partial \tau} \times \mathbf{n}(\mathbf{r}_i, \tau). \quad (2.15)$$

Juntando os termos dois termos, cinético e potencial, a ação efetiva é dada por:

$$\mathcal{A}_{\text{ef}} = S_B + \int_0^\beta d\tau \int d^d \mathbf{r} \left[\frac{JS^2 a^{2-d}}{2} |\nabla \mathbf{n}(\mathbf{r}, \tau)|^2 + Jda^{2-d} |\mathbf{L}(\mathbf{r}, \tau)|^2 + ia^{1-d} \mathbf{L}(\mathbf{r}, \tau) \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{n}(\mathbf{r}, \tau)}{\partial \tau} \times \mathbf{n}(\mathbf{r}, \tau) \right) \right], \quad (2.16)$$

onde $S_B = S \sum_i (-1)^i \omega([\mathbf{n}(\mathbf{r}_i, \tau)])$. Os campos $\mathbf{n}(\mathbf{r}, \tau)$ e $\mathbf{L}(\mathbf{r}, \tau)$ satisfazem uma relação de comutação semelhante à relação entre os operadores posição e momento, e após integrar a ação sobre $\mathbf{L}(\mathbf{r}, \tau)$ chegamos ao resultado:

$$\mathcal{A}_{\text{ef}} = S_B + \int_0^\beta d\tau \int d^d \mathbf{r} \left[\frac{JS^2 a^{2-d}}{2} |\nabla \mathbf{n}(\mathbf{r}, \tau)|^2 + \frac{a^{-d}}{4Jd} \left(\frac{\partial \mathbf{n}(\mathbf{r}, \tau)}{\partial \tau} \right)^2 \right]. \quad (2.17)$$

Definindo as quantidades $c = \sqrt{2d}JSa$ e $g = \frac{2\sqrt{2}}{a^{d-1}S}$ como a velocidade das ondas de spin e a constante de acoplamento, a ação ganha na forma mais conhecida:

$$\mathcal{A}_{\text{ef}} = S_B + \frac{1}{g} \int_0^{c\beta} dx_0 \int d^d \mathbf{r} (\partial_\mu \mathbf{n}) \cdot (\partial^\mu \mathbf{n}), \quad (2.18)$$

na qual $\partial_i = \partial/\partial x_i$ e $\partial_0 = 1/c(\partial/\partial t)$. A equação acima, a não ser pela fase de Berry, é novamente o modelo sigma não-linear $O(3)$.

2.3 A fase de Berry e o gap no espectro de energia

A fase de Berry (ou fase geométrica) tem um papel fundamental na distinção entre sistemas antiferromagnéticos de spin inteiro e semi-inteiro. Começamos com o caso unidimensional e depois estendemos os resultados para dimensões mais altas. Ao impormos condições de contorno periódicas $\mathbf{n}(\mathbf{r}_{2N+1}) = \mathbf{n}(\mathbf{r}_1)$ o termo S_B pode ser

escrito da seguinte forma:

$$\begin{aligned} S_B &= S \sum_{i=1}^{2N} (-1)^i \omega([\mathbf{n}(ia)]) \\ &= S \sum_{n=1}^N \{\omega([\mathbf{n}(2na)]) - \omega([\mathbf{n}((2n-1)a)])\} \end{aligned} \quad (2.19)$$

$$= \frac{S}{2} \int_0^{c\beta} d\tau \int_0^L dx \frac{\delta\omega([\mathbf{n}(x, \tau)])}{\delta\mathbf{n}(x, \tau)} \frac{\partial\mathbf{n}(x, \tau)}{\partial x} \quad (2.20)$$

$$= \frac{S}{2} \int_0^{c\beta} dx_0 \int_0^L dx \frac{\mathbf{n}(x, x_0)}{\partial x_0} \times \mathbf{n}(x, x_0) \cdot \frac{\partial\mathbf{n}(x, x_0)}{\partial x}, \quad (2.21)$$

ou usando as propriedades de produto misto:

$$S_B = -\frac{S}{2} \int_0^{c\beta} dx_0 \int_0^L dx \left(\frac{\partial\mathbf{n}}{\partial x_0} \times \frac{\partial\mathbf{n}}{\partial x} \right) \cdot \mathbf{n}. \quad (2.22)$$

O carácter topológico da teoria aparece na equação acima. O número inteiro definido por:

$$Q = \frac{1}{4\pi} \int_0^{c\beta} dx_0 \int_0^L dx \left(\frac{\partial\mathbf{n}}{\partial x_0} \times \frac{\partial\mathbf{n}}{\partial x} \right) \cdot \mathbf{n} \quad (2.23)$$

é chamado de carga topológica (*winding number* ou índice de Pontryagin) e indica quantas vezes a esfera unitária é mapeada pelo campo $\mathbf{n}(x, x_0)$. Soluções com diferentes cargas topológicas não podem ser continuamente deformadas umas nas outras e dessa forma existe uma forte estabilidade de origem topológica. As soluções topológicas são tratadas com mais detalhes na próxima seção. A fase de Berry aparece na função partição como um termo do tipo $e^{-2\pi SQ}$, então se o spin é inteiro o argumento da exponencial será um múltiplo de 2π e a fase geométrica não possui nenhuma influência. Por outro lado, se o spin é semi-inteiro então soluções topológicas com cargas ímpares contribuem de forma diferente daquelas com cargas pares.

Em duas dimensões espaciais, se o campo \mathbf{n} é contínuo, o termo da fase de Berry é sempre nulo, independente do spin [27, 36, 37]. Podemos imaginar que o plano bidimensional é formado por cadeias unidimensionais interligadas pela constante de troca J . Nesse caso, cada cadeia i apresenta uma carga topológica Q_i e um fator $(-1)^i$. Ao somar a contribuição de todas as cadeias para a fase de Berry, ocorre o cancelamento entre cadeias vizinhas e no final obtemos $S_B = 0$. O mesmo vale para

os casos tridimensionais. Logo, a fase de Berry só afeta as cadeias antiferromagnéticas com spin inteiro e em todos os outros casos seus efeitos não são notados.

Dessa forma, é possível mapear o antiferromagneto d -dimensional à temperatura nula no ferromagneto em $(d + 1)$ dimensões à uma temperatura efetiva $T_{\text{ef}} \propto g$ (para $d = 1$, somente o casos com spin inteiro). A análise em $T = 0$ é feita da mesma forma descrita no final da seção passada. Para o caso unidimensional, as excitações são massivas e portanto cadeias antiferromagnéticas com spin inteiro possuem o chamado gap de Haldane. Quando o spin é semi-inteiro, a fase de Berry não é nula e a interferência na soma sobre todas as fases complexas provoca um estado sem gap. Tal fato já era conhecido para $S = 1/2$, porém agora podemos afirmar que o mesmo ocorre para qualquer valor semi-inteiro de S .

Em duas dimensões, devido à relação entre g e S , temos duas fases separadas por valor crítico S_c do spin (correspondente ao ponto g_c). Para $S > S_c$ as excitações (ondas de spin) possuem massa nula, o que corresponde a um comprimento de correlação infinito. Nesse caso o sistema apresenta OLA. Já para $S < S_c$ a única solução possível possui um gap de energia não nulo e o estado é desordenado (comprimento de correlação finito). O valor do ponto crítico não pode ser obtido pelas equações desenvolvidas na seção passada, mas é possível mostrar que $S_c < 0.5$ de modo que antiferromagnetos bidimensionais são sempre ordenados em $T = 0$, independente do spin. Resultados semelhantes são encontrados por meio da teoria bosônica de Schwinger, descrita no capítulo 5.

Para temperaturas finitas, a integral sobre $k_0 = E$ na equação (2.8) deve ser substituída por um somatório sobre $E_n = \frac{2\pi n}{\beta}$ (frequências de Matsubara). Então:

$$\frac{2}{3} = \frac{1}{\beta} \sum_{E_n} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{2g}{E_n + \mathbf{k}^2 + \Delta^2} = g \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{1}{E(\mathbf{k})} \coth\left(\frac{\beta E(\mathbf{k})}{2}\right), \quad (2.24)$$

onde $E(\mathbf{k}) = \sqrt{\mathbf{k}^2 + \Delta^2}$. A equação acima, assim como no caso unidimensional, apresenta uma divergência logarítmica quando Δ tende à zero e portanto as soluções para temperaturas finitas são massivas. No limite $E(\mathbf{k}) \ll T$ usamos a aproximação $\coth(\beta E/2) \approx 2/(\beta E)$ e após integrar sobre a região $k < \Lambda$ encontramos o comporta-

mento do gap com a temperatura:

$$\Delta(T) \simeq \Lambda e^{-\frac{2\pi}{3gT}}. \quad (2.25)$$

O resultado está de acordo com o previsto pelo teorema de Mermin-Wagner, ou seja, desordem para temperaturas finitas. Os mesmos procedimentos quando aplicados para o caso tridimensional mostram que o sistema apresenta ordenamento em temperaturas finitas abaixo de um valor crítico T_c (acima desse valor, perturbações térmicas são capazes de destruir o ordenamento e a magnetização vai a zero).

2.4 Soluções topológicas

Equações lineares são bem conhecidas na física. Elas estão presentes na mecânica clássica, no electromagnetismo, na teoria quântica de campos e diversas outras áreas, sendo irrefutável negar a sua importância. Com certeza, o grande trunfo das teorias lineares é a sua simplicidade matemática que torna possível obter soluções exatas para um vasto número de problemas. Por outro lado, sistemas não-lineares também surgem com bastante frequência, mas encontrar soluções exatas nesses casos é um trabalho árduo, complicado e, nas maiorias das vezes impossível, sendo necessário o uso de aproximações ou métodos numéricos. Embora a maior parte desses problemas estejam fadados a permanecer sem respostas, para alguns modelos bem específicos é possível descobrir soluções exatas. Os primeiros trabalhos sobre equações não-lineares surgiram no final da década de 60 e muitos deles se apoiam em conceitos de topologia. Uma característica fundamental nos modelos topológicos é o conceito de sóliton ou onda solitária, que embora seja comum usá-los como sinônimos são diferentes com respeito a um ponto, descrito mais adiante.

Uma onda solitária é uma perturbação localizada que se propaga sem distorção com velocidade constante e mantém seu formato mesmo após a colisão com outra onda solitária ². Historicamente, o primeiro relato da observação de uma onda solitária foi feito por John Scott Russell (1808–1882). Ele presenciou a propagação de uma onda

²Para maiores detalhes sobre soluções topológicas ver a referência [38].

em grande um canal de água durante várias milhas (diz o relato que ele perseguiu a onda até perdê-la de vista quando seu cavalo se cansou). O exemplo mais simples é encontrado na equação de onda relativística:

$$\partial_\mu \partial^\mu \phi = \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) = 0, \quad (2.26)$$

cuja solução é qualquer função do tipo $f(x \pm ct)$, que descreve um pacote de energia que se propaga sem distorção com velocidade c e possui uma relação de dispersão $E = kc$. Como é conhecido, a equação acima descreve uma partícula sem massa enquanto o caso massivo é dado pela equação de Klein-Gordon $(\partial_\mu \partial^\mu + m^2 c^2)\phi = 0$. Embora a equação ainda seja linear, o termo de massa destrói as duas características de ondas solitárias (nesse caso, perturbações com diferentes comprimentos de onda viajam com velocidades diferentes e são dispersivas). A introdução de termos não-lineares, ϕ^3 por exemplo, na maioria dos casos também impossibilita a existência de ondas solitárias, porém a introdução de ambos termos, dispersivo e não-linear, algumas vezes é capaz de gerar soluções topológicas e serão esses os modelos que nós interessam.

A diferença entre sólitons e ondas solitárias é que para o primeiro é imposta também a condição que o campo (geralmente dado por uma densidade de energia) nos limites assintóticos $t \rightarrow -\infty$ e $t \rightarrow \infty$ sejam idênticos, a não ser por uma fase. Dessa forma, sólitons são ondas solitárias cujas soluções são restauradas às condições iniciais (dadas no limite $t \rightarrow -\infty$) para tempos suficientemente longos. Vamos nos preocupar principalmente com casos estáticos e portanto tal diferenciação não é de grande importância. Modelos que suportam sólitons como soluções em sua maioria são dados em baixas dimensões espaciais. Em $(1+1)$ dimensões, o sistema mais famoso a apresentar soluções topológicas é o modelo de Sine-Gordon (a combinação da equação de Klein-Gordon com um termo do tipo senoide). Em $(2+1)$ dimensões, o principal representante é nosso objeto de estudo dessa seção, o modelo sigma não-linear $O(3)$. Veremos que os sólitons que aparecem como soluções topológicas para o MSNL apresentam algumas características especiais, sendo denominados por skyrmions, em homenagem a T. H. R. Skyrme. Os skyrmions surgiram originalmente como solução para o modelo de Skyrme (uma aproximação em baixas energias capaz de descrever os mésons e bárions na cromodinâmica quântica [39]) e, mais tarde foi mostrado por Belavin e Polyakov [40–42]

que eles também eram soluções para o modelo sigma não-linear (é comum nesse caso usar o nome sóliton de Belavin-Polyakov no lugar de skyrmion). O nosso objetivo é estudar essas configurações aplicadas ao magnetismo, porém skyrmions também estão presentes em diversos outros sistemas, como condensados de Bose-Einstein e supercondutores, o que não apenas revela a abrangência dessas configurações mas também a sua importância na área tecnológica e científica.

Até agora conhecemos o estado fundamental (dado pelo campo de Néel) e as excitações de mais baixa energia (ondas de spin) para o modelo sigma não-linear. Veremos agora que também existem soluções com energia finita de origem topológica. Considerando a lagrangeana:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2g} (\partial_\mu \mathbf{n}) \cdot (\partial^\mu \mathbf{n}), \quad (2.27)$$

onde uma soma é realizada tanto no espaço das coordenadas ($\mu = 0, 1, 2$) quanto no espaço interno, temos que ação é dada por:

$$\mathcal{A} = \int d\mathbf{r} \int dt \left[\frac{1}{2} (\partial_\mu \mathbf{n}) \cdot (\partial^\mu \mathbf{n}) + \lambda(\mathbf{r}, t) (\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} - 1) \right], \quad (2.28)$$

na qual o vínculo não-linear foi implementado por meio de um multiplicador de Lagrange. A equação de movimento obtida ao minimizar a ação é expressa por:

$$\partial_\mu \partial^\mu \mathbf{n} + \lambda \mathbf{n} = (\square + \lambda) \mathbf{n} = 0, \quad (2.29)$$

e para o caso estático temos:

$$\nabla^2 \mathbf{n} - (\mathbf{n} \cdot \nabla^2 \mathbf{n}) \mathbf{n} = 0, \quad (2.30)$$

onde o multiplicador de Lagrange foi eliminado utilizando o vínculo $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = 1$. Desconsiderando a dependência temporal, a energia para o modelo sigma não-linear é dada por:

$$E = \frac{1}{2g} \int (\partial_i \mathbf{n}) \cdot (\partial^i \mathbf{n}) d^2 \mathbf{r}, \quad (2.31)$$

com $i = 1, 2$. O estado fundamental é encontrado impondo a condição $\partial_i \mathbf{n}(\mathbf{r}) = 0$ a todo espaço, ou seja, $\mathbf{n}(\mathbf{r}) = \mathbf{n}_0$ com \mathbf{n}_0 sendo um campo constante. As soluções com energia finita são obtidas exigindo a condição de contorno $\lim_{r \rightarrow \infty} \mathbf{n} = \mathbf{n}_0$. Dessa

forma o campo \mathbf{n} é livre para apontar em qualquer direção na região central enquanto no infinito ele mantém uma posição fixa. A direção escolhida pelo espaço interno na região do contorno não é importante uma vez que ele possui simetria $O(3)$ e todas as direções são energeticamente idênticas. Devido à essa condição de contorno, é possível mapear todo o plano físico na superfície de uma esfera unitária, de forma que o polo norte dessa esfera corresponda aos spins no infinito enquanto o polo sul representa o campo na origem. Vamos denominar essa esfera por $S_2^{(\text{fis})}$ e a esfera do espaço interno (também unitária devido ao vínculo $\mathbf{n}^2 = 1$) por $S_2^{(\text{int})}$. Logo, as soluções de energia finita são mapeamentos de $S_2^{(\text{fis})}$ em $S_2^{(\text{int})}$ e assim podem ser caracterizadas por setores homotópicos. Representamos esse mapeamento por $\pi_2(S_2) = \mathbb{Z}$ enquanto cada setor é diferenciado por sua carga topológica:

$$Q = \frac{1}{4\pi} \int \mathbf{n} \cdot (\partial_x \mathbf{n} \times \partial_y \mathbf{n}) \, d^2 \mathbf{r} = \frac{1}{8\pi} \int \epsilon_{ij} \mathbf{n} \cdot (\partial_i \mathbf{n} \times \partial_j \mathbf{n}) \, d^2 \mathbf{r}, \quad (2.32)$$

onde ϵ_{ij} é um índice anti-simétrico. Como é conhecido da topologia, não é possível deformar continuamente um setor topológico em outro. Um pires e uma colher pertencem ao mesmo setor topológico, e podem ser transformados um no outro apenas com deformações suaves. Porém não é possível transformar continuamente um pires numa xícara (seria necessário furar o pires para dar origem à asa da xícara) pois eles são de setores topológicos diferentes. Nesse caso, a xícara pode ser continuamente deformada em uma rosquinha (que tem o formato de um toro), como mostrado na figura (2.1). Para nosso sistema físico isso implica que, para uma configuração do campo \mathbf{n} ser transformada em outra com diferente carga topológica é necessário um custo energético, geralmente bastante alto, e portanto o modelo apresenta uma grande estabilidade de origem topológica.

O significado de Q é obtido analisando a relação entre as áreas $S_2^{(\text{fis})}$ e $S_2^{(\text{int})}$. Começamos com um elemento de área do espaço interno dado como função de dois ângulos ξ_1 e ξ_2 (semelhantes ao ângulos polar e azimutal do espaço físico) ao invés das variáveis cartesianas n_a , sujeitas ao vínculo $\sum n_a = 1$:

$$dS_a^{(\text{fis})} = d^2 \xi \left(\frac{1}{2} \epsilon_{mn} \epsilon_{abc} \frac{\partial n_b}{\partial \xi_m} \frac{\partial n_c}{\partial \xi_n} \right). \quad (2.33)$$

A carga topológica é definida em função das coordenadas do espaço físico e escrita nas



Figura 2.1: Uma xícara pertence ao mesmo setor topológico de uma rosquinha e assim pode ser continuamente deformada no toro.

coordenadas internas como:

$$\begin{aligned}
 Q &= \frac{1}{8\pi} \int \epsilon_{ij} \epsilon_{abc} n_a \frac{\partial n_b}{\partial x^i} \frac{\partial n_c}{\partial x^j} d^2\mathbf{r} \\
 &= \frac{1}{8\pi} \int \epsilon_{ij} \epsilon_{abc} n_a \frac{\partial n_b}{\partial \xi_m} \frac{\partial \xi_m}{\partial x^i} \frac{\partial n_c}{\partial \xi_n} \frac{\partial \xi_n}{\partial x^j} d^2\mathbf{r} \\
 &= \frac{1}{8\pi} \int \epsilon_{mn} \epsilon_{abc} n_a \frac{\partial n_b}{\partial \xi_m} \frac{\partial n_c}{\partial \xi_n} d^2\xi,
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

onde usamos o jacobiano da transformação entre (x_1, x_2) e (ξ_1, ξ_2) na definição do elemento de área $d^2\xi$. Ao substituir a equação (2.32) para a carga dada por (2.34) temos:

$$Q = \frac{1}{4\pi} \int dS_a^{(\text{int})} \cdot n_a = \frac{1}{4\pi} \int dS^{(\text{int})}, \tag{2.35}$$

e assim a carga topológica mede quantas vezes o espaço interno é mapeado no espaço físico. No caso mais simples com $Q = 1$, por exemplo, o espaço físico é coberto apenas uma vez pelo espaço interno.

A conexão entre Q e a energia também pode ser vista facilmente por meio da desigualdade:

$$\int [(\partial_i \mathbf{n} \pm \epsilon_{ij} \mathbf{n} \times \partial_j \mathbf{n}) \cdot (\partial_k \mathbf{n} \pm \epsilon_{kl} \mathbf{n} \times \partial_l \mathbf{n})] d^2\mathbf{r} \geq 0. \tag{2.36}$$

A relação acima é verdadeira pois é a integral sobre o produto interno de um vetor com ele mesmo. Após alguns cálculos, chegamos a desigualdade:

$$\int (\partial_i \mathbf{n}) \cdot (\partial_j \mathbf{n}) d^2\mathbf{r} \geq \int \epsilon_{ij} \mathbf{n} \cdot (\partial_i \mathbf{n} \times \partial_j \mathbf{n}), \tag{2.37}$$

que fornece $E \geq 4\pi Q/g$ ou seja, um limite inferior para a energia em cada setor topológico. O valor exato da energia é alcançado ao utilizar a igualdade:

$$\partial_i \mathbf{n} = \pm \epsilon_{ij} \mathbf{n} \times (\partial_j \mathbf{n}). \quad (2.38)$$

Embora tais resultados emergjam como possíveis valores para a energia é necessário verificar se eles fazem parte de alguma solução do MSNL. Ao aplicarmos o operador ∂_i à igualdade acima, comprovamos facilmente que ela satisfaz a equação de movimento (2.30) e dessa forma as energias $E = 4\pi Q/g$ de fato são pertencentes a soluções aceitáveis.

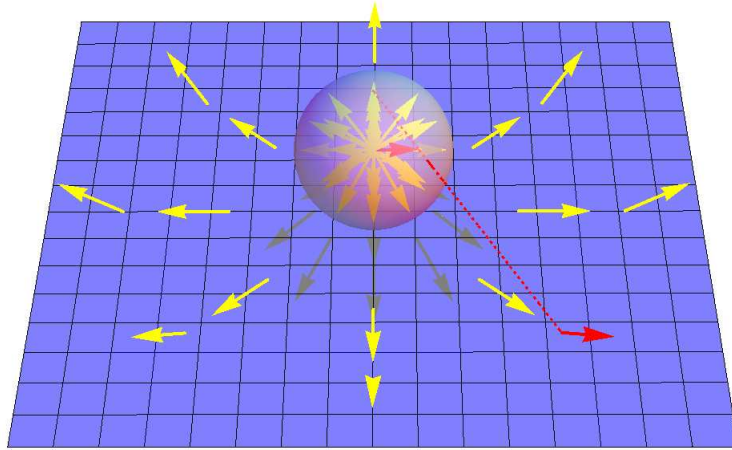


Figura 2.2: Mapeamento feito pela projeção estereográfica. O espaço interno (esfera ao centro) é projetado no plano $w_1 - w_2$ como mostrado pelo spin destacado em vermelho.

Uma vez conhecidas as energias, o próximo passo é determinar a forma das soluções topológicas. Um método simples consiste em utilizar a chamada projeção estereográfica, na qual o espaço interno é representado em um plano infinito (lembre-se que o espaço interno é tridimensional e sujeito ao vínculo $n_a n_a = 1$, e portanto apresenta dois graus de liberdade). A associação é feita de modo que os eixos w_1 e w_2 do plano coincidam com as direções de n_1 e n_2 do espaço interno e que o polo sul de $S^{(\text{int})}$ esteja na origem, como mostrado na figura (2.2). Dessa forma, temos que:

$$w_1 = \frac{2n_1}{1 - n_3} \quad \text{e} \quad w_2 = \frac{2n_2}{1 - n_3}. \quad (2.39)$$

É comum adotar uma representação complexa na qual w_1 faz o papel do eixo real enquanto w_2 é eixo imaginário e assim definimos a quantidade:

$$w = w_1 + iw_2 = \frac{2(n_1 + in_2)}{1 - n_3} = \frac{2n}{1 - n_3}. \quad (2.40)$$

Por meio do campo complexo $n = n_1 + in_2$, a equação (2.38) fornece, após um pouco de álgebra:

$$\frac{\partial n}{\partial x_1} = \mp i \left(n \frac{\partial n_3}{\partial x_2} - n_3 \frac{\partial n}{\partial x_2} \right) \quad \text{e} \quad \frac{\partial n}{\partial x_2} = \pm i \left(n \frac{\partial n_3}{\partial x_1} - n_3 \frac{\partial n}{\partial x_1} \right), \quad (2.41)$$

que em função de w é equivalente a:

$$\frac{\partial w_1}{\partial x_1} = \pm \frac{\partial w_2}{\partial x_2} \quad \text{e} \quad \frac{\partial w_1}{\partial x_2} = \mp \frac{\partial w_2}{\partial x_1}. \quad (2.42)$$

Note que as equações acima são as condições de Cauchy-Reimann para a analiticidade da função complexa $w(z)$, com $z = x_1 + ix_2$. Portanto, as soluções são quaisquer funções analíticas em z (embora regiões com cortes sejam proibidas polos são permitidos) e podem ser escritas nas coordenadas originais por meio da transformação (2.39). A forma mais geral para w é dada por:

$$w(z) = \prod_{i=1}^N \left(\frac{z - z_i}{R} \right), \quad (2.43)$$

onde z_i e R são parâmetros associados com as características físicas das soluções. A equação para a carga topológica pode ser reescrita em termos de w como:

$$Q = \frac{1}{\pi} \int d^2\mathbf{r} \frac{(\partial_z w)(\partial_{\bar{z}} \bar{w}) - (\partial_{\bar{z}} w)(\partial_z \bar{w})}{(1 + |w|^2)^2}, \quad (2.44)$$

com $\partial_z = (\partial_{x_1} + i\partial_{x_2})/2$. A energia é dada por $E = 4\pi Q/g$ e ao substituir a solução (2.43) na equação acima encontramos $N = Q$. É importante notar que o modelo apresenta duas invariâncias, além da simetria $O(3)$. Tanto a substituição $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} - \mathbf{r}_0$ quanto $\mathbf{r} \rightarrow a\mathbf{r}$ não alteram a energia e estão associadas a invariância de translação e escala (no espaço físico), respectivamente. Ao analisar a equação para a energia é fácil notar que as soluções também podem ser encontradas exigindo $\partial_{\bar{z}} w = 0$, ou seja, que w seja uma função analítica de z mas não do seu conjugado \bar{z} . Soluções com carga topológica positiva são os chamados skyrmions enquanto as configurações com $Q < 0$

são denominadas anti-skyrmions. Observe que a existência de soluções composta de skyrmions e anti-skyrmions de mesma carga topológica (em módulo) é equivalente ao estado fundamental, uma vez que a energia total é nula. O caso mais simples ocorre quando $Q = 1$ e a solução correspondente é expressa como $w = (z - z_0)/R$. O ponto z_0 especifica o centro do skyrmion enquanto R determina o tamanho da solução topológica. Em z_0 temos $w(z_0) = 0$ e pela equação (2.39) obtemos $\mathbf{n} = (0, 0, -1)$. Já no limite $z \rightarrow \infty$, o campo \mathbf{n} é dado por spins apontando na direção $(0, 0, 1)$. Outras soluções são obtidas ao impor condições de contorno apropriadas. Na figura (2.3) são mostradas as configurações do campo de Néel para duas condições de contorno diferentes, ambas com carga topológica unitária. Note que dependendo da condição de contorno adotada a forma da solução muda drasticamente, embora a energia permaneça a mesma. No caso em que $\lim_{\mathbf{r} \rightarrow \infty} \mathbf{n} = (0, 0, 1)$ o skyrmion apresenta um único centro e para $\lim_{\mathbf{r} \rightarrow \infty} \mathbf{n} = (1, 0, 0)$ ele é formado por dois centros. No capítulo seguinte vamos estudar em mais detalhes um modelo que apresenta a solução de dois centros enquanto no capítulo 4 o foco será solução com centro único.

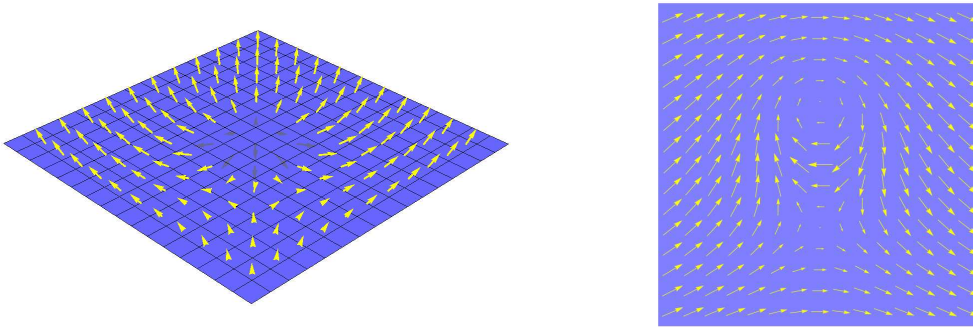


Figura 2.3: Duas configurações para solução tipo skyrmion com $Q = 1$. À esquerda a solução com condição de contorno $\lim_{\mathbf{r} \rightarrow \infty} \mathbf{n} = (0, 0, 1)$ e do lado direito com condição $\lim_{\mathbf{r} \rightarrow \infty} \mathbf{n} = (1, 0, 0)$

Soluções topológicas, como os skyrmions, são resultado de uma teoria contínua e devem ser tratadas com cuidado quando considerados em sistemas discretos. A estabilidade topológica, por exemplo, não pode ser garantida em sistemas discretos embora seja esperado que tal característica seja mantida. Desde sua descoberta teórica por volta da década de setenta até recentemente, os skyrmions não passavam de soluções

matemáticas para um modelo aproximado de sistemas magnéticos. Porém, nos últimos anos vários trabalhos experimentais têm verificado a existência de soluções topológicas em modelos reais. Por meio de análises em microscopia de transmissão eletrônica, X. Z. Yu et al [9] encontraram uma configuração do tipo skyrmion para filmes finos de $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$. O estado topológico citado pelos autores, mostrado na figura (2.4), possui escalas nanométricas e surge após a aplicação de um campo normal à superfície da amostra.

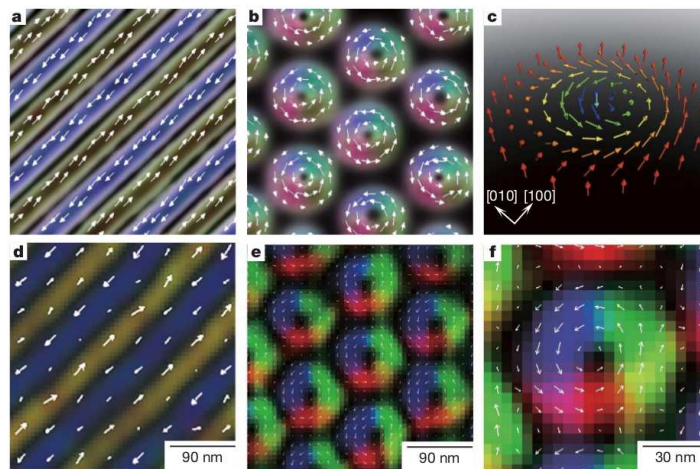


Figura 2.4: Estruturas helicoidal (a) e de skyrmion (b)-(c) previstas por simulação de Monte Carlo no trabalho de Yu. Nas figuras (d), (e) e (f) as mesmas estruturas observadas experimentalmente.

O MnSi é outro material que tem mostrado ser capaz de suportar tais excitações. Devido à interação de Dzyaloshinskii-Moriya presente nesse composto, o spins tendem a assumir uma configuração de skyrmion retorcida (*twisted*), confirmada experimentalmente por espalhamento de nêutrons [11]. Como consequência dos últimos acontecimentos, a pesquisa de soluções topológica em matéria condensada ganhou mais notoriedade e modelos teóricos, assim como simulações computacionais já foram apresentados para explicar os resultados experimentais. É importante ressaltar que as soluções topológicas, tanto na teoria quanto aquelas encontradas no laboratório até agora, fazem parte dos estados excitados e não aparecem naturalmente em tais sistemas. Contudo, Rössler propôs que skyrmions também podem descrever estados

fundamentais em filmes finos e pequenas estruturas magnéticas com interações quirais (devido ao termo de Dzyaloshinskii-Moriya), o que leva a crer que soluções topológicas podem ser mais comuns do que se imaginava.

Capítulo 3

Interação entre spinons via energia de Casimir

Como já foi comentado, sistemas antiferromagnéticos em uma dimensão não possuem ordem de longo alcance mesmo à temperatura nula, o que caracteriza os chamados líquidos de spin. Em tal situação, flutuações quânticas são responsáveis por quebrar o alinhamento entre sítios vizinhos, diferente do caso em temperatura finita no qual as flutuações tem origem térmica. Em duas dimensões os spins interagem com mais vizinhos e flutuações quânticas não são fortes o suficiente para desordenar o sistema em $T = 0$. A inclusão de termos extras na hamiltoniana, como interações de segunda ordem entre vizinhos, ou a escolha por redes frustradas são algumas das tentativas de se alcançar um estado líquido de spin bidimensional (o caso tridimensional é ainda mais difícil de ser obtido). Nesse capítulo sugerimos um sistema capaz de reproduzir estados desordenados à temperatura nula. Trata-se do modelo sigma não-linear $O(3)$ anisotrópico, que embora não descreva exatamente um antiferromagneto anisotrópico guarda algumas semelhanças. Em uma aproximação semi-clássica, as soluções do MSNL são excitações topológicas não interagentes, porém a inclusão do termo de anisotropia induz flutuações quânticas capazes de alterar esse cenário. A anisotrópica λ separa o sistema entre uma fase ordenada e outra desordenada associadas ao confinamento e deconfinamento dos spinons (excitações não massivas de spin $1/2$), respectivamente.

3.1 Modelo sigma não-linear anisotrópico

Começamos definindo a ação para o modelo sigma-não linear anisotrópico [43, 44]:

$$A = A_{B,\lambda} + \frac{\rho_s}{2} \int_{t_i}^{t_f} dt \int d^2x [(\partial_i \mathbf{n})^2 - (\partial_0 \mathbf{n})^2 + \lambda(\partial_i n_3)^2], \quad (3.1)$$

onde $A_{B,\lambda}$ é a fase de Berry, \mathbf{n} é o campo de Néel, $\rho_s = JS^2\hbar$ é a constante de acoplamento, $i = 1, 2$, $\partial_0 = (1/c)\partial/\partial t$ com $c = 2\sqrt{2}JSa/\hbar$ a velocidade das ondas de spin e λ é o termo de anisotropia. A não-linearidade do modelo surge do vínculo $\sum_a n_a^2 = 1$ que deve ser considerado juntamente com a ação acima. Como demonstrado por Haldane [27, 34], o antiferromagneto isotrópico no limite de baixas temperaturas e longos comprimentos das ondas de spin é mapeado no modelo sigma não-linear $O(3)$. Podemos esperar então que a ação (3.1) descreva um antiferromagneto anisotrópico, mas isso não ocorre. De fato, sistemas magnéticos anisotrópicos possuem simetria $O(2)$ (abelianos) e o modelo apresentado, mesmo com a presença do termo $\lambda(\partial_\mu n_3)^2$ possui simetria $O(3)$ (não abeliano). A simetria pode ser corrigida com a introdução de um termo do tipo n_3^2 , mas tal termo é desconsiderado por introduzir complicações como a quebra da invariância de escala. Ainda sim esperamos que os resultados descrevam com alguma precisão sistemas magnéticos anisotrópicos. No limite $\lambda = 0$ recuperamos o caso isotrópico cujas soluções são os famosos sólitons de Belavin-Polyakov [40, 41] de energia $E = 4\pi\rho_s\hbar Q$ onde $Q \in \mathbb{Z}$ é a chamada carga topológica. Ainda no modelo isotrópico, a fase de Berry só tem importância na fase desordenada [45] uma vez que uma variação contínua no campo \mathbf{n} cria contribuições que se anulam para diferentes sub-redes [27, 36]. Com algumas modificações, essas características serão mantidas na região com $\lambda \neq 0$.

Ao considerar soluções estáticas para a ação (3.1) e utilizando o vínculo não-linear podemos eliminar o termo n_3 e assim a densidade lagrangeana é dada por:

$$\mathcal{L} = \frac{\rho}{2} \left[\sum_{i=1}^2 (\partial_\mu v_i)(\partial_\mu v_i) + (1 + \lambda) \frac{\sum_{i,j=1}^2 v_i v_j (\partial_\mu v_i)(\partial_\mu v_j)}{1 - \sum_{i=1}^2 v_i v_i} \right]. \quad (3.2)$$

Mesmo com a presença do termo anisotrópico, soluções topológicas ainda fazem parte do modelo como demonstrado por Watanabe e Otsu [43]. Tais soluções também possuem energia finita e são obtidas definindo-se uma direção preferencial para os spins

apontarem no infinito. É conveniente definir um novo campo $\mathbf{v} = (n_1, n_2, \sqrt{1 + \lambda}n_3)$ no qual n_a são as componentes de \mathbf{n} . O vínculo $\sum_a n_a^2 = 1$ que representava a superfície de uma esfera unitária passa a ser escrito como $v_1^2 + v_2^2 + v_3^2/(1 + \lambda) = 1$ e portanto representa agora a superfície de um elipsoide tridimensional. Em função dos ângulos polar e azimutal, escrevermos o campo $\mathbf{n} = (\text{sen}\theta\text{cos}\phi, \text{sen}\theta\text{sen}\phi, \text{cos}\theta)$ e a ação é dada por $A = A_{B,\lambda} + \frac{\rho_s}{2} \int_{t_i}^{t_f} dt \int d^2x [(\partial_\mu \mathbf{v})^2 - (\partial_0 \mathbf{v})^2]$. A fase de Berry em função de \mathbf{v} tem uma forma semelhante ao caso isotrópico com a diferença que agora ela mede a área coberta pelo vetor \mathbf{v} sobre a superfície de um elipsoide quando ele evolui de t_i até t_f . Também nesse caso, a carga topológica será nula em sistemas bidimensionais ao considerarmos a continuidade de \mathbf{v} . Vamos adotar a representação por meio da projeção estereográfica definida por:

$$w = w_1 + iw_2 = \frac{v_1 + iv_2}{1 + v_3/\sqrt{1 + \lambda}}, \quad (3.3)$$

de forma que a equação (3.2) é expressa como:

$$\mathcal{L} = \frac{\rho_s}{2} \left[\frac{4|\partial_v w|^2}{(1 + |w|^2)^2} + \frac{4\lambda[w(\partial_v \bar{w}) + \bar{w}(\partial_v w)]^2}{(1 + |w|^2)^4} \right] \quad (3.4)$$

e a lagrangeana completa é dada por:

$$\begin{aligned} L = & 2\rho_s \int \frac{|\partial_0 w|^2}{(1 + |w|^2)^2} d^2x - 8\rho_s \int \frac{|\partial_{\bar{z}} w|^2}{(1 + |w|^2)^2} \left[1 + \frac{2\lambda|w|^2}{(1 + |w|^2)^2} \right] d^2x - \\ & - 8\lambda\rho_s \int \frac{[w^2(\partial_z \bar{w})(\partial_{\bar{z}} \bar{w}) + \bar{w}^2(\partial_z w)(\partial_{\bar{z}} w)]}{(1 + |w|^2)^4} - QA(\lambda)\hbar\rho_s, \end{aligned} \quad (3.5)$$

onde $\partial_z = 1/2(\partial_x + i\partial_y)$, $\partial_{\bar{z}} = 1/2(\partial_x - i\partial_y)$ e Q é a carga topológica para o caso anisotrópico definida como:

$$Q = \frac{4}{A(\lambda)} \int \frac{(\partial_z w)(\partial_{\bar{z}} \bar{w}) - (\partial_{\bar{z}} w)(\partial_z \bar{w})}{(1 + |w|^2)^2} \left[1 + \frac{2\lambda|w|^2}{(1 + |w|^2)^2} \right] d^2x, \quad (3.6)$$

sendo $A(\lambda)$ a área do elipsoide descrito por \mathbf{v} .

Soluções estáticas com energia finita são obtidas impondo a condição $\partial_{\bar{z}} w = 0$. O caso mais simples ocorre quando $Q = 1$ (soluções para anti-skyrmions com $Q = -1$ são obtidas trocando z por \bar{z}), para o qual temos $w_{\text{cl}} = \alpha(z - \xi_1)/(z + \xi_2)$ onde α , ξ_1 , ξ_2 são parâmetros relacionados às características físicas do skyrmion, como tamanho e orientação. Se por exemplo adotarmos $\xi \rightarrow \infty$ e $\alpha \rightarrow 0$ temos uma solução do tipo

$1/(z - \xi_2)$, que representa a configuração na qual os spins no infinito estão alinhados na direção $+z$ enquanto na origem temos um spin apontando no sentido $-z$. Essa solução é caracterizada por apenas um centro na origem, assim como a solução obtida pelo limite $n_3 \rightarrow -1$ quando $\mathbf{r} \rightarrow \infty$. Por outro lado, soluções cujo campo está contido no plano xy para pontos suficientemente afastados da origem são formadas por uma configuração composta de dois centros. Para essas soluções, o parâmetro α determina a direção do campo no infinito enquanto ξ_1 e ξ_2 localizam os dois centros que compõem o skyrmion. É importante observar que a energia $E = 4\pi\rho_s\hbar|Q|$ das soluções independe da condição de contorno adotada e devido a simetria $O(3)$ os dois tipos são igualmente prováveis. Vamos adotar $w_{\text{cl}} = (z - \xi)/(z + \xi)$, que representa a situação na qual o campo \mathbf{n} aponta na direção x no infinito. No limite $z \rightarrow \xi$, $w_{\text{cl}} = 0$ e pela equação (3.3) isso indica um spin no sentido $+z$, já para $\lim_{z \rightarrow -\xi} w_{\text{cl}} = \infty$ temos um spin apontando na direção $-z$ (a distância $R = 2|\xi|$ mede o tamanho do skyrmion). Além disso, como podemos ver na figura (3.1) a região em torno do ponto $(0, |\xi|)$ apresenta um configuração do tipo vórtice enquanto uma excitação do tipo anti-vórtice está centrada em $(0, -|\xi|)$ (para $Q = -1$ ocorre o contrário). Essa situação se assemelha aos pares vórtice anti-vórtice encontrados em magnetos do tipo XY , porém com uma grande diferença em relação à energia do sistema (fora o fato que no modelo XY os spins estão confinados no plano). Devido à invariância de escala do modelo (fazer $\mathbf{n} \rightarrow u\mathbf{n}$, com $u \in \mathbb{R}$, não altera a energia do sistema), os skyrmions podem ter tamanhos arbitrários e assim a energia não depende da distância R . Já no caso do par vórtice anti-vórtice é bem conhecido que a energia é proporcional ao logaritmo da separação entre as excitações (fato responsável pela transição de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless [5]). Portanto podemos esperar que nenhuma transição de fase do tipo BKT aconteça no nosso modelo.

A fase de Berry líquida é obtida somando a contribuição de cada cadeia unidimensional que forma a rede bidimensional. Para o caso no qual o número de cadeias é par, a soma sobre todas as cadeias fornece um valor nulo. Para cada uma dessas cadeias, a fase de Berry conta quantas vezes o campo \mathbf{n} é mapeado na esfera unitária, apenas uma vez para $Q = 1$. Porém, como mostrado por Baskaram [46], a situação é diferente para a cadeia que contém os centros do skyrmion, a chamada cadeia anô-

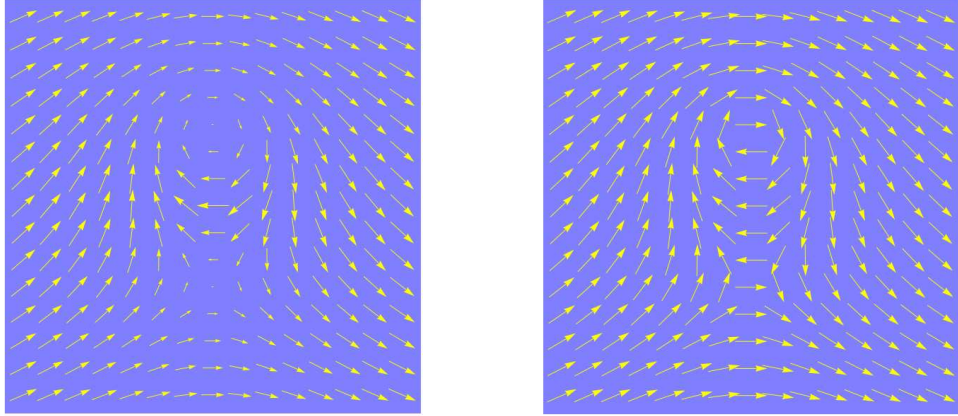


Figura 3.1: Configuração de um skyrmion com dois centros (esquerda) e um par vórtice-anti vórtice (direita).

mala. Nesse caso, o mapeamento fornece um valor nulo (e não unitário como as outras cadeias) sendo que metade da cadeia contribui com uma fase de π (metade superior) e a outra metade com uma fase $-\pi$ (metade inferior). Essas duas fases são associadas ao spin-1/2 das excitações topológicas que compõem o skyrmion. À essas excitações, que além de terem spin-1/2 são não massivas, é dado o nome de spinons e devido ao fato da energia não depender da distância R , dizemos que os spinons são não interagentes (no nível clássico). Porém, como veremos na próxima seção ao considerarmos perturbações quânticas, os spinons deixam de ser não interagente e passam a apresentar uma interação que depende da constante de anisotropia λ , podendo ser tanto de atração (associado ao confinamento de spinons) quanto repulsão (no deconfinamento).

3.2 Perturbações quânticas

Nessa seção vamos estudar como flutuações sobre o estado clássico w_{cl} afetam o comportamento dos spinons. O método utilizado consiste em calcular as mudanças na matriz de fase por meio da aproximação de Born de segunda ordem (geralmente os termos de primeira ordem são nulos). Rodriguez propôs que a energia do Skyrmion diminui com o tamanho R [47] enquanto Walliser e Holzwarth encontraram um resultado contrário [48]. As discrepâncias ocorrem devido às diversas aproximações adotadas por cada autor. Baskaram também estudou como flutuações quânticas alteram

a energia do skyrmion para o modelo isotrópico e encontrou que elas dão origem à uma interação de repulsão entre os spinons. No caso anisotrópico o método utilizado fornece resultados mais precisos uma vez que na aproximação de Born os termos de primeira ordem são dominantes. Consideramos pequenas perturbações $\eta(\mathbf{r}, t)$ sobre o fundo clássico w_{cl} , substituímos $w = w_{cl} + \eta$ na lagrangeana (3.5) e minimizamos até termos de segunda ordem em η . As flutuações quânticas obedecem a uma equação de onda do tipo:

$$\nabla^2 \eta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \eta = U_1 \eta + U_2 \bar{\eta}, \quad (3.7)$$

onde os potenciais U_1 e U_2 são dados por:

$$\begin{aligned} U_1 = & 8\partial_z \ln(1 + |w_{c,1}|^2) \left[\partial_{\bar{z}} - \frac{\lambda}{(1 + |w_{c,1}|^2)} \partial_{\bar{z}} + \frac{4\lambda|w_{c,1}|^2}{(1 + |w_{c,1}|^2)^2} \partial_{\bar{z}} \right. \\ & \left. + \frac{4\lambda w_{c,1}(\partial_{\bar{z}} \bar{w}_{c,1})}{(1 + |w_{c,1}|^2)^2} \right] + \frac{8\lambda \bar{w}_{c,1}(\partial_z w_{c,1})}{(1 + |w_{c,1}|^2)^2} \partial_{\bar{z}} - \frac{8\lambda(\partial_z w_{c,1})(\partial_{\bar{z}} \bar{w}_{c,1})}{(1 + |w_{c,1}|^2)^2} \\ & - \frac{8\lambda w_{c,1}(\partial_{\bar{z}} \bar{w}_{c,1})}{(1 + |w_{c,1}|^2)^2} \partial_{\bar{z}} - \frac{2\lambda|w_{c,1}|^2}{(1 + |w_{c,1}|^2)^2} \nabla^2 \end{aligned} \quad (3.8)$$

e

$$\begin{aligned} U_2 = & \frac{16\lambda w_{c,1}^2}{(1 + |w_{c,1}|^2)^2} [\partial_z \ln(1 + |w_{c,1}|^2) \partial_{\bar{z}} + \partial_{\bar{z}} \ln(1 + |w_{c,1}|^2) \partial_z] \\ & - \frac{8\lambda w_{c,1}(\partial_z w_{c,1})}{(1 + |w_{c,1}|^2)^2} \partial_{\bar{z}} - \frac{2\lambda w_{c,1}^2}{(1 + |w_{c,1}|^2)^2} \nabla^2. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Os potenciais tem alcance finito da ordem do raio $R = 2\xi$ do skyrmion uma vez que para distâncias superiores o campo assume uma configuração aproximadamente de Néel. No limite assintótico, $\mathbf{r} \rightarrow \infty$, as soluções para a equação (3.7) são ondas planas e substituindo $\eta(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{i\omega t}$ encontramos uma relação de dispersão relativística $\omega(q) = (1 + \lambda)^{1/2} qc$ para as onda de spin. Observe que as excitações são mágnons com energia que se anula no limite de longos comprimentos de onda (não massivas) como previsto pelo teorema de Goldstone. Na região central, os potenciais U_1 e U_2 atuam como centros de espalhamento para as ondas de spin de modo que ao se afastarem o único resultado é uma mudança na matriz de fase δ_{mn} . A correção na energia devido às flutuações quânticas é calculada por meio da energia de Casimir [38, 47]:

$$E_q = E_{cl} - \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{1/a} \frac{\partial \omega}{\partial q} \text{Tr} \delta_{mn}(q) dq \quad (3.10)$$

e devido ao traço na equação acima somente os termos diagonais na matriz de fase são importantes. Em coordenadas cilíndricas, os desvios em primeira ordem de δ_{nn} são obtidos através da aproximação de Born:

$$\delta_n^{(1)} = -\frac{\pi}{2} \int_0^\infty r dr \langle J_{|n|}(qr) e^{-in\varphi} (U_1 + U_2) e^{in\varphi} J_{|n|}(qr) \rangle_\varphi \quad (3.11)$$

Na equação acima todos os termos do tipo $-\pi/2 \int_0^\infty dr g(\mathbf{r}) J_{|n|}(qr) (dJ_{|n|}(qr)/dr)$ são nulos uma vez que $\sum_{-\infty}^\infty J_{|n|}^2(qr) = 1$. Após alguns cálculos chegamos ao resultado:

$$\text{Tr} \delta_{mn}(q) = -2\pi\lambda \left[1 - \sum_{n=1}^{L/a} \frac{qR}{2} (2n-1) K_{n-1} \left(\frac{qR}{2} \right) I_n \left(\frac{qR}{2} \right) \right], \quad (3.12)$$

onde K_n e I_n são funções de Bessel modificadas, L é o tamanho do sistema e a é o espaçamento de rede. No limite $\lambda = 0$ o traço é nulo e nenhuma correção de primeira ordem tem efeito na energia (nesse caso é necessário considerar termos de ordem superior). Os cálculos são feitos numericamente e a dependência da energia em função do tamanho do skyrmion R (a separação dos spinons) para dois intervalos de λ é mostrada nos gráficos (3.2) e (3.4).

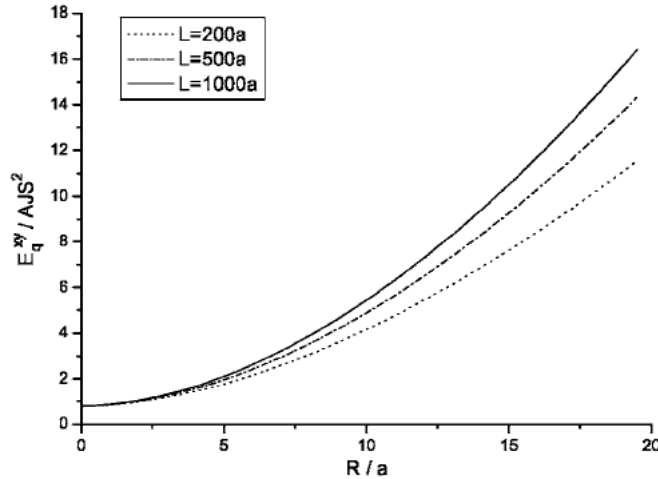


Figura 3.2: Energia do skyrmion em função da separação R para $-1 < \lambda < 0$ e diferentes tamanhos de rede L .

No intervalo $-1 < \lambda < 0$ a energia do skyrmion aumenta com o seu tamanho R (para $R > 1,76a$), e portanto é energeticamente favorável para o sistema manter os

spinons próximos, ou seja, existe uma interação de atração entre os constituintes do skyrmion. Tal comportamento é semelhante ao confinamento de quarks na eletrodinâmica quântica, inclusive a dependência quase linear (para $R/a > 10$). Uma vez que os spinons não tem liberdade para deslocarem, estando assim confinados, o sistema possui ordem de longo alcance (somente a região próxima ao centro do skyrmion é desordenada). Embora não seja visível no gráfico, a energia possui um valor mínimo para $R = 1,76a$ e assim para valores menores que esse temos uma repulsão entre os spinons. Podemos notar que o tamanho da rede tem pouca influência sobre os resultados. Os três casos realizados ($L = 200a$, $L = 500a$ e $L = 1000a$) fornecem resultados semelhantes no intervalo analisado para R (uma das aproximações usadas foi $R \ll L$). No gráfico (3.3) é plotada a energia para $\lambda = -1/2$ em função do tamanho do sistema L para diferentes valores de R . Pelos gráficos podemos comprovar que no limite $L \gg R$ a energia tende a um valor constante independente do tamanho da rede.

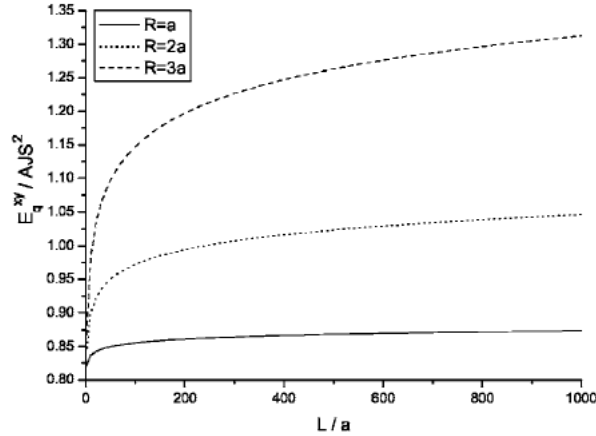


Figura 3.3: Energia do skyrmion em função do tamanho da rede L para $R = a$, $R = 2a$ e $R = 3a$.

Já para $\lambda > 0$ os resultados mostram que a energia diminui com o aumento do raio do skyrmion. No gráfico (3.4), plotamos a energia como função da distância R para três valores positivos da constante de anisotropia. Nesse caso a interação entre os spinons é sempre repulsiva, levando o sistema ao um estado de deconfinamento. Como consequência, o ordenamento é reduzido drasticamente e podemos esperar uma

fase sem OLA mesmo em temperaturas nulas. Portanto, o modelo sigma não-linear anisotrópico fornece um candidato para o cargo de líquido de spin bidimensional.

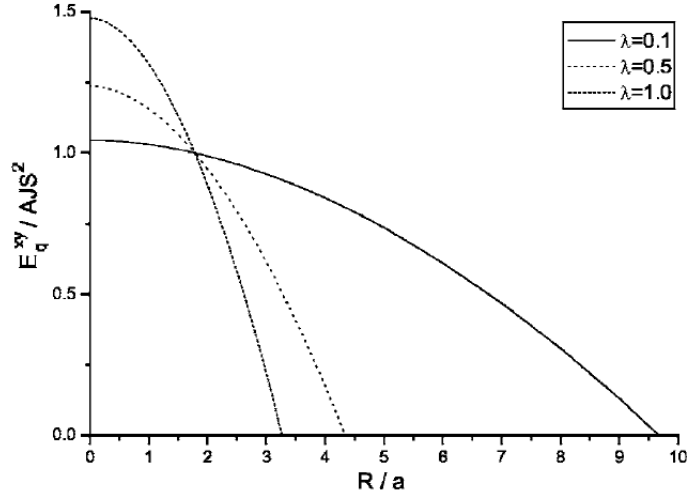


Figura 3.4: Energia do skyrmion em função da separação R para uma rede com $L = 100a$ e diferentes valores positivos de λ .

É importante ressaltar que tal modelo não descreve exatamente um antiferromagneto anisotrópico, além do fato dele ser uma aproximação contínua. Embora as propriedades topológicas garantam forte estabilidade aos skyrmions, a natureza discreta de uma rede real pode alterar tal comportamento. Durante o trabalho, foi desenvolvido modelos computacionais com a esperança de comprovar a influência do termo anisotrópico em sistemas antiferromagnéticos porém, nenhum resultado conclusivo foi alcançado devido à grande dificuldade de estabilizar as soluções topológicas numa rede discreta de tamanho finito (não foi possível encontrar condições de contorno adequadas). Esperamos que num futuro próximo, soluções para os problemas encontrados durante as simulações computacionais sejam desenvolvidas e assim obter resultados que possam ser comparados com os atuais. No capítulo seis outro modelo anisotrópico é estudado via o formalismo bosônico de Schwinger e encontramos duas fases distintas (uma com OLA e outra desordenada).

Capítulo 4

Influência de defeitos não magnéticos nas soluções topológicas

Até agora temos considerado sistemas magnéticos puros, ou seja, sem defeitos ou impurezas na rede. Porém, por melhor que sejam as técnicas experimentais sistemas livres de imperfeições não são reais e modelos que considerem tais características são importantes. Além disso, sistemas dopados também são importantes pois são responsáveis por drásticas mudanças nas propriedades dos materiais. Podemos citar, por exemplo, os cupratos que normalmente são isolantes entretanto tornam-se supercondutores à baixas temperaturas quando dopados. Veremos nesse capítulo um sistema magnético dopado com uma única impureza (vista como buraco ou um íon não magnético na rede) embora o caso com mais defeitos possa ser facilmente estendido apenas com algumas aproximações extras. O objetivo principal do trabalho é estudar o efeito da impureza não-magnética sobre as soluções topológicas. Veremos que existe uma interação atrativa entre o defeito e o skyrmion, que à curtas distâncias produz um movimento de oscilação do tipo harmônico simples além de verificar a dependência de tais oscilações com parâmetros físicos do sistema.

4.1 O MSNL dopado

O ponto inicial do trabalho é adotar a aproximação contínua do modelo sigma não-linear para o antiferromagneto bidimensional, válida no limite de baixas temperaturas e longos comprimentos de onda [27, 33, 34]. Tal modelo é representado pela ação:

$$Z = \int \mathcal{D}[\mathbf{n}] e^{-2\pi i S \Theta[\mathbf{n}] - \frac{1}{g} \int (\partial_\mu \mathbf{n}) (\partial^\mu \mathbf{n}) d^{d+1} \mathbf{x}}, \quad (4.1)$$

na qual $\Theta[\mathbf{n}]$ é a fase de Berry, $g = 2\sqrt{2d}a^{d-1}/S$ a constante de acoplamento, $\mu = ((1/c)\partial/\partial x_0, \partial/\partial x_1, \partial/\partial x_2, \dots, \partial/\partial x_d)$ com $c = \sqrt{2d}JSa$ a velocidade das ondas de spin (para longos comprimentos de onda) e \mathbf{n} é o campo de Néel. Tal aproximação foi obtida por Haldane para um sistema semi-clássico, i.e. com S grande, porém os resultados obtidos através do MSNL são coerentes com dados experimentais mesmo para spins pequenos ($S = 1/2, 1, \dots$). O limite para baixas temperaturas é outra incógnita no trabalho de Haldane. Embora seja adotado que o modelo só é válido em baixas temperaturas não é fornecido nenhum limite superior para a temperatura a partir do qual a aproximação se torna inadequada. Esses dois problemas foram resolvidos por Dai e Zhang [49] aproximadamente duas décadas após os primeiros trabalhos na área. Os autores demonstraram que a concordância entre resultados obtidos pelo MSNL e dados experimentais para spins pequenos não é mera coincidência e, com algumas modificações na constante de acoplamento g e na velocidade das onda de spin c , além da introdução de cortes nos limites de integração para τ , é possível adotar o MSNL como modelo contínuo para sistemas com qualquer valor de S . No mesmo trabalho Dai e Zhang também obtêm o limite superior para baixas temperaturas por meio de um *cutoff* no espaço dos momentos devido à natureza discreta da rede.

No desenvolvimento realizado por Haldane, rápidas variações na integral de caminho (associadas às flutuações quânticas de curta alcance) são ignoradas e somente o limite para longos comprimentos de onda é considerado. Essa aproximação tem sido largamente utilizada mesmo não sendo claramente justificada. Na verdade, em teoria quântica de campos ambos tipos de variações na integral de caminho (rápidas e lentas) estão presentes e ao levar esse fato em conta, Dai e Zhang demostram que o modelo

sigma não-linear descrito pela equação (4.1) também representa o antiferromagneto para spin arbitrário, sendo necessário apenas substituir g e c por:

$$g_s = \frac{2}{S} \sqrt{d + \frac{T_\Lambda}{2SJ}} \quad (4.2)$$

e

$$c_s = 2JSa \sqrt{d + \frac{T_\Lambda}{2SJ}} \quad (4.3)$$

respectivamente, além de introduzir um corte $\tau_\Lambda = 1/T_\Lambda$ na integral do tempo imaginário. Observe que no limite $S \gg 1$ recuperamos os resultados encontrados por Haldane. T_Λ fornece o limite superior para baixas temperaturas, sendo dado por:

$$T_\Lambda = \frac{SL^2}{4\pi^2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{16\pi^2 d}{L^2}} \right), \quad (4.4)$$

no qual $\Lambda = L/a = 2\sqrt{2\pi} [\Gamma(d/2 + 1)]^{1/d} / a$ é um corte no espaço dos momentos devido à natureza discreta da rede. O termo da fase de Berry permanece inalterado e é dado pelas mesmas expressões encontradas no trabalho do Haldane [27, 33]. Para $d = 2$ temos que o modelo contínuo é válido dentro do limite $0 \leq T/J < T_\Lambda/J \lesssim 1,94S$.

Adotamos como defeito um furo circular na rede de raio ρ localizado na posição \mathbf{r} (a ideia é que ele atue como uma impureza não-magnética). Representamos essa impureza por um potencial $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ que vale 1 se $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| < \rho$ e 0 para $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| > \rho$. Obviamente a remoção de alguns sítios no sistema altera a energia do sistema uma vez que existem menos interações, além da contribuição da energia magnetostática associada às bordas do buraco introduzido. Mas no nosso caso vamos considerar que o tamanho do defeito é muito pequeno comparado com o tamanho da rede L , de modo que a energia magnetostática possa ser desprezada. Vamos também desconsiderar a mudança na fase de Berry devido à presença do defeito. As cadeias que têm spins removidos contribuem de forma diferente das cadeias inteiras no cálculo de $\Theta[\mathbf{n}]$, porém ao considerar que poucos sítios são removidos a diferença não é significativa e continuamos com a consideração de que a fase total é nula [36, 37].

Vamos utilizar a projeção estereográfica [38] para escrever o campo \mathbf{n} em termos de um campo complexo $w = w_1 + iw_2$. Uma vez que o campo de Néel é representado

em função dos ângulos polar e azimutal como $\mathbf{n} = (\cos\phi\sin\theta, \sin\phi\sin\theta, \cos\theta)$, a correspondência entre w e \mathbf{n} é dada por:

$$w = \frac{n_1 + in_2}{1 + n_3} = \coth\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi}. \quad (4.5)$$

Em termo de w a lagrangiana para a ação (4.1) é escrita como:

$$L = \frac{2}{g} \int d^2x \left[\frac{1}{c^2} \frac{|\partial w / \partial t|^2}{(1 + |w|^2)^2} - 4 \frac{|\partial_{\bar{z}} w|^2}{(1 + |w|^2)^2} - 2 \frac{(\partial_z w)(\partial_{\bar{z}} \bar{w}) - (\partial_{\bar{z}} w)(\partial_z \bar{w})}{(1 + |w|^2)^2} \right] V(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \quad (4.6)$$

onde $\partial_z = (1/2)(\partial_x + i\partial_y)$ e $\partial_{\bar{z}} = (1/2)(\partial_x - i\partial_y)$. Como é conhecido, o estado fundamental é composto por uma configuração *staggered* (campo de Néel) e as excitações de mais baixa energia são onda de spin com relação de dispersão relativística. Existem também soluções de energia finita $E = 4\pi|Q|/g$ [40] (skyrmions) onde:

$$Q = \frac{1}{\pi} \int \frac{(\partial_z w)(\partial_{\bar{z}} \bar{w}) - (\partial_{\bar{z}} w)(\partial_z \bar{w})}{(1 + |w|^2)^2} d^2x. \quad (4.7)$$

é a carga topológica expressa nas coordenadas estereográficas. Essas soluções são obtidas impondo a condição $\partial_{\bar{z}} w = 0$ e para o caso $|Q| = 1$, com condição de contorno $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$ quando $\mathbf{r} \rightarrow \infty$ e $(0, 0, -1)$ na origem, temos que:

$$w = \frac{z - s}{R}, \quad (4.8)$$

onde s e R são parâmetros associados com a posição e o tamanho do skyrmion, respectivamente. Devido à invariância sobre translação, vamos assumir que a distância s é medida em relação ao centro do defeito.

A dinâmica do campo w é obtida ao permitir a dependência temporal para os parâmetros s e R . Na verdade, somente a posição do skyrmion é permitida evolução temporal. A cada um dos parâmetros é associado um termo cinético do tipo $\frac{1}{2}m_\varphi\dot{\varphi}$ porém, Nazario e Santiago [50] demonstraram que no caso de um sistema sem defeitos, a dependência temporal de R provoca a divergência na energia pois $m_R \rightarrow \infty$. A mesma situação ocorre no caso do sistema dopado e somente a posição da solução topológica pode apresentar dinâmica. Portanto, vamos considerar que o tamanho do skyrmion permanece fixo enquanto ele se desloca pela superfície do material, ou seja, $w(t) = \frac{z-s(t)}{R}$.

A presença do defeito perturba o sistema através de uma interação entre o skyrmion e o buraco na rede. Isso ocorre pois retirar spins no centro da solução topológica não produz a mesma mudança na energia que a remoção numa região afastada da origem. Uma vez que a energia é dada por $E = 4\pi|Q|/g$ podemos avaliar a diferença causada pelo defeito calculando a variação na carga topológica. De fato, ao retirarmos parte da rede o campo \mathbf{n} não é mais mapeamento completamente sobre a esfera unitária e $|Q| < 1$. Partindo desse argumento, substituímos o campo $w = (z - s(t))/R$ na lagrangiana (4.6) e integramos sobre todo o espaço para obtermos assim uma lagrangiana efetiva que leva em consideração a presença do defeito. O resultado exato é dado por:

$$L_{\text{eff}}(s(t), \dot{s}(t)) = \frac{4\pi}{g} [1 - f(s(t), \rho, R)] \left(\frac{\dot{s}^2}{2c^2} - 1 \right), \quad (4.9)$$

onde

$$f(s(t), \rho, R) = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\rho^2 - (R^2 + s^2)}{\sqrt{(R^2 + s^2)^2 + \rho^2(\rho^2 + 2R^2 - 2s^2)}} \right]. \quad (4.10)$$

Associamos $f(s, \rho, R)$ com a redução na carga topológica por meio de $Q = 1 - f(s, \rho, R)$. No limite $\rho \rightarrow 0$ (sem defeito) recuperamos o valor unitário da carga topológica e para os casos em que $\rho \neq 0$ plotamos um gráfico de Q em função da posição do skyrmion s para três valores de R , dado pela Figura (4.1). Como pode ser visto, na presença do defeito, o valor de Q é sempre menor que a unidade, mas no limite em que a separação entre o skyrmion e o buraco é muito maior que ρ recuperamos o valor unitário para a carga topológica. Dessa forma a influência do defeito é menor na região afastada da origem na qual o custo energético de retirar alguns spins é pequeno.

Definimos o termo de massa $M = M(s) = (1 - f(s, \rho, R)) \frac{4\pi}{gs c_s^2}$ de modo a reescrever a equação (4.9) como:

$$L_{\text{eff}}(s(t), \dot{s}(t)) = M(s) \left(\frac{\dot{s}^2}{2} - c_s^2 \right). \quad (4.11)$$

A dinâmica do skyrmion (representada pela variação temporal da posição s) provoca a dependência espacial de M e uma análise mais aprofundada mostra que essa característica está relacionada a não homogeneidade do espaço, principalmente na região central. A física aqui é semelhante àquela da relatividade geral no qual a presença de matéria

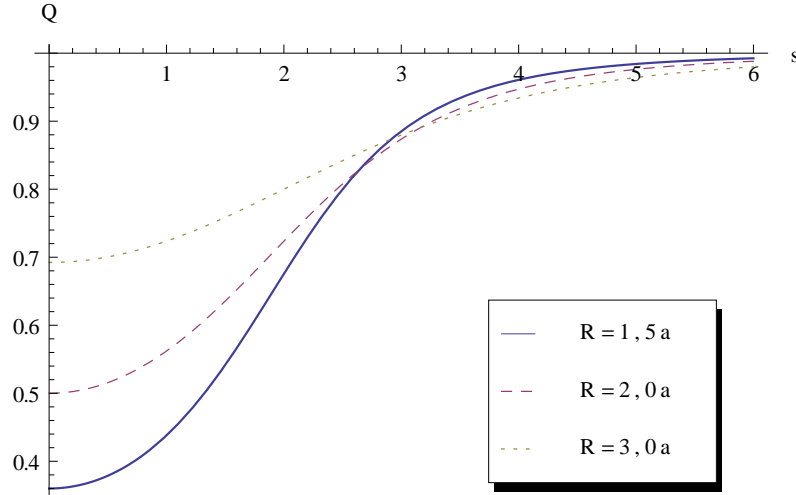


Figura 4.1: Carga topológica em função da posição do skyrmion para $R = 1,5a$, $R = 2a$ e $R = 3a$. Em todos os casos $\rho = 2a$.

(energia) distorce o espaço-tempo e as trajetórias dos corpos são dadas pelas geodésicas (curvas que minimizam a energia). No nosso caso, a presença do defeito faz o papel da matéria-energia curvando o espaço por meio da alteração na carga topológica e o skyrmion se move sobre a geodésica dada pela minimização da lagrangeana (4.11). No final das contas, a dinâmica dos modos coletivos de excitação dos spins é governada tanto por fatores topológicos quanto geométricos.

A evolução temporal do skyrmion pode ser obtida resolvendo as equações de Euler-Lagrange, $\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0$, para a lagrangeana efetiva (4.11). Obtemos desse modo a equação diferencial:

$$M(s)\ddot{s} + \frac{1}{2} \frac{\partial M}{\partial s} (2c_s^2 - \dot{s}^2) = 0 \quad (4.12)$$

ou, substituindo a equação para M :

$$\left[\sqrt{(R^2 + s(t)^2)^2 + \rho^2(\rho^2 + 2R^2 - 2s(t)^2)} + 2(R^2 + s^2 - \rho^2) \right] \ddot{s}(t) + \frac{4R^2 \rho^2 s(t)(2c_s^2 - \dot{s}(t)^2)}{(R^2 + s(t)^2)^2 + \rho^2(\rho^2 + 2R^2 - 2s(t)^2)} = 0. \quad (4.13)$$

Obviamente a equação acima não pode ser resolvida exatamente e vamos tratar somente um caso aproximado. Consideramos a situação na qual temos grandes skyrmions ($R \gg$

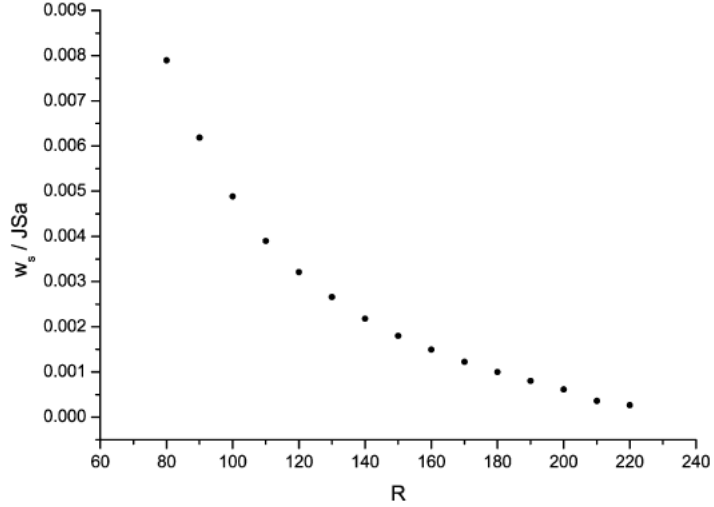


Figura 4.2: A frequência de oscilação do skyrmion em função de R .

ρ) e o deslocamento deles é pequeno comparado ao tamanho do defeito ($s \ll \rho$), ou seja, vamos considerar somente os termos de mais baixa ordem em s e nas suas derivadas. Dessa forma obtemos uma equação diferencial simplificada dada por:

$$\ddot{s}(t) + \frac{8\rho^2 c_s^2}{3R^4} s(t) = 0. \quad (4.14)$$

Tal equação é característica de um movimento harmônico simples (MHS) e dessa forma o skyrmion, dentro dos limites especificados, executa um movimento de oscilação em torno do defeito cuja frequência é dada por:

$$\omega_s \simeq 5,63 \frac{\rho}{R^2} JSa. \quad (4.15)$$

Vemos então que a frequência de oscilação aumenta linearmente como o tamanho do defeito enquanto diminui com o inverso do quadrado do tamanho R do skyrmion. Na referência [51] Mól et al. encontraram uma dependência de $1/R$ para a frequência de oscilação, diferente no nosso caso de $1/R^2$, porém como nossos resultados carregam diversas aproximações, eles devem ser tratados somente de modo qualitativo.

Na figura 4.2 são plotados os gráficos da frequência ω_s em função do tamanho do defeito ρ e do tamanho do skyrmion R , obtidos numericamente da equação (4.13). Mesmo no caso numérico, no qual são usadas menos aproximações, os resultados con-

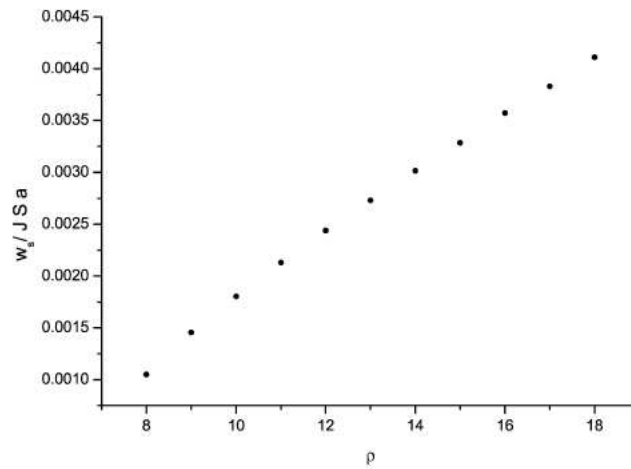


Figura 4.3: A frequência de oscilação do skyrmion obtida numericamente em função de ρ .

cordam com a equação (4.14). A dependência de ω_s com ρ é claramente linear enquanto uma análise de regressão para o segundo gráfico fornece $\omega_s = 5,63 \frac{J S a}{R^{2,04}}$ (tomado $\rho = 1$).

Capítulo 5

Bósons de Schwinger

São inúmeros os trabalhos desenvolvidos nos quais os operadores de spin são representados por meio de operadores bosônicos. Tais representações são vantajosas em relação a outros métodos, como as aproximações contínuas, pois permitem trabalhar com praticamente todo tipo de termo extra inserido na hamiltoniana de Heisenberg. Existem também formalismos semelhantes utilizando-se operadores fermiônicos (ou seja, nos quais os operadores obedecem a relações de anti-comutação) porém tais métodos não serão tratados aqui. Nos ocuparemos somente do formalismo dos bósons de Schwinger, sendo que os outros dois métodos mais usados, Dyson-Maleev [52, 53] e Holstein-Primakoff [54], são comentados brevemente por questão de comparação.

5.1 Representações bosônicas

Vamos primeiro definir de modo geral os operadores de criação e destruição e suas propriedades. Definido $|0\rangle$ como o estado de vácuo, ou seja, um estado que não possui nenhuma partícula, o operador de criação a_i^\dagger quando aplicado ao vácuo, cria uma partícula, digamos do tipo a , na posição i . Vamos definir esse novo estado como $|1_i\rangle = a_i^\dagger|0\rangle$. O operador destruição a_i quando aplicado no estado $|1_i\rangle$ destrói a partícula a que existe na posição i (se não existir nenhuma partícula na posição i ele fornece como resultado o vetor nulo). Aplicações sucessivas do operador criação (destruição) criam (destroem) sucessivas partículas. Vamos adotar que os operadores

a_i^\dagger e a_i obedecem à uma relação de comutação $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$. É fácil mostrar que o operador número definido como $n_i = a_i^\dagger a_i$ conta o número de partículas a na posição i e assim, se o sistema está no estado $|\psi\rangle$, o número total de partículas é dado por $\sum_i a_i^\dagger a_i |\psi\rangle$.

No formalismo de Dyson-Maleev os operadores de spin são definidos em termos de apenas um tipo de operador criação/destruição de modo que $S_i^- = a_i^\dagger$, $S_i^+ = (2S - a_i^\dagger a_i)a_i$ e $S_i^z = S - a_i^\dagger a_i$ (se as sub-redes são tratadas separadamente, são necessários dois tipos de operadores). O principal problema dessa representação é que os operadores de spin são compostos por termos com até três operadores que precisam ser desacoplados (em hamiltonianas mais complexas a situação pode mais complicado). Já na representação de Holstein-Primakoff os operadores de spin são dados por $S_i^- = \sqrt{2s} (1 - \frac{1}{2s} n_i)^{1/2} a_i$, $S_i^+ = \sqrt{2s} a_i^\dagger (1 - \frac{1}{2s} n_i)^{1/2}$ e $S_i^z = s - a_i^\dagger a_i$, onde n_i é o operador número. O formalismo de Holstein-Primakoff também apresenta alguns problemas. O primeiro é a raiz quadrada que aparece nos operadores S_i^- e S_i^+ e segundo, a restrição do número de partículas que é feita por meio de um vínculo não-holônomo $n_i \leq 2s$ (que não pode ser introduzido na hamiltoniana). O primeiro problema pode ser contornado expandindo as raízes em torno de $a_i^\dagger a_i / 2s$ contudo, durante a aplicação desse método é necessário assumir uma direção preferencial para os spins apontarem e então aplicar uma expansão em ondas de spin. Dessa forma não é possível utilizar Holstein-Primakoff para estudar fases desordenadas, uma vez que ocorre a quebra da simetria $O(3)$.

Na teoria dos bósons de Schwinger [55–61] os problemas vistos no parágrafo anterior não existem. Cada operador de spin é representado pelo produto de dois operadores criação/destruição, sem termos de terceira ordem ou raiz quadrada. O vínculo que fixa o número de partículas é holônomo sendo facilmente introduzido na hamiltoniana por meio de um multiplicador de Lagrange. Por último, o formalismo de Schwinger não fixa nenhuma direção preferencial para os spins e pode ser então usado tanto para estudar fases ordenadas quanto desordenadas.

De modo geral, cada sítio é representado por N tipos, ou sabores (*flavors*), de bósons e dizemos que a teoria apresenta uma simetria interna $SU(N)$. Em sistemas

magnéticos tradicionais, a simetria obedecida pelos spins é do tipo $O(3)$ (a simetria de rotação do espaço interno) que pode ser mapeada em uma simetria $SU(2)$. Portanto, são necessários, no mínimo, dois tipos de bósons para representar um sistema magnético (veremos que as vezes é conveniente a representação por meio de uma teoria do tipo $SU(3)$). Porém as aproximações de campo médio utilizadas na teoria de Schwinger fornecem resultados exatos somente no limite $N \rightarrow \infty$ e, para os casos de N finito correções são necessárias. Tais correções são feitas através de expansões de ordem $1/N$ calculadas através dos diagramas de Feynman. Para a simetria $SU(2)$ o valor de N não é verdadeiramente grande, contudo os resultados obtidos pela teoria de campo médio são relativamente bons e, embora seja possível, não vamos nos preocupar em realizar correções perturbativas. É importante ressaltar também que teorias bosônicas não são capazes de tratar fases geométricas (de Berry) e assim não predizem alguns resultados conhecidos, como por exemplo, o gap de Haldane. Entretanto, como já foi comentado, as fases de Berry em sistemas bidimensionais geralmente são irrelevantes e não introduzem nenhum efeito novo ao sistema e, uma vez que consideramos apenas modelos em duas dimensões espaciais no trabalhos realizados, não vamos nos preocupar com tais fases.

5.2 Representação via bósons de Schwinger $SU(2)$

No formalismo $SU(2)$ representamos os operadores de spin por meio de dois bósons de Schwinger, a e b , definidos de forma que os operadores de spin são dados por:

$$S_i^+ = S_i^x + iS_i^y = a_i^\dagger b_i, \quad (5.1)$$

$$S_i^- = S_i^x - iS_i^y = b_i^\dagger a_i, \quad (5.2)$$

$$S_i^z = \frac{1}{2}(a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i). \quad (5.3)$$

As relações $[S_i^+, S_j^-] = 2S_i^z \delta_{ij}$, $[S_i^z, S_i^\pm] = \pm S_i^\pm \delta_{ij}$ permanecem válidas, porém para manter $S_i^2 = S(S+1)$ é necessário impor o vínculo $a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i = 2S$ que fixa o número de bósons em cada sítio. Os estados de spin são relacionados aos operadores

bosônicos pela equação:

$$|S, m\rangle = \frac{(a^\dagger)^{S+m}}{\sqrt{(S+m)!}} \frac{(b^\dagger)^{S-m}}{\sqrt{(S-m)!}} |0\rangle, \quad (5.4)$$

onde $|0\rangle$ é o vácuo no espaço de Fock. No caso de spin-1/2 temos, por exemplo, que os estados *up* e *down* são $|1/2, 1/2\rangle = |\uparrow\rangle = a^\dagger|0\rangle$ e $|1/2, -1/2\rangle = |\downarrow\rangle = b^\dagger|0\rangle$, respectivamente.

A hamiltoniana de Heisenberg para um ferromagneto pode ser escrita então como:

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \\ &= -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} [\mathcal{F}_{ij}^\dagger \mathcal{F}_{ij} - 2S(S+1)] \\ &= -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} [:\mathcal{F}_{ij}^\dagger \mathcal{F}_{ij}: - 2S^2] \end{aligned} \quad (5.5)$$

com $J > 0$ e $\mathcal{F}_{ij} \equiv a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j$ sendo o operador ligação (*bond operator*) para o ferromagneto. No caso de um acoplamento antiferromagnético a situação é semelhante e a hamiltoniana é expressa como:

$$\begin{aligned} H &= J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \\ &= -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} [\mathcal{A}_{ij}^\dagger \mathcal{A}_{ij} - 2S^2] \end{aligned} \quad (5.6)$$

com $J > 0$ e $\mathcal{A}_{ij} \equiv a_i b_j - b_i a_j$ sendo o operador ligação equivalente. É comum fazer uma rotação de π ao redor do eixo y em uma das sub-redes de forma que $a_j \rightarrow -b_j$ e $b_j \rightarrow a_j$. Desse modo $\mathcal{A}_{ij} = a_i a_j + b_i b_j$ enquanto o vínculo permanece o mesmo.

Observe que mesmo na representação de Schwinger, a hamiltoniana é composta por termos de quarta ordem nos operadores a e b . Tal problema é contornado por meio da transformação de Hubbard-Stratonovich [62, 63] (demonstrada no apêndice A) que reduz a ordem dos operadores para dois via uma operação de campo médio. Embora na maioria dos casos a hamiltoniana seja escrita apenas em função de \mathcal{A}_{ij} ou de \mathcal{F}_{ij} dependendo do tipo de acoplamento existente, é possível trabalhar com os dois termos ao mesmo tempo (o que é necessário quando o acoplamento pode alternar entre ferro e antiferro).

5.3 Representação via bósons de Schwinger $SU(3)$

Na seção passada representamos a hamiltoniana de Heisenberg por meio de dois bósons $SU(2)$. Embora a representação $SU(2)$ se aplique a sistemas com qualquer valor de spin, em alguns casos de spin-1 uma representação via bósons $SU(3)$ [64] pode ser mais útil (como no caso no qual a hamiltoniana é composta pelo termo biquadrático além do termo bilinear). Em tal representação definimos um bóson para cada um dos três auto-estados do operador S^z . Por causa disso, não apenas os termos operadores de spin mas também os operadores de quadrúpolo (que serão visto nos capítulos seguintes) podem ser escritos como o produto de apenas dois bósons de Schwinger. Se utilizarmos o formalismo $SU(2)$ somente os operadores de spin podem ser escritos com um par de bósons enquanto para os operadores de quadrúpolo são necessário quatro deles. Sejam $|m_i = -1\rangle$, $|m_i = 0\rangle$ e $|m_i = +1\rangle$ os três auto-estados de S_i^z com autovalores $m = -1, 0, +1$ respectivamente, então:

$$|m_i = -1\rangle = a_{i,-1}^\dagger |0\rangle \quad (5.7)$$

$$|m_i = 0\rangle = a_{i,0}^\dagger |0\rangle \quad (5.8)$$

$$|m_i = +1\rangle = a_{i,+1}^\dagger |0\rangle \quad (5.9)$$

na qual $|0\rangle$ é o vácuo no espaço de Fock.

Como no caso $SU(2)$, definimos os operadores $F_{ij} \equiv a_{i,-1}a_{j,-1} + a_{i,0}a_{j,0} + a_{i,+1}a_{j,+1}$ para o caso ferromagnético e, após a rotação de uma das sub-redes, $A_{ij} \equiv a_{i,-1}^\dagger a_{j,-1} + a_{i,0}^\dagger a_{j,0} + a_{i,+1}^\dagger a_{j,+1}$ para o antiferromagneto. Da mesma forma, a hamiltoniana possui termos de quarta ordem que são desacoplados pela transformação de Hubbard-Stratonovich e um vínculo da forma $a_{i,-1}^\dagger a_{i,-1} + a_{i,0}^\dagger a_{i,0} + a_{i,+1}^\dagger a_{i,+1} = S$ deve ser imposto para fixar o número de bósons em cada sítio.

5.4 Solução para o antiferromagneto

Vamos resolver o modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin-1/2 em duas dimensões via a teoria de bósons de Schwinger $SU(2)$ de modo a apresentar alguns detalhes dos métodos utilizados para a solução dos problemas apresentados nos capítulos

seguintes¹. A hamiltoniana é dada por:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathcal{A}_{ij}^\dagger \mathcal{A}_{ij} + \sum_i \lambda_i \left(a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i - 2S \right), \quad (5.10)$$

onde descartamos o termo constante S^2 e introduzimos o vínculo por meio de um multiplicador de Lagrange λ_i . O primeiro passo é desacoplar o termo $\mathcal{A}_{ij}^\dagger \mathcal{A}_{ij}$ de forma a obter uma ação quadrática nos operadores a que possa ser integrada pelos métodos conhecidos. Tal desacoplamento é realizado via a transformação de Hubbard-Stratonovich:

$$\mathcal{A}_{ij}^\dagger \mathcal{A}_{ij} \rightarrow - \left(\langle \mathcal{A}_{ij} \rangle \mathcal{A}_{ij}^\dagger + \langle \mathcal{A}_{ij}^\dagger \rangle \mathcal{A}_{ij} + \langle \mathcal{A}_{ij}^\dagger \rangle \langle \mathcal{A}_{ij} \rangle \right). \quad (5.11)$$

Adotamos que os valores médios $\langle \mathcal{A}_{ij} \rangle = \langle \mathcal{A}_{ij}^\dagger \rangle = A$ e $\langle \lambda_i \rangle = \lambda$ são reais e então a hamiltoniana é escrita então como:

$$H = \frac{zNA^2}{2} - 2N\lambda S + \frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} A \left(a_i^\dagger a_j^\dagger + b_i^\dagger b_j^\dagger + h.c. \right) + \sum_i \lambda \left(a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i \right), \quad (5.12)$$

com z sendo o número de vizinhos e N o número total de sítios. Após realizar a transformação de Fourier obtemos:

$$\begin{aligned} H = & \frac{zNA^2}{2} - 2N\lambda \left(S + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[\lambda \left(a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + h.c. \right) \right. \\ & \left. + zJA\gamma_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger + b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger + h.c. \right) \right], \end{aligned} \quad (5.13)$$

onde $\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\delta}$ (\mathbf{r}_δ são as posições dos vizinhos) é o chamado fator de estrutura. Se a rede é quadrada o fator de estrutura é real porém isso nem sempre acontece. Na rede hexagonal, por exemplo, $\gamma_{\mathbf{k}}$ apresenta uma parte imaginária que pode ser eliminada por meio de uma transformação linear nos operadores, como mostrado no capítulo 7.

Ao diagonalizar a hamiltoniana devemos tomar o cuidado para que os novos operadores mantenham a relação de comutação. Um meio de garantir que eles continuem com suas propriedades bosônicas é diagonalizar a hamiltoniana via a transformação de Bogoliubov [65–67].

$$\alpha_{\mathbf{k}1} = \cosh\theta_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} - \sinh\theta_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger \quad (5.14)$$

$$\alpha_{\mathbf{k}2} = \cosh\theta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} - \sinh\theta_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}^\dagger \quad (5.15)$$

¹Para maiores detalhes ver a referência [55].

ou inversamente:

$$a_{\mathbf{k}} = \cosh\theta_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}1} + \sinh\theta_{\mathbf{k}}\alpha_{-\mathbf{k}1}^{\dagger} \quad (5.16)$$

$$b_{\mathbf{k}} = \cosh\theta_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}2} + \sinh\theta_{\mathbf{k}}\alpha_{-\mathbf{k}2}^{\dagger} \quad (5.17)$$

Quando substituídos na hamiltoniana resultam em:

$$\begin{aligned} H = & \frac{zNA^2}{2} - 2N\lambda \left(S + \frac{1}{2} \right) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},m} \left[(\lambda \cosh 2\theta_{\mathbf{k}} + zJA\gamma_{\mathbf{k}} \sinh 2\theta_{\mathbf{k}}) \left(\alpha_{\mathbf{k}m}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}m} + \alpha_{-\mathbf{k}m} \alpha_{-\mathbf{k}m}^{\dagger} \right) + \right. \\ & \left. + (\lambda \sinh 2\theta_{\mathbf{k}} + zJA\gamma_{\mathbf{k}} \cosh 2\theta_{\mathbf{k}}) \left(\alpha_{\mathbf{k}m}^{\dagger} \alpha_{-\mathbf{k}m}^{\dagger} + \alpha_{-\mathbf{k}m} \alpha_{\mathbf{k}m} \right) \right]. \quad (5.18) \end{aligned}$$

O valor de $\theta_{\mathbf{k}}$ é escolhido de modo a anular os termos não diagonais $\alpha_{\mathbf{k}m}^{\dagger} \alpha_{-\mathbf{k}m}^{\dagger}$ e $\alpha_{-\mathbf{k}m} \alpha_{\mathbf{k}m}$. Para tal, $\theta_{\mathbf{k}}$ deve satisfazer a relação:

$$\tanh 2\theta_{\mathbf{k}} = -\frac{zA\gamma_{\mathbf{k}}}{\lambda}. \quad (5.19)$$

O resultado da hamiltoniana diagonalizada é:

$$H = \frac{zNA^2}{2} - 2N\lambda \left(S + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},m} E_{\mathbf{k}} \left(\alpha_{\mathbf{k}m}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}m} + \frac{1}{2} \right), \quad (5.20)$$

sendo que a energia é dada por $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\lambda^2 - (zJA\gamma_{\mathbf{k}})^2}$. Ao expandirmos a energia em torno do ponto de mínimo, $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ ou $\mathbf{k} = (0, 0)$, obtemos uma relação de dispersão relativística para as excitações de spin:

$$E_{\mathbf{k}}^2 = \Delta^2 + \frac{c^2 z^2}{4} \mathbf{k}^2, \quad (5.21)$$

com $\Delta = \sqrt{\lambda^2 - (zJA)^2}$ e $c = \sqrt{2}zA$ sendo o gap e a velocidade das ondas de spin, como esperado para sistemas antiferromagnéticos.

Os parâmetros λ e A devem ser determinados pela minimização da energia livre de Helmholtz:

$$\begin{aligned} F = & -\frac{1}{\beta} \ln \left(\text{Tre}^{-\frac{\beta H}{2}} \right) \\ = & \frac{zNA^2}{2} - 2N \left(S + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \right) \right], \quad (5.22) \end{aligned}$$

que leva as seguintes equações auto-consistentes:

$$S + \frac{1}{2} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\lambda}{\sqrt{\lambda^2 - (zAJ\gamma_{\mathbf{k}})^2}} \left(n_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right), \quad (5.23)$$

$$A = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{zAJ\gamma_{\mathbf{k}}^2}{\sqrt{\lambda^2 - (zAJ\gamma_{\mathbf{k}})^2}} \left(n_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right), \quad (5.24)$$

onde $n_{\mathbf{k}} = (e^{\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}} - 1)^{-1}$ é a função densidade de estados para bósons.

As equações acima podem ser resolvidas por métodos de interação padrão para qualquer temperatura finita. Em temperatura nula somente o caso unidimensional apresenta solução. Segundo Takahashi [57, 68], a não existência de soluções está relacionada com o ordenamento do estado fundamental. Dessa forma os bósons de Schwinger produzem resultados coerentes com os já conhecidos, desordem em temperatura finita para os casos uni e bidimensionais assim como para uma dimensão espacial em temperatura nula. Observe que embora tal formalismo preveja corretamente o estado líquido de spin para sistemas unidimensionais, ele não faz distinção entre spins inteiro e semi-inteiro. Essa falha se deve, como já foi comentado, a incapacidade da teoria de tratar as fases geométricas (que são responsáveis pelo gap de Haldane).

Em duas dimensões à temperatura nula ocorre a condensação dos bósons de Schwinger para algum \mathbf{k}^* e nesse caso $E_{\mathbf{k}^*} = 0$ (excitações sem gap) o que causa a divergência das equações de campo médio. Tal problema é resolvido separando o termo divergente do somatório em \mathbf{k} e introduzindo um novo parâmetro ρ que mede o nível de condensação dos bósons. O mesmo raciocínio é aplicado na condensação de Bose-Einstein para o tratamento do hélio líquido, por exemplo. Dessa forma é possível obter as soluções para os parâmetros A e λ e conseqüentemente os dados físicos que nós interessam. A função de correlação para os spins, por exemplo, ao utilizar os operadores na base diagonal e expressa como:

$$\begin{aligned} S(\mathbf{q}) &= \frac{1}{N} \langle S_{\mathbf{q}}^+ S_{-\mathbf{q}}^- \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \cosh [2(\theta_{\mathbf{k}} + \theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\pi})] \left(n_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) \left(n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\pi} + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{4} \right\}, \end{aligned} \quad (5.25)$$

e então a susceptibilidade magnética é dada por:

$$\chi_0 = \frac{1}{2T} S(\mathbf{0}) = \frac{1}{T} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}} + 1). \quad (5.26)$$

O comprimento de correlação também pode ser encontrado por meio da transformação de Fourier da equação (5.25). No espaço a real, a função correlação é escrita como:

$$S(\mathbf{r}_{ij}) = |f(\mathbf{r}_{ij})|^2 - |g(\mathbf{r}_{ij})|^2 - \frac{1}{4}\delta_{ij}, \quad (5.27)$$

onde

$$f(\mathbf{r}_{ij}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(n_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{ij}}}{E_{\mathbf{k}}} \quad (5.28)$$

e

$$g(\mathbf{r}_{ij}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} \frac{(n_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{ij}}}{E_{\mathbf{k}}}. \quad (5.29)$$

Pode ser mostrado que a função $f(\mathbf{r}_{ij})$ é nula se i e j pertencem à sub-redes diferente enquanto $g(\mathbf{r}_{ij}) = 0$ se os dois sítios escolhidos pertencem a mesma sub-rede. Para baixas temperaturas podemos aproximar as funções acima por:

$$f(\mathbf{r}_{ij}) \propto (1 + e^{i\pi\cdot\mathbf{r}_{ij}}) \left(\frac{|\mathbf{r}_{ij}|}{\xi} \right)^{1/2} e^{-\mathbf{r}_{ij}\Delta/2} \quad (5.30)$$

e

$$g(\mathbf{r}_{ij}) \propto (1 - e^{i\pi\cdot\mathbf{r}_{ij}}) \left(\frac{|\mathbf{r}_{ij}|}{\xi} \right)^{1/2} e^{-\mathbf{r}_{ij}\Delta/2} \quad (5.31)$$

com Δ sendo o gap de energia. Dessa forma a função correlação no limite de baixas energias é expressa como:

$$S(\mathbf{r}_{ij}) \propto e^{\pi\cdot\mathbf{r}_{ij}} \left(\frac{\xi}{|\mathbf{r}_{ij}|} \right) e^{-\mathbf{r}_{ij}/\xi}, \quad (5.32)$$

e o comprimento de correlação é $\xi = \Delta^{-1}$, como esperado.

A interação com um campo magnético externo é introduzida no modelo pelo termo $-B \sum_i S_i^z = -B \sum_i (a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i)$, com B sendo a intensidade do campo externo (na direção z). O campo magnético quebra a degenerescência da energia entre os estados *up* e *down*, de forma que $E_{\mathbf{k},s} = \sqrt{(\lambda - sB)^2 - (zA\gamma_{\mathbf{k}})^2}$ e a magnetização espontânea é dada pelo valor médio de S^z no limite do campo magnético indo à zero, ou seja:

$$\begin{aligned} m_0 &= \lim_{B \rightarrow 0} \frac{1}{N} \sum_{i,s} \langle s a_{i,s}^\dagger a_{i,s} \rangle \\ &= \lim_{B \rightarrow 0} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},s} \frac{\lambda - sB}{\sqrt{(\lambda - sB)^2 - (zA\gamma_{\mathbf{k}})^2}} \left[n_{\mathbf{k},s} + \frac{1}{2} \right] \\ &= S + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{4\pi^2} \frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}} = \rho. \end{aligned} \quad (5.33)$$

onde foram usadas as equações para o estado de condensação. Ao resolver a integral encontramos que a magnetização espontânea é dada por $m_0 = S - 0,1966$ (para o caso bidimensional) e portanto o sistema apresenta ordenamento em $T = 0$ para todos valores de spin S fisicamente aceitáveis. O mesmo raciocínio para $d = 1$ fornece $m_0 = 0$ e, mais uma vez, é encontrado um estado desordenado independente do valor de spin, concordando com os resultados já encontrados nos capítulos anteriores via a aproximação contínua.

Capítulo 6

O modelo biquadrático anisotrópico

O modelo de Heisenberg biquadrático anisotrópico em duas dimensões será o tema desse capítulo. Tal modelo é representado pela hamiltoniana:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} [J_1(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) + J_2(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2] + \sum_i D(S_i^z)^2, \quad (6.1)$$

na qual os termos J_1 , J_2 e D definem a intensidade dos termos bilinear, biquadrático e anisotrópico de sítio único, respectivamente. Tanto o termo biquadrático quanto o anisotrópico tem grande influência sobre o modelo puramente bilinear. Enquanto o termo biquadrático é responsável pelo surgimento de diversas fases [12–21], o termo anisotrópico provoca a separação entre dois regimes separados por um gap no espectro de energia [69, 70].

O termo biquadrático surge de perturbações de quarta ordem na interação de troca entre elétrons e em geral seu valor é pequeno quando comparado com o termo bilinear. Porém existem casos que as duas constantes têm intensidades da mesma ordem. Uma situação comum é escrever $J_1 = J \cos \theta$ e $J_2 = J \sin \theta$ e para o caso unidimensional as diversas fases para θ são bem conhecidas. Os pontos $\theta = \pi$ e $\theta = 0$ correspondem ao ferro e antiferromagneto puro, respectivamente. No intervalo $\pi/2 < \theta < 5\pi/4$ temos um regime ferromagnético estável com OLA, em $-3\pi/4 < \theta < -\pi/4$ uma fase dimerizada, para $-\pi/4 < \theta < \pi/4$ a fase antiferromagnética com gap de Haldane (para spin-1) e uma fase trimerizada em $\pi/4 < \theta < \pi/2$. Alguns pontos possuem solução exata, como por exemplo os ângulos $\theta = \pm\pi/4$ que são resolvidos pelo Ansatz de

Bethe. Já para caso bidimensional existem várias lacunas a serem preenchidas. Ivanov et al. [20, 21], por meio de um modelo contínuo semelhante ao MSNL, mostraram que a região $\theta \gtrsim 5\pi/4$ é governada por uma fase nemática. Chubukov [12], por meio de uma representação bosônica do tipo Holstein-Primakoff também mostrou que para $\theta \lesssim 5\pi/4$ existe uma fase nemática desordenada. Outros estudos mostram uma fase dimerizada que se estende sobre a fase ferromagnética no intervalo $5\pi/4 < \theta < 7\pi/4$. No trabalho apresentado, vamos considerar somente o regime antiferromagnético para pequenos valores do termo biquadrático.

Já o termo anisotrópico, que aparece por exemplo no composto $N_i(C_2H_8N_2) - 2NO_2(ClO_4)$ (NEMP) [71–74], só é importante em sistemas com spin maior ou igual a um, uma vez que para spin-1/2 ambos autoestados, *up* e *down*, produzem a mesma variação na energia. Nos antiferromagnetos unidimensionais de spin-1, a anisotropia de sítio único elimina a degenerescência na energia entre os autovalores de S^z e divide o gap de Haldane em dois, um devido aos estados com $S^z = 0$ e outro para $S^z = \pm 1$. Entretanto a principal característica do termo anisotrópico é separar o sistema entre as chamadas fase de D pequeno e D grande [69, 70], divididas por um valor crítico D_c . Na fase abaixo de D_c o sistema é sem gap e ordenado enquanto na região de D grande o sistema entra em um regime com gap no espectro de excitação e sem OLA. No trabalho apresentado estamos interessados em ambas as fases e cada uma delas é estudada separadamente, uma vez que os métodos aplicados não servem em ambos os limites. No regime de D pequeno aplicamos o formalismo bosônico de Schwinger $SU(2)$ enquanto para $D > D_c$ utilizamos o chamado *bond operator*.

6.1 A fase de D pequeno

Vamos usar a representação de bósons de Schwinger $SU(2)$ [55–61] para valores de D abaixo do valor crítico D_c . Como cada operador de spin é representado por meio de dois operadores bosônicos, o termo biquadrático é composto por termos de ordem oito, inviáveis de serem tratados. O primeiro passo para reduzir a ordem desses operadores é desacoplar o termo biquadrático antes de aplicar a representação

bosônica. Desconsiderando o termo anisotrópico por enquanto, a função partição (no caso estático) é dada por:

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}[\mathbf{S}_i] e^{-i \int dt H}, \quad (6.2)$$

com:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\langle i,j \rangle} [J_1(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) + J_2(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2] \\ &= \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ \frac{1}{J_2} \left[J_2(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) + \frac{J_1}{2} \right]^2 - \frac{J_1^2}{4J_2} \right\}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Aplicamos a transformação de Hubbard-Stratonovich [62,63] sobre o termo quadrático de modo que:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} [2J_2 \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) - J_2 \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle^2 + J_1(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)], \quad (6.4)$$

no qual $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle$ representa o valor médio. Note que no limite de $J_2 = 0$ recuperamos o modelo de Heisenberg bilinear. Definimos dois operadores bosônicos a e b tais que $S_i^+ = a_i^\dagger b_i$, $S_i^- = b_i^\dagger a_i$ e $S_i^z = (a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i)/2$ e assim o termo $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ é escrito como:

$$(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) = -\frac{1}{2} \mathcal{A}_{ij}^\dagger \mathcal{A}_{ij} + S^2, \quad (6.5)$$

onde o operador $\mathcal{A}_{ij} = a_i a_j + b_i b_j$ (após uma rotação de π em torno do eixo- y para uma das sub-redes). Portanto:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ \left[2J_2 \left(-\frac{1}{2} \langle \mathcal{A}_{ij}^\dagger \mathcal{A}_{ij} \rangle + S^2 \right) + J_1 \right] \left(-\frac{1}{2} \mathcal{A}_{ij}^\dagger \mathcal{A}_{ij} + S^2 \right) - \right. \\ &\quad \left. - J_2 \left(-\frac{1}{2} \langle \mathcal{A}_{ij}^\dagger \mathcal{A}_{ij} \rangle + S^2 \right)^2 \right\} + \sum_i \lambda_i (a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i - 2S), \end{aligned} \quad (6.6)$$

na qual foi implementado o vínculo $\sum_i (a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i) = 2S$ por meio de um multiplicador de Lagrange. Aplicamos a transformação de Hubbard-Stratonovich novamente ao operador $\mathcal{A}_{ij}^\dagger \mathcal{A}_{ij}$ e adotamos que $\langle \mathcal{A}_{ij}^\dagger \rangle = \langle \mathcal{A}_{ij} \rangle = A$ e $\langle \lambda_i \rangle = \lambda$. Dessa maneira após algum cálculo chegamos ao resultado:

$$\begin{aligned} H &= \left[\left(J_2 S^2 + \frac{J_1}{2} \right) A^2 - \frac{3J_2}{4} A^4 \right] \frac{Nz}{2} - 2N\lambda S + \lambda \sum_i (a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i) - \\ &\quad - \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{A}{2} \left[J_1 + 2J_2 S^2 \left(1 - \frac{A^2}{2S^2} \right) \right] (\mathcal{A}_{ij}^\dagger + \mathcal{A}_{ij}). \end{aligned} \quad (6.7)$$

Ao adicionar o termo anisotrópico à hamiltoniana, ele é escrito em função dos operadores bosônicos da seguinte forma:

$$D \sum_i (S_i^z)^2 = \frac{D}{4} \sum_i (a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i)^2 = -D \sum_i a_i^\dagger b_i^\dagger a_i b_i, \quad (6.8)$$

onde foi usado o vínculo $a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i = 2S$ e um termo constante é desprezado. Existem outras maneiras de representar o termo biquadrático, porém essa forma resultou em melhores resultados. Da mesma forma, o termo acima é desacoplado por meio da transformação:

$$a_i^\dagger b_i^\dagger a_i b_i \rightarrow P(a_i b_i + a_i^\dagger b_i^\dagger) - P^2, \quad (6.9)$$

sendo que $\langle a_i^\dagger b_i^\dagger \rangle = \langle a_i b_i \rangle = P$. Também é possível desacoplar o termo acima separando os operadores a dos operadores b contudo, o método utilizado aqui se mostrou mais útil. A hamiltoniana completa então é dada por:

$$\begin{aligned} H = & H_0 + \tilde{A} \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i a_j + b_i b_j + a_i^\dagger a_j^\dagger + b_i^\dagger b_j^\dagger) + \\ & + \sum_i \left[\lambda (a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i) - PD(a_i b_i + a_i^\dagger b_i^\dagger) \right], \end{aligned} \quad (6.10)$$

com o termo constante:

$$H_0 = \left(\frac{J_1}{2} A^2 + J_2 S^2 A^2 - \frac{3J_2}{4} A^4 \right) \frac{Nz}{2} - 2N\lambda S + NDP^2 \quad (6.11)$$

e

$$\tilde{A} = - \left(\frac{J_1}{2} A + J_2 S^2 A - \frac{J_2}{2} A^3 \right). \quad (6.12)$$

Após a transformação de Fourier, temos que a hamiltoniana no espaço dos momentos é representada por:

$$H = H_0 - N\lambda + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^\dagger H_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}, \quad (6.13)$$

sendo $\beta_{\mathbf{k}}^\dagger = (a_{\mathbf{k}}^\dagger \ b_{\mathbf{k}}^\dagger \ a_{-\mathbf{k}} \ b_{-\mathbf{k}})$ e a matriz \tilde{H} :

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \lambda & 0 & \tilde{A}z\gamma_{\mathbf{k}} & -PD \\ 0 & \lambda & -PD & \tilde{A}z\gamma_{\mathbf{k}} \\ \tilde{A}z\gamma_{\mathbf{k}} & -PD & \lambda & 0 \\ -PD & \tilde{A}z\gamma_{\mathbf{k}} & 0 & \lambda \end{pmatrix}, \quad (6.14)$$

onde $\gamma_{\mathbf{k}} = \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{\delta}} = \frac{1}{2}(\cos k_x + \cos k_y)$ é o fator de estrutura e z representa o número de vizinhos em cada sítio (quatro para a rede quadrada). Ao diagonalizar a matriz \tilde{H} , devemos ter o cuidado de manter as relações de comutação sobre os operadores bosônicos. Isso pode ser feito trabalhando com a matriz

$$\eta\tilde{H} = \begin{pmatrix} I_{2x2} & 0 \\ 0 & -I_{2x2} \end{pmatrix} \tilde{H}, \quad (6.15)$$

ao invés de \tilde{H} . A transformação de Bogoliubov [65–67] em função de termos hiperbólicos produz o mesmo resultado, porém nesse caso ela é mais complicada de ser aplicada uma vez que a energia é não degenerada. Dessa forma, os autovalores obtidos para a energia são:

$$E_1 = \pm\sqrt{\lambda^2 - \left(\tilde{A}z\gamma_{\mathbf{k}} + PD\right)^2} \quad (6.16)$$

e

$$E_2 = \pm\sqrt{\lambda^2 - \left(\tilde{A}z\gamma_{\mathbf{k}} - PD\right)^2}. \quad (6.17)$$

Temos assim que na base diagonal a hamiltoniana é representada de forma semelhante a um sistema de osciladores harmônicos quânticos:

$$H = H_0 + \sum_{\mathbf{k},m} \left(c_{\mathbf{k}m}^{\dagger} c_{\mathbf{k}m} + \frac{1}{2} \right) E_m, \quad (6.18)$$

enquanto a energia livre de Helmholtz, $F = -(1/\beta)\text{Tr}(\ln e^{-\beta H/2})$, é expressa como:

$$F = H_0 + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k},m} \left\{ \ln \left[\sinh \left(\frac{\beta E_m}{2} \right) \right] \right\}, \quad (6.19)$$

no qual o somatório sobre \mathbf{k} é realizado sobre a primeira zona de Brillouin e $m = 1, 2$.

O próximo passo é determinar os parâmetros A , P e λ , dados pela minimização da energia livre. Impondo $\partial F/\partial A = \partial F/\partial P = \partial F/\partial \lambda = 0$ encontramos três equações auto-consistentes acopladas:

$$A = -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\coth \left(\frac{\beta E_1}{2} \right) \frac{\tilde{A}z\gamma_{\mathbf{k}} + PD}{E_1} + \coth \left(\frac{\beta E_2}{2} \right) \frac{\tilde{A}z\gamma_{\mathbf{k}} - PD}{E_2} \right] \gamma_{\mathbf{k}}, \quad (6.20)$$

$$P = \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\coth \left(\frac{\beta E_1}{2} \right) \frac{\tilde{A}z\gamma_{\mathbf{k}} + PD}{E_1} - \coth \left(\frac{\beta E_2}{2} \right) \frac{\tilde{A}z\gamma_{\mathbf{k}} - PD}{E_2} \right], \quad (6.21)$$

$$S + \frac{1}{2} = \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\coth \left(\frac{\beta E_1}{2} \right) \frac{\lambda}{E_1} + \coth \left(\frac{\beta E_2}{2} \right) \frac{\lambda}{E_2} \right]. \quad (6.22)$$

Como é notado, soluções exatas são impossíveis de serem obtidas devido a complexidade das equações. Para temperaturas finitas, as equações podem ser resolvidas numericamente por métodos de interação padrão mas no limite de $T = 0$ as equações acima não possuem solução. Para temperatura nula, ocorre a condensação dos bósons em um estado de energia nula para algum valor de \mathbf{k} , provocando assim a divergência das equações auto-consistentes e, segundo Takahashi [57, 68] isso caracteriza um estado ordenado. Nesse caso, devemos separar os termos divergentes antes de efetuar a integração (no limite contínuo) a fim de determinar os parâmetros de campo médio. Na rede quadrada, a energia E_1 atinge um mínimo para $\mathbf{k}^* = (\pi, \pi)$ enquanto a energia E_2 é nula se $\mathbf{k}^* = (0, 0)$ e portanto:

$$\lambda^2 = (4\tilde{A}\gamma_{\mathbf{k}^*} + PD)^2 \Rightarrow \lambda = |4\tilde{A}\gamma_{\mathbf{k}^*} + PD| \quad (6.23)$$

no estado condensado. Introduzimos uma quantidade ρ que mede o nível de condensação dos bósons dada por:

$$\rho = \left(S + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{4(2\pi)^2} \int_{BZ} d^2\mathbf{k} \left(\frac{\lambda}{E_1} + \frac{\lambda}{E_2}\right). \quad (6.24)$$

Dessa forma as equações para A e P , após a separação dos termos divergentes, são escritas no limite contínuo como:

$$A = 2\rho - \frac{1}{2(2\pi)^2} \int_{BZ} d^2\mathbf{k} \left(\frac{4\tilde{A}\gamma_{\mathbf{k}} + PD}{E_1} + \frac{4\tilde{A}\gamma_{\mathbf{k}} - PD}{E_2}\right) \gamma_{\mathbf{k}} \quad (6.25)$$

e

$$P = 2\rho + \frac{1}{4(2\pi)^2} \int_{BZ} d^2\mathbf{k} \left(\frac{4\tilde{A}\gamma_{\mathbf{k}} + PD}{E_1} - \frac{4\tilde{A}\gamma_{\mathbf{k}} - PD}{E_2}\right), \quad (6.26)$$

onde as integrais são realizadas sobre a primeira zona de Brillouin ($-\pi < k_x, k_y < \pi$).

No gráfico (6.1) é mostrado o nível de condensação dos bósons em função do termo anisotrópico D para diversos valores de J_2 . Note que $\rho \approx 0.85$ para $D = 0$ e diminui para valores próximos de 60% quando $D = 5$. Uma vez que podemos relacionar o nível de condensação com a magnetização [57, 75], vemos que para pequenos valores da constante anisotrópica o sistema é mais ordenado. Poderíamos extrapolar os resultados para encontrar o valor crítico D_c para o qual a condensação cai a zero, ou seja, o

ponto no qual ocorre a transição entre a fase com OLA e a desordenada. Porém, tal método fornece valores da constante anisotrópica bem acima do esperado. O problema ocorre pois ao considerar a condensação dos bósons, aproximamos a densidades de todos outros estados energéticos como próximas de zero, o que de fato nem sempre ocorre. Ao ajustar as densidades para valores mais realísticos podemos obter o valor de D_c com maior precisão, porém tal método é complicado e os pontos críticos podem ser encontrados de outra forma. Na próxima seção aplicamos o formalismo de *bond operator* no qual começamos na fase desordenada (i.e. com excitações massivas) e verificamos para qual valor de D o gap de energia se anula. Veremos que para todos valores de J_2 dentro do limite estudado, o valor crítico que separa as duas fases é próximo de cinco (unidades de J_1).

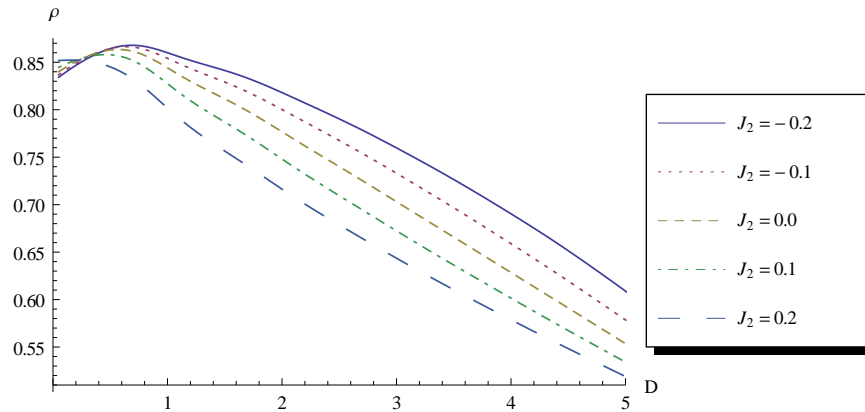


Figura 6.1: Nível da condensação em função da constante anisotrópica para diferentes valores de J_2 .

No gráfico (6.2) verificamos o nível de condensação para três valores diferentes da constante anisotrópica em função do termo biquadrático. Para $D = 1$ a maior parte dos bósons se encontram no mesmo estado energético enquanto para $D = 5$ a porcentagem desses bósons é bem inferior. Além disso, a condensação apresenta uma pequena queda em função de J_2 para todos valores de D , e uma análise detalhada da influência da constante biquadrática sobre o ordenamento do sistema é mais complicada de ser realizada. Nosso modelo trata especificamente dos casos nos quais $J_2 < J_1$ e para verificar o comportamento fora dessa região, ele deve ser reformulado.

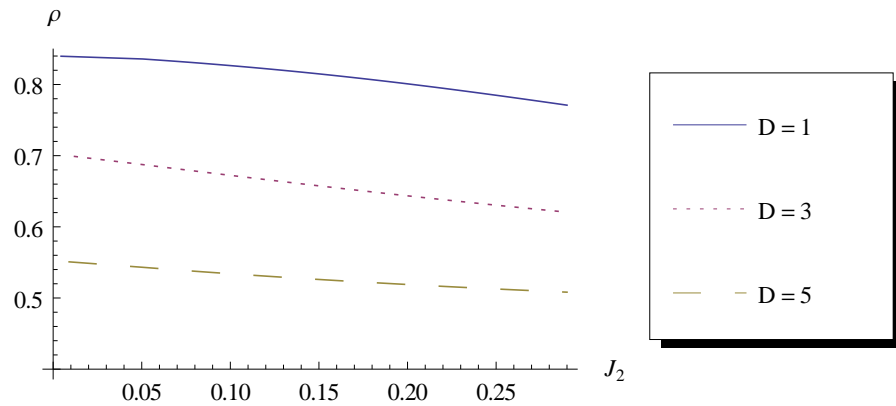


Figura 6.2: Nível da condensação em função da constante biquadrática para diferentes valores de D .

Já na figura (6.3) são mostradas as energia E_1 e E_2 no espaço dos momentos para $J_2 = 0.25$ e $D = 1$. Como foi comentado, a energia E_1 se anula nas bordas da primeira zona de Brillouin enquanto $E_2 = 0$ na origem.

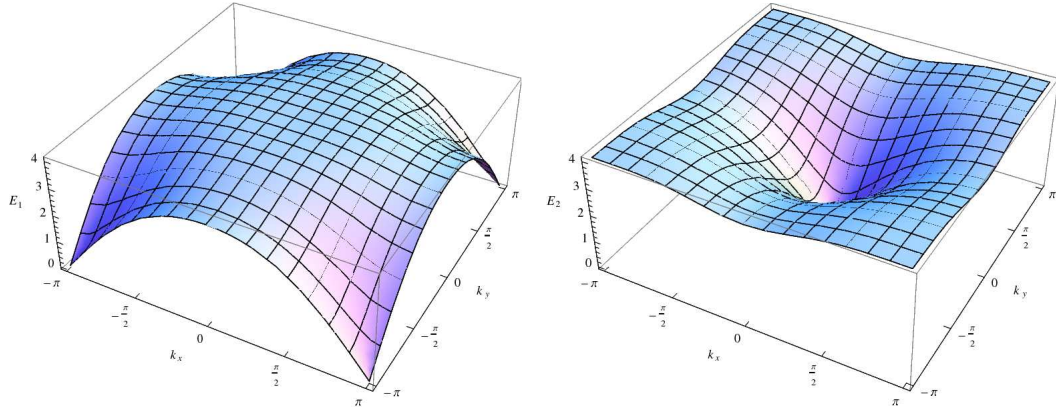


Figura 6.3: Energia E_1 (esquerda) e E_2 (direita) para $J_2 = 0.25$ e $D = 0.1$ (unidades de J_1).

6.2 A fase de D grande

Para valores acima de D_c vamos utilizar um formalismo de bósons de Schwinger $SU(3)$ denominado *bond operator* [70, 76]. Acima do valor crítico é esperado que o espectro de energia apresente um gap e tal resultado não pode ser obtido pelos métodos

desenvolvidos na seção anterior. O problema ocorre pois para resolver as soluções foi necessário impor a condensação dos bósons em um estado com energia nula e assim sempre teríamos um sistema sem gap. Porém na fase de D grande, por meio do *bond operator*, é possível obter solução para as equações auto-consistentes sem a necessidade de impor a condensação em um nível de energia zero. Veremos que o gap é diferente de zero somente para valores acima de D_c e portanto para valores pequenos da constante anisotrópica os resultados da seção são válidos. Começamos definindo três operadores bosônicos que tais:

$$|m_i = -1\rangle = a_{i,-1}^\dagger |0\rangle, \quad (6.27)$$

$$|m_i = 0\rangle = a_{i,0}^\dagger |0\rangle, \quad (6.28)$$

$$|m_i = +1\rangle = a_{i,+1}^\dagger |0\rangle, \quad (6.29)$$

ou seja, operador $a_{i,m}^\dagger$ cria uma partícula no sítio i com autovalor m para a componente z do spin. Dessa forma, os operadores de spin são escritos como:

$$S_i^+ = \sqrt{2}(a_{i,0}^\dagger a_{i,-1} + a_{i,1}^\dagger a_{i,0}), \quad (6.30)$$

$$S_i^- = \sqrt{2}(a_{i,-1}^\dagger a_{i,0} + a_{i,0}^\dagger a_{i,1}), \quad (6.31)$$

$$S_i^z = a_{i,1}^\dagger a_{i,1} - a_{i,-1}^\dagger a_{i,-1}. \quad (6.32)$$

As relações de comutação $[S_i^+, S_j^-] = 2S_i^z \delta_{ij}$ e $[S_i^z, S_j^\pm] = \pm S_i^\pm \delta_{ij}$ são mantidas nessa representação e para garantir que $S_i^2 = S(S+1) = 2$ devemos impor o vínculo $\sum_\mu a_{i,\mu}^\dagger a_{i,\mu} = S$.

Como os estados com $m = 0$ são menos energéticos que os estados com $m = \pm 1$, vamos considerar que os bósons $a_{i,0}$ sofrem uma condensação em temperatura nula (a diferença do caso passado é que agora não estamos exigindo que a energia no estado condensado seja nula). Sendo assim $\langle a_{i,0}^\dagger \rangle = \langle a_{i,0} \rangle = a_0$ e os operadores de spin passam a ser escritos como $S_i^+ = \sqrt{2}a_0(a_{i,-1} + a_{i,1}^\dagger)$ e $S_i^- = \sqrt{2}a_0(a_{i,1} + a_{i,-1}^\dagger)$. Nesse formalismo,

os três termos da hamiltoniana (bilinear, biquadrático e anisotrópico) são dados por:

$$\begin{aligned}
(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) &= S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \\
&= a_0^2 \left(a_{i,-1} a_{j,1} + a_{i,-1} a_{j,-1}^\dagger + a_{i,1}^\dagger a_{j,1} + a_{i,1}^\dagger a_{j,-1}^\dagger + a_{i,1} a_{j,-1} + \right. \\
&\quad \left. + a_{i,1} a_{j,-1}^\dagger + a_{i,-1}^\dagger a_{j,-1} + a_{i,-1}^\dagger a_{j,1}^\dagger \right) + \left(a_{i,1}^\dagger a_{i,1} a_{j,1}^\dagger a_{j,1} - \right. \\
&\quad \left. - a_{i,1}^\dagger a_{i,1} a_{j,-1}^\dagger a_{j,-1} - a_{i,-1}^\dagger a_{i,-1} a_{j,1}^\dagger a_{j,1} + a_{i,-1}^\dagger a_{i,-1} a_{j,-1}^\dagger a_{j,-1} \right), \tag{6.33}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2 &= \mathcal{A}_{ij}^\dagger \mathcal{A}_{ij} + 1 \\
&= (1 + a_0^4) - a_0^2 \left(a_{i,1}^\dagger a_{j,-1}^\dagger + a_{i,1}^\dagger a_{j,1}^\dagger + a_{i,1} a_{j,-1} + a_{i,-1} a_{j,1} \right) + \\
&\quad + \left(a_{i,-1}^\dagger a_{i,-1} a_{j,1}^\dagger a_{j,1} + a_{i,1}^\dagger a_{i,1} a_{j,-1}^\dagger a_{j,-1} + a_{i,-1}^\dagger a_{j,1}^\dagger a_{i,1} a_{j,-1} + \right. \\
&\quad \left. a_{i,1}^\dagger a_{j,-1}^\dagger a_{i,-1} a_{j,1} \right), \tag{6.34}
\end{aligned}$$

no qual $\mathcal{A}_{ij} = (a_{i,-1} a_{j,1} + a_{i,1} a_{j,-1} - a_{i,0} a_{j,0})$, e:

$$(S_i^z)^2 = \left(a_{i,1}^\dagger a_{i,1} - a_{i,-1}^\dagger a_{i,-1} \right)^2 = 1 - a_0^2. \tag{6.35}$$

Novamente a hamiltoniana é composta por termos de quarta ordem que são desacoplados via a transformação de Hubbard-Stratonovich e como resultado temos:

$$\begin{aligned}
H &= (1 - a_0^2)ND + (1 + a_0^4)J_2 \frac{Nz}{2} + N\lambda(a_0^2 - S) + J_1(1 - a_0^2)^2 \frac{Nz}{2} - \\
&\quad - 4\Delta^2 (J_2 - J_1) \frac{Nz}{2} + \lambda \sum_i \left(a_{i,1}^\dagger a_{i,1} + a_{i,-1}^\dagger a_{i,-1} \right) \\
&\quad + \sum_{\langle i,j \rangle} \left[a_0^2 \left(a_{i,1}^\dagger a_{j,1} + a_{i,-1}^\dagger a_{j,-1} + a_{i,1} a_{j,1}^\dagger + a_{i,-1} a_{j,-1}^\dagger \right) \right. \\
&\quad \left. - a_0^2 (J_2 - J_1) \left(a_{i,1}^\dagger a_{j,-1}^\dagger + a_{i,-1}^\dagger a_{j,1}^\dagger + a_{i,1} a_{j,-1} + a_{i,-1} a_{j,1} \right) \right. \\
&\quad \left. + 2(J_2 - J_1)\Delta \left(a_{i,1}^\dagger a_{j,-1} + a_{i,-1}^\dagger a_{j,1} + a_{i,1} a_{j,-1} + a_{i,-1} a_{j,1} \right) \right], \tag{6.36}
\end{aligned}$$

onde $\Delta = \langle a_{i,1} a_{j,-1} \rangle = \langle a_{i,1}^\dagger a_{j,-1}^\dagger \rangle$. No espaço dos momentos, a hamiltoniana é escrita como:

$$H = H_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \tilde{H} \beta_{\mathbf{k}}, \tag{6.37}$$

sendo o termo constante dado por:

$$H_0 = N \left[(1 - a_0^2)D + \frac{zJ_2}{2}(1 + a_0^4) + \lambda \left(a_0^2 - \frac{3}{2} \right) - 2z\Delta^2(J_2 - J_1) + \frac{zJ_1}{2}(1 - a_0^2)^2 \right] \quad (6.38)$$

e a matriz:

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \lambda + a_0^2 J_1 z \gamma_{\mathbf{k}} & 0 & 0 & J' \gamma_{\mathbf{k}} \\ 0 & \lambda + a_0^2 J_1 z \gamma_{\mathbf{k}} & J' z \gamma_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & J' z \gamma_{\mathbf{k}} & \lambda + a_0^2 J_1 z \gamma_{\mathbf{k}} & 0 \\ J' z \gamma_{\mathbf{k}} & 0 & 0 & \lambda + a_0^2 J_1 z \gamma_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (6.39)$$

no qual $J' = (J_1 - J_2)a_0^2 - 2\Delta(J_1 - J_2)$. O fator de estrutura $\gamma_{\mathbf{k}}$ é idêntico àquele apresentado na seção anterior. A hamiltoniana é diagonalizada seguindo os mesmos métodos já descritos e são encontrados os seguintes autovalores para a energia:

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\lambda + J_1 z a_0^2 \gamma_{\mathbf{k}})^2 - (J' z \gamma_{\mathbf{k}})^2}. \quad (6.40)$$

Novamente, os parâmetros a_0 , Δ e λ são obtidos pela minimização da energia livre de Helmholtz:

$$F = H_0 + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, m} \ln \left[\sinh \left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \right) \right], \quad (6.41)$$

e as equações auto-consistentes obtidas ao impor $\partial F / \partial a_0^2 = \partial F / \partial \Delta = \partial F / \partial \lambda = 0$ são dadas por:

$$a_0^2 = 2 - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \coth \left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \right) \frac{\lambda + J_1 z a_0^2 \gamma_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}, \quad (6.42)$$

$$\Delta = -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \coth \left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \right) \frac{(J_1 - J_2)a_0^2 - 2J_1\Delta(J_1 - J_2)}{E_{\mathbf{k}}} z \gamma_{\mathbf{k}}^2, \quad (6.43)$$

$$\lambda = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \coth \left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \right) \frac{(\lambda + J_1 a_0^2 z \gamma_{\mathbf{k}}) J_1 - (J' z \gamma_{\mathbf{k}})(J_1 - J_2)}{E_{\mathbf{k}}} z \gamma_{\mathbf{k}} + D + z J_1 - z a_0^2 (J_1 + J_2). \quad (6.44)$$

No limite de temperatura nula temos que $\coth \left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \right) \rightarrow 1$ já que não é necessário impor que o gap de energia seja nulo (para valores acima de D_c). Dessa forma as equações acima podem ser resolvidas por métodos padrões de interação sem a preocupação com

divergências e todos resultados físicos de interesse são determinados uma vez que os parâmetros a_0 , Δ e λ são conhecidos. Porém, abaixo do valor crítico D_c o gap se anula e as equações acima não possuem solução (essa fase foi tratada seção anterior) e portanto é importante conhecer o valor de D para o qual essa transição ocorre. No gráfico (6.4) é plotado o valor do gap de energia em função da constante anisotrópica D para alguns valores de J_2 . Como podemos ver, o gap se anula para todos os valores de J_2

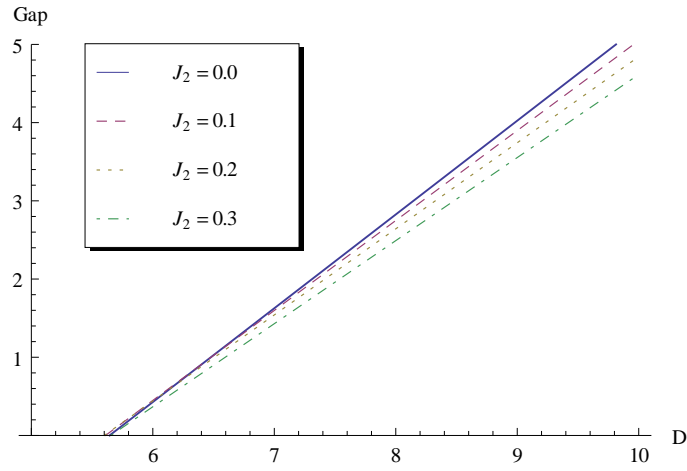


Figura 6.4: Gap de energia em função de D para diversas constantes biquadráticas J_2 .

aproximadamente no mesmo valor crítico $D_c = 5,5$ (unidades de J_1). A dependência de D_c com J_2 pode ser obtida de modo simples lembrando que no estado de condensação é esperado que o valor de a_0^2 seja próximo de 1 enquanto $\Delta \approx 0$. Dessa forma as equações auto-consistentes são aproximadas por:

$$a_0^2 = 2 - \int \frac{d\mathbf{k}^2}{4\pi^2} \frac{1}{\sqrt{1 - \Gamma_{\mathbf{k}}^2}}, \quad (6.45)$$

$$D - \frac{2}{g} - 2zJ_2 = \int \frac{d\mathbf{k}^2}{4\pi^2} \frac{zJ_1\gamma_{\mathbf{k}} - \frac{1}{g} + z(J_1 - J_2) + J_2z\gamma_{\mathbf{k}}\Gamma_{\mathbf{k}}}{\sqrt{1 - \Gamma_{\mathbf{k}}^2}}, \quad (6.46)$$

onde $g = \frac{a_0^2}{\lambda}$ e $\Gamma_{\mathbf{k}} = \frac{z(J_1 - J_2)g\gamma_{\mathbf{k}}}{1 + zJ_1\gamma_{\mathbf{k}}}$. No ponto de transição $E = 0$ e portanto $\Gamma_{\mathbf{k}} = \pm 1$ o que corresponde aos valores críticos $g_c = \frac{1}{z(2J_1 - J_2)}$ para $J_2 < 0.5J_1$ e $g_c = \frac{1}{zJ_2}$ se $J_2 > 0.5J_1$.

D_c é então dado por:

$$D_c = \frac{2}{g_c} + 2zJ_2 + \int \frac{d\mathbf{k}^2}{4\pi^2} \frac{zJ_1\gamma_{\mathbf{k}} - zJ_2 - g_c^{-1} - (J_1 - J_2)z\gamma_{\mathbf{k}}\Gamma_{\mathbf{k}}}{\sqrt{1 - \Gamma_{\mathbf{k}}^2}}. \quad (6.47)$$

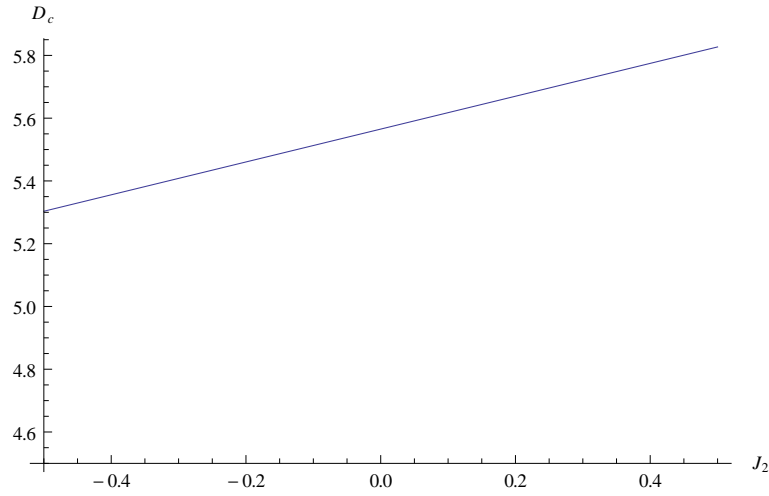


Figura 6.5: Valores críticos D_c em função de J_2 .

O método descrito fornece facilmente o comportamento de D_c em função de J_2 , porém os resultados são apenas aproximados. Um método mais confiável é analisar os pontos de D para os quais o gap se anula para alguns valores da constante biquadrática J_2 e então fazer uma extrapolação sobre os resultados obtidos. No gráfico (6.5) é mostrado a variação de D_c em função de J_2 obtido dessa forma (a diferença ao utilizar o primeiro método varia dependendo do valor de J_2 sendo em torno de 10% dentro do intervalo analisado). Nesse trabalho verificamos que a presença do termo anisotrópico é suficiente para separar o sistema em duas fases distintas. Para pequenos valores de D temos ordem de longo alcance, enquanto para valores acima de D_c o sistema é desordenado. É importante resaltar que essa desordem está associada a magnetização do sistema e outros tipos de ordenamento podem estar presentes, como por exemplo um estado do tipo *valence bond*. Embora tal desordem possa indicar um líquido de spin bidimensional, a sua presença é somente um argumento necessário e não suficiente. Tal conclusão a respeito do líquido de spin só pode ser alcançada após uma análise detalhada de todas as possíveis fases do sistema.

Capítulo 7

O modelo biquadrático na rede hexagonal de honeycomb

O foco desse capítulo será o estudo do modelo biquadrático sobre uma rede hexagonal do tipo *honeycomb*, que tem esse nome devido à sua estrutura semelhante à uma colmeia de abelhas, como mostrado na figura (7.1). Assim como a rede quadrada, a rede *honeycomb* é bipartite e no limite clássico aceita o campo de Néel como estado fundamental (obviamente para o caso antiferromagnético). Porém ela é mais susceptível à flutuações quânticas que a rede quadrada, ou qualquer outra rede em duas dimensões. Isso ocorre pois a rede *honeycomb* tem o menor número de vizinhos possíveis para um modelo bidimensional, três contra quatro no caso quadrado por exemplo. Dessa forma, poderia ser esperado um estado de líquido de spin, ou seja, ausência de ordem de longo alcance mesmo em temperatura nula. Estados de líquido de spin são característicos por manterem a simetria $O(3)$ do modelo de Heisenberg e são conhecidos como soluções para sistemas unidimensionais há muitos anos. Entretanto estados desordenados devido à flutuações quânticas em duas dimensões ainda são um mistério. Veremos que a geometria da rede de *honeycomb* ainda sim não é suficiente para alcançar um estado líquido de spin e tal sistema é ordenado mesmo em temperatura nula. O termo biquadrático, dentro dos limites estudados, também não demonstrou ser apto a obter tal estado. A rede hexagonal do tipo kagomé, ao contrário da *honeycomb*, apresenta uma frustração geométrica e nos últimos anos têm sido cogitada como a melhor candidata ao

posto de líquido de spin bidimensional [77, 78]. De fato, trabalhos recentes demonstram que a rede de kagomé não apresenta nenhuma magnetização espontânea mesmo em baixas temperaturas. E. Kermarrec et al [24] por meio de experimentos de ressonância de spin obtiveram que o material $\text{MgCu}_3(\text{OH}_6)\text{Cl}_2$ (composto típico com a geometria de kagomé) não apresenta nenhum ordenamento magnético mesmo em temperaturas próximas do zero absoluto (em torno de 20 mK).

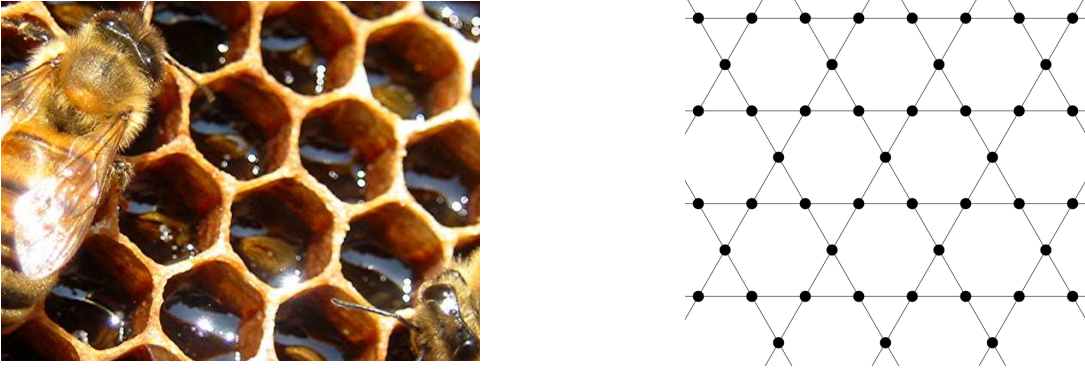


Figura 7.1: Na figura da esquerda, a semelhança entre a estrutura da rede *honeycomb* e a colmeia de abelhas. Na direita, uma rede hexagonal do tipo kagomé.

O fato da rede *honeycomb* não ser uma rede de Bravais é outra característica que deve ser levada em consideração no desenvolvimento do problema [79]. Sistemas com redes de Bravais podem ser tratados diretamente ou com separação das sub-redes e os resultados alcançados em ambos os casos são os mesmos. Contudo, quando a rede não é de Bravais o único tratamento possível consiste em trabalhar com cada sub-rede separadamente [80]. Quando isso é feito para a *honeycomb*, temos duas sub-redes hexagonais centradas conectadas como mostrado na figura (7.2), sendo que cada uma delas é uma rede de Bravais com vetores de rede $\mathbf{v}_1 = (\frac{3a}{2}, \frac{\sqrt{3}a}{2})$ e $\mathbf{v}_2 = (\frac{3a}{2}, -\frac{\sqrt{3}a}{2})$, com a sendo o espaçamento de rede.

O formalismo utilizado é novamente a representação bosônica de Schwinger [55–61]. Aparentemente o problema poderia ser tratado por meio de bósons em $SU(2)$, da mesma forma adotada na fase de D pequeno do capítulo anterior, porém os resultados encontrados são melhores quando utilizados os bósons em $SU(3)$ [64, 76]. Ao usar o formalismo em $SU(2)$ é preciso desacoplar o termo biquadrático antes mesmo de aplicar os bósons de Schwinger. Tal desacoplamento é baseado em uma teoria de campo médio

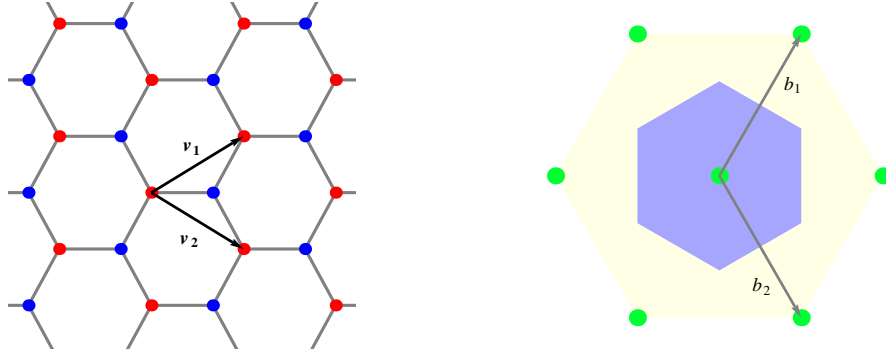


Figura 7.2: À esquerda é mostrada as duas sub-redes hexagonais centradas que formam a rede hexagonal enquanto do lado direito temos a primeira zona de Brillouin (hexágono central) e os vetores geradores da rede recíproca, \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 .

para as interações entre spins e os resultados são melhores quanto maior o número de vizinhos em cada sítio. Uma vez que na rede hexagonal estudada o número de vizinhos é menor que no caso da rede quadrada, optamos por adotar a representação em $SU(3)$ na qual o termo biquadrático é representado diretamente por meio de dois operadores bosônicos sem a necessidade de um desacoplamento.

7.1 Descrição bosônica do modelo

A hamiltoniana para o modelo de Heisenberg biquadrático é dada por:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} [J_1 (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) + J_2 (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2]. \quad (7.1)$$

Como o objetivo de eliminar o termo quadrático, definimos cinco operadores de quádrupolo:

$$Q_i^{(0)} = \frac{2(S_i^z)^2 - (S_i^x)^2 - (S_i^y)^2}{\sqrt{3}}, \quad (7.2)$$

$$Q_i^{(2)} = (S_i^x)^2 - (S_i^y)^2, \quad (7.3)$$

$$Q_i^{xy} = S_i^x S_i^y + S_i^y S_i^x, \quad (7.4)$$

$$Q_i^{yz} = S_i^y S_i^z + S_i^z S_i^y, \quad (7.5)$$

$$Q_i^{zx} = S_i^z S_i^x + S_i^x S_i^z, \quad (7.6)$$

e assim o termo biquadrático pode ser escrito como uma combinação linear dos operadores de spin e quadrúpolo:

$$(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2 = \frac{1}{2} (\mathbf{Q}_i \cdot \mathbf{Q}_j) - \frac{1}{2} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) + \frac{4}{3}. \quad (7.7)$$

Com uma redefinição da energia do estado fundamental podemos desprezar o fator constante $4/3$ na equação acima. Os cinco operadores de quadrúpolo juntamente com os três operadores de spin formam a base para o modelo de Heisenberg $SU(3)$ (quando $J_1 = J_2$). Nos casos considerados durante o trabalho $J_2 \neq J_1$ e a simetria para o modelo é do tipo $SU(2)$ (equivalente à simetria $O(3)$ apresentada pelos spins).

Adotamos três operadores bosônicos $a_{i,-1}^\dagger$, $a_{i,0}^\dagger$ e $a_{i,1}^\dagger$ que quando aplicados ao estado de vácuo do espaço de Fock, representado por $|0\rangle$, criam partículas com componente z de spin iguais a -1 , 0 e 1 , respectivamente. Todas relações de comutação entre os operadores de spin continuam válidas mas devemos impor o vínculo $\sum_\mu a_{i\mu}^\dagger a_{i\mu} = S$ pra garantir que $S_i^2 = S(S+1)$. Tal vínculo fixa o número de bósons em cada sítio e ao ser introduzido à hamiltoniana dá origem a um termo de massa para as excitações. Ao invés de representar os operadores de spin e quadrúpolo em termos dos bósons a , é mais conveniente definir uma nova base b na qual estes operadores são simétricos. Essa base é definida como:

$$b_{i1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{i,-1} - a_{i,1}), \quad (7.8)$$

$$b_{i2} = \frac{-i}{\sqrt{2}} (a_{i,-1} + a_{i,1}), \quad (7.9)$$

$$b_{i3} = a_{i,0}, \quad (7.10)$$

e termos dela os operadores de spin são representados como:

$$S_i^x = -i (b_{i2}^\dagger b_{i3} - b_{i3}^\dagger b_{i2}), \quad (7.11)$$

$$S_i^y = -i (b_{i3}^\dagger b_{i1} - b_{i1}^\dagger b_{i3}), \quad (7.12)$$

$$S_i^z = -i (b_{i1}^\dagger b_{i2} - b_{i2}^\dagger b_{i1}). \quad (7.13)$$

Já os operadores de quadrúpolo são reescritos da seguinte forma:

$$Q_i^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(b_{i1}^\dagger b_{i1} + b_{i2}^\dagger b_{i2} - 2b_{i3}^\dagger b_{i3} \right), \quad (7.14)$$

$$Q_i^{(2)} = - \left(b_{i1}^\dagger b_{i1} - b_{i2}^\dagger b_{i2} \right), \quad (7.15)$$

$$Q_i^{xy} = - \left(b_{i1}^\dagger b_{i2} + b_{i2}^\dagger b_{i1} \right), \quad (7.16)$$

$$Q_i^{yz} = - \left(b_{i2}^\dagger b_{i3} + b_{i3}^\dagger b_{i2} \right), \quad (7.17)$$

$$Q_i^{zx} = - \left(b_{i3}^\dagger b_{i1} + b_{i1}^\dagger b_{i3} \right). \quad (7.18)$$

O vínculo permanece da mesma forma, $\sum_\mu b_{i\mu}^\dagger b_{i\mu} = S$, e após alguns cálculos os operadores bilinear e biquadrático são descritos em termos de b por:

$$(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) = \sum_{\mu, \nu} \left(b_{i\mu}^\dagger b_{i\nu} b_{j\nu}^\dagger b_{j\mu} - b_{i\mu}^\dagger b_{i\nu} b_{j\mu}^\dagger b_{j\nu} \right) \quad (7.19)$$

e

$$(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2 = \sum_{\mu, \nu} b_{i\mu}^\dagger b_{i\nu} b_{j\mu}^\dagger b_{j\nu} + 1, \quad (7.20)$$

com $\mu, \nu = 1, 2, 3$. Note que todos os termos são de quarta ordem. Ao usar o formalismo em $SU(2)$ isso não ocorre pois as componentes de quadrúpolo não podem ser descritas somente com dois operadores bosônicos e assim a hamiltoniana, nesse caso, é composta também por termos de ordem oito. Como só podemos trabalhar com termos quadráticos, o caso com apenas termos de ordem quatro é mais conveniente uma vez que é necessário aplicar o desacoplamento de Hubbard-Stratonovich uma única vez. Por meio dos bósons b , a hamiltoniana (7.1) é expressa do seguinte modo:

$$H = \sum_{\langle i, j \rangle} \left[(J_2 - J_1) \mathcal{A}_{ij}^\dagger \mathcal{A}_{ij} + J_1 : \mathcal{B}_{ij}^\dagger \mathcal{B}_{ij} : \right], \quad (7.21)$$

onde os operadores \mathcal{A}_{ij} e \mathcal{B}_{ij} são definidos como:

$$\mathcal{A}_{ij} = \sum_\mu b_{i\mu} b_{j\mu} \quad \text{e} \quad \mathcal{B}_{ij} = \sum_\mu b_{i\mu}^\dagger b_{j\mu}. \quad (7.22)$$

No limite $J_1 = J_2$ temos o modelo ferromagnético $SU(3)$ que apresenta OLA em altas dimensões assim como uma fase nemática, e o caso $J_1 = 0$ representa o antiferromagneto $SU(3)$, invariante sobre transformações conjugadas na rede de Néel. A simetria $SU(3)$ é quebrada para os valores restantes de J_1 e J_2 e a simetria nesse

caso é $SU(2)$. No trabalho desenvolvido estaremos interessados somente no intervalo $J_1 > |J_2|$. Os valores de J_1 e J_2 são determinados pela forma com a qual a hamiltoniana é desacoplada. Existem diversas maneiras para realizar o desacoplamento e a escolhida para o trabalho fornece resultados somente no intervalo $|J_2| < J_1$. Como de costume, os termos quadráticos são desacoplados via a transformação de Hubbard-Stratonovich [62,63]:

$$\mathcal{A}_{ij}^\dagger \mathcal{A}_{ij} \rightarrow A \left(\mathcal{A}_{ij}^\dagger + \mathcal{A}_{ij} \right) - A^2, \quad (7.23)$$

$$\mathcal{B}_{ij}^\dagger \mathcal{B}_{ij} \rightarrow B \left(\mathcal{B}_{ij}^\dagger + \mathcal{B}_{ij} \right) - B^2, \quad (7.24)$$

sendo $A = \langle \mathcal{A}_{ij}^\dagger \rangle = \langle \mathcal{A}_{ij} \rangle$ e $B = \langle \mathcal{B}_{ij}^\dagger \rangle = \langle \mathcal{B}_{ij} \rangle$. Após implementar o vínculo por meio de um multiplicador de Lagrange λ_i e separar os termos constantes temos que:

$$\begin{aligned} H = & -\frac{3N}{2} [(J_2 - J_1)A^2 + J_1B^2] - NS\lambda + \lambda \sum_{i,\mu} b_{i\mu}^\dagger b_{i\mu} + \\ & + \sum_{\langle i,j \rangle} \left[(J_2 - J_1)A \left(\mathcal{A}_{ij}^\dagger + \mathcal{A}_{ij} \right) + J_1B \left(\mathcal{B}_{ij}^\dagger + \mathcal{B}_{ij} \right) \right], \end{aligned} \quad (7.25)$$

onde também foi adotado um valor médio constante λ para λ_i .

Devido ao fato da *honeycomb* não ser uma rede de Bravais, a transformação de Fourier deve ser feita com mais cuidado que no caso da rede quadrada. Se i é um sítio de sub-rede A e j um sítio de B então a diferença $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ não é um múltiplo do vetor de rede e a transformação de Fourier não é válida. Resolvemos esse problema transformando as sub-redes separadamente de tal forma que:

$$b_{i\mu} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} b_{\mathbf{k},\mu}^A \quad (7.26)$$

e:

$$b_{j\mu} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} b_{\mathbf{k},\mu}^B \quad (7.27)$$

para as sub-redes A e B , respectivamente. A hamiltoniana no espaço dos momentos é expressa portanto como:

$$\begin{aligned} H = & H_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[3(J_2 - J_1)A \left(b_{\mathbf{k}\mu}^{A\dagger} b_{-\mathbf{k}\mu}^{B\dagger} \gamma_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}\mu}^{B\dagger} b_{-\mathbf{k}\mu}^{A\dagger} \gamma_{\mathbf{k}}^* \right) \right. \\ & \left. + 3J_1B \left(b_{\mathbf{k}\mu}^{A\dagger} b_{\mathbf{k}\mu}^B \gamma_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}\mu}^{B\dagger} b_{\mathbf{k}\mu}^A \gamma_{\mathbf{k}}^* \right) + \lambda \left(b_{\mathbf{k}\mu}^{A\dagger} b_{\mathbf{k}\mu}^A + b_{\mathbf{k}\mu}^{B\dagger} b_{\mathbf{k}\mu}^B \right) + h.c. \right], \end{aligned} \quad (7.28)$$

na qual H_0 são todos os termos constantes e $\gamma_{\mathbf{k}} = e^{i\varphi_{\mathbf{k}}}|\gamma_{\mathbf{k}}|$ é fator de estrutura para a rede *honeycomb* dado por:

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{3} \left[\cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{\sqrt{3}k_y}{2} + \cos k_x + 2i \operatorname{sen} \frac{k_x}{2} \cos \frac{\sqrt{3}k_y}{2} - i \operatorname{sen} k_x \right]. \quad (7.29)$$

Diferente da rede quadrada, o fator de estrutura não é real o que é um problema uma vez que praticamente todos resultados físicos que obtemos do formalismo bosônico dependem dele. Observe também que as duas sub-redes estão acopladas na hamiltoniana (7.28) o que dificulta na diagonalização do modelo. A situação aqui é semelhante ao caso de osciladores harmônicos acoplados e ambos problemas, o fator de estrutura complexo e o acoplamento das sub-redes, são resolvidos ao definir dois novos tipos de operadores $c_{\mathbf{k}\mu}^I$ e $c_{\mathbf{k}\mu}^{II}$ por meio da transformação:

$$b_{\mathbf{k}\mu}^A = \frac{e^{i\varphi_{\mathbf{k}}}}{\sqrt{2}} (i c_{\mathbf{k}\mu}^I + c_{\mathbf{k}\mu}^{II}), \quad (7.30)$$

$$b_{\mathbf{k}\mu}^B = \frac{e^{-i\varphi_{\mathbf{k}}}}{\sqrt{2}} (-i c_{\mathbf{k}\mu}^I + c_{\mathbf{k}\mu}^{II}). \quad (7.31)$$

Nas equações acima, a fase complexa $e^{i\varphi_{\mathbf{k}}}$ é a mesma que aparece no fator de estrutura e dessa forma ambas se anulam de modo a produzir resultados reais. É importante ressaltar que a transformação acima mantém a relação comutativa entre os operadores e portanto o carácter bosônico da teoria é conservado. Escrita na nova base, a hamiltoniana é:

$$H = H_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^{I\dagger} \tilde{H}^I \beta_{\mathbf{k}}^I + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^{II\dagger} \tilde{H}^{II} \beta_{\mathbf{k}}^{II}, \quad (7.32)$$

onde $\beta_{\mathbf{k}}^{a\dagger} = (c_{\mathbf{k}1}^{a\dagger}, c_{\mathbf{k}2}^{a\dagger}, c_{\mathbf{k}3}^{a\dagger}, c_{-\mathbf{k}1}^a, c_{-\mathbf{k}2}^a, c_{-\mathbf{k}3}^a)$, com $a = I, II$ e as matrizes \tilde{H}^I e \tilde{H}^{II} são dadas por:

$$\tilde{H}^I = \begin{pmatrix} \lambda - 3J_1 B |\gamma_{\mathbf{k}}| & 3(J_1 - J_2) A |\gamma_{\mathbf{k}}| \\ 3A(J_2 - J_1) |\gamma_{\mathbf{k}}| & \lambda - 3J_1 B |\gamma_{\mathbf{k}}| \end{pmatrix} \quad (7.33)$$

e

$$\tilde{H}^{II} = \begin{pmatrix} \lambda + 3J_1 B |\gamma_{\mathbf{k}}| & 3(J_1 - J_2) A |\gamma_{\mathbf{k}}| \\ 3A(J_2 - J_1) |\gamma_{\mathbf{k}}| & \lambda + 3J_1 B |\gamma_{\mathbf{k}}| \end{pmatrix}. \quad (7.34)$$

A hamiltonianas (7.33) e (7.34) são diagonalizadas pela transformação de Bogoliubov

[65–67] (que garante uma nova base também bosônica) na qual definimos os operadores:

$$\alpha_{\mathbf{k}\mu}^I = \cosh\theta_{\mathbf{k}}^I c_{\mathbf{k}\mu}^I - \sinh\theta_{\mathbf{k}}^{II} c_{-\mathbf{k}\mu}^{I\dagger} \quad (7.35)$$

$$\alpha_{\mathbf{k}\mu}^{II} = \cosh\theta_{\mathbf{k}}^{II} c_{\mathbf{k}\mu}^{II} - \sinh\theta_{\mathbf{k}}^I c_{-\mathbf{k}\mu}^{II\dagger} \quad (7.36)$$

ou inversamente:

$$c_{\mathbf{k}\mu}^I = \cosh\theta_{\mathbf{k}}^I \alpha_{\mathbf{k}\mu}^I + \sinh\theta_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}\mu}^{I\dagger} \quad (7.37)$$

$$c_{\mathbf{k}\mu}^{II} = \cosh\theta_{\mathbf{k}}^{II} \alpha_{\mathbf{k}\mu}^{II} + \sinh\theta_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}\mu}^{II\dagger}. \quad (7.38)$$

Os ângulos $\theta_{\mathbf{k}}^I$ e $\theta_{\mathbf{k}}^{II}$ são definidos de modo a anular os coeficientes não-diagonais das matrizes \tilde{H}^I e \tilde{H}^{II} . Isso é feito ao exigir que os ângulos satisfaçam as relações:

$$\cosh 2\theta_{\mathbf{k}}^I = \frac{\lambda - 3J_1 B |\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_I}, \quad (7.39)$$

$$\sinh 2\theta_{\mathbf{k}}^I = -\frac{3(J_2 - J_1)A |\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_I}, \quad (7.40)$$

$$\cosh 2\theta_{\mathbf{k}}^{II} = \frac{\lambda + 3J_1 B |\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_{II}}, \quad (7.41)$$

$$\sinh 2\theta_{\mathbf{k}}^{II} = -\frac{3(J_2 - J_1)A |\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_{II}}, \quad (7.42)$$

onde E_I e E_{II} são as auto energias definidas como:

$$E_I = \pm \sqrt{(\lambda - 3J_1 B |\gamma_{\mathbf{k}}|)^2 - (3A(J_2 - J_1) |\gamma_{\mathbf{k}}|)^2} \quad (7.43)$$

e

$$E_{II} = \pm \sqrt{(\lambda + 3J_1 B |\gamma_{\mathbf{k}}|)^2 - (3A(J_2 - J_1) |\gamma_{\mathbf{k}}|)^2}. \quad (7.44)$$

A hamiltoniana na forma diagonal é expressa então por:

$$H = H_0 + \sum_{\mathbf{k}} \sum_{t=I,II} \left(\alpha_{\mathbf{k}}^{t\dagger} \alpha_{\mathbf{k}}^t + \frac{1}{2} \right) E_t. \quad (7.45)$$

O passo seguinte é a determinação dos valores médios A , B e λ . De modo a levar em conta a influência da temperatura no sistema, os parâmetros da teoria de campo médio são determinados minimizando a energia livre de Helmholtz que no caso é dada por:

$$\begin{aligned} F &= -\frac{1}{\beta} \text{Tr} (\ln e^{-\beta H}) \\ &= H_0 + \frac{3}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \ln \left[\sinh \left(\frac{\beta E_I}{2} \right) \right] + \ln \left[\sinh \left(\frac{\beta E_{II}}{2} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (7.46)$$

Ao exigir $\frac{\partial F}{\partial \lambda} = \frac{\partial F}{\partial A} = \frac{\partial F}{\partial B} = 0$, encontramos as seguintes equações auto-consistentes:

$$S + \frac{3}{2} = \frac{3}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\coth \left(\frac{\beta E_I}{2} \right) \frac{\lambda - 3J_1 B |\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_I} + \coth \left(\frac{\beta E_{II}}{2} \right) \frac{\lambda + 3J_1 B |\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_{II}} \right], \quad (7.47)$$

$$A = -\frac{3}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\coth \left(\frac{\beta E_I}{2} \right) \frac{3A(J_2 - J_1)}{E_I} + \coth \left(\frac{\beta E_{II}}{2} \right) \frac{3A(J_2 - J_1)}{E_{II}} \right] |\gamma_{\mathbf{k}}|^2 \quad (7.48)$$

e

$$B = \frac{3}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\coth \left(\frac{\beta E_{II}}{2} \right) \frac{\lambda + 3J_1 B |\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_{II}} - \coth \left(\frac{\beta E_I}{2} \right) \frac{\lambda - 3J_1 B |\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_I} \right] |\gamma_{\mathbf{k}}| \quad (7.49)$$

na qual as somas são realizadas dentro da primeira zona de Brillouin. Como pode ser notado, encontrar soluções exatas para as equações acima é impossível e os métodos aplicados consistem em aproximações auto-consistentes. Vamos tratar separadamente os casos com temperatura nula daqueles em temperatura finita. Começamos no limite $T = 0$ no qual consideramos a condensação dos bósons no estado de menor energia e na seção seguinte lidamos com o caso de baixas temperaturas.

7.2 Soluções em temperatura nula

Em $T = 0$ as equações auto-consistentes não admitem solução e como já foi dito isso está associado à condensação dos bósons em um estado sem gap de energia. Segundo Takahashi [57,68], uma vez que o sistema não apresenta soluções, é esperado um ordenamento de longo alcance nos spins. Isso ocorre pois durante o desenvolvimento da teoria não é adotada nenhuma direção preferencial mas, a partir do momento em que há a quebra da simetria $O(3)$, os spins escolhem uma direção ideal e a hipótese inicial não é mais válida. Para contornar o problema, os termos divergentes são separados na integração e é introduzida uma nova quantidade ρ que mede o nível de condensação dos bósons. Como as sub-redes são tratadas separadamente, vamos considerar que a condensação ocorre em torno do ponto $\mathbf{k}^* = (0,0)$ e não em $(0, \frac{2\pi}{\sqrt{3}})$ (no caso antiferromagnético) como é habitual na rede *honeycomb*. Em torno de \mathbf{k}^* as energias quando expandidas até termos de segunda ordem são dadas pelas relações de dispersão relativísticas:

$$E_I = \sqrt{\Delta_I^2 + \mathbf{k}^2 c_I^2} \quad \text{e} \quad E_{II} = \sqrt{\Delta_{II}^2 + \mathbf{k}^2 c_{II}^2}, \quad (7.50)$$

com

$$\Delta_I = \sqrt{(\lambda - 3J_1B)^2 - (3(J_1 - J_2)A)^2} \quad (7.51)$$

e

$$\Delta_{II} = \sqrt{(\lambda + 3J_1B)^2 - (3(J_1 - J_2)A)^2} \quad (7.52)$$

sendo os gaps de energia, enquanto

$$c_I = \sqrt{\frac{1}{2} (3J_1B - 9J_1^2B^2 + 9(J_1 - J_2)^2A^2)} \quad (7.53)$$

e

$$c_{II} = \sqrt{\frac{1}{2} (-3J_1B - 9J_1^2B^2 + 9(J_1 - J_2)^2A^2)}, \quad (7.54)$$

são as velocidades das onda de spin para os estados I e II , respectivamente.

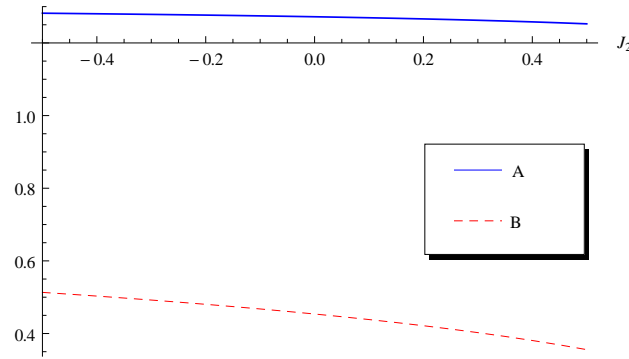


Figura 7.3: Os parâmetros A e B em função de J_2 (em unidades de J_1).

No caso $|J_2| < J_1$, ocorre a condensação no estado de energia E_I e dessa forma $\Delta_I = 0$ enquanto o gap Δ_{II} é finito. Portanto a equação para Δ_I fornece $\lambda = 3(J_1B + (J_1 - J_2)A)$ e após a separação dos termos divergentes, as equações (7.46), (7.47) e (7.48) são expressas na forma integral como:

$$\rho = \left(S + \frac{3}{2}\right) - \frac{3}{2\sigma} \int d^2\mathbf{k} \left[\frac{\lambda - 3J_1B|\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_I} + \frac{\lambda + 3J_1B|\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_{II}} \right], \quad (7.55)$$

$$A = \rho - \frac{3}{2\sigma} \int d^2\mathbf{k} \left[\frac{3A(J_2 - J_1)|\gamma_{\mathbf{k}}|^2}{E_I} + \frac{3A(J_2 - J_1)|\gamma_{\mathbf{k}}|^2}{E_{II}} \right] \quad (7.56)$$

e

$$B = -\rho + \frac{3}{2\sigma} \int d^2\mathbf{k} \left[-\frac{(\lambda - 3J_1 B |\gamma_{\mathbf{k}}|) |\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_I} + \frac{(\lambda + 3J_1 B |\gamma_{\mathbf{k}}|) |\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_{II}} \right], \quad (7.57)$$

onde $\sigma = \frac{8\pi}{3\sqrt{3}}$ é área da primeira zona de Brioullin. As equações são resolvidas numericamente escolhendo-se valores iniciais para A e B e aplicando o método de interação padrão. Os valores dos parâmetros A e B em função de J_2 (em unidades de J_1) são mostrados no gráfico (7.3). Como pode ser notado, a variação dentro dos limites considerados é pequena, principalmente para o valor de A .

Uma vez conhecidos os parâmetros A e B todas as quantidades físicas podem ser obtidas. No gráfico (7.4) temos o nível de condensação ρ em função da constante biquadrática J_2 (em função de $J_1 = 1$). Como foi mostrado no capítulo 5, a magnetização está diretamente relacionada ao nível de condensação e portanto o sistema apresenta OLA em temperatura nula. Os valores obtidos estão entre sessenta e setenta por cento, abaixo dos encontrados numa rede quadrada que são próximos de 0,8. Como esperado, devido ao menor número de interações entre vizinhos, as flutuações quânticas tem uma influência maior no desordenamento do sistema.

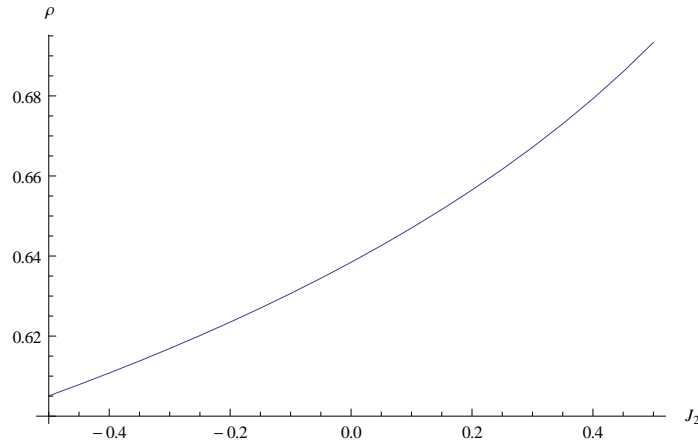


Figura 7.4: Nível de condensação ρ em função de J_2 (em unidades de J_1).

Na figura (7.5) é mostrado a velocidade das ondas de spin para os dois modos I e II . As duas velocidades têm valores próximos e comportamentos semelhantes. Ambas apresentam um decaimento quase linear com o aumento da constante biquadrática e extrapolando tal resultado podemos encontrar o pontos elas se anulam. Porém, tal

extrapolação deve ser feita com cuidado pois está além dos limites para os valores de J_2 válidos. Na referência [79], Ann Mattson encontra um comportamento semelhante da velocidades das ondas de spin em função da constante de interação entre segundos vizinhos.

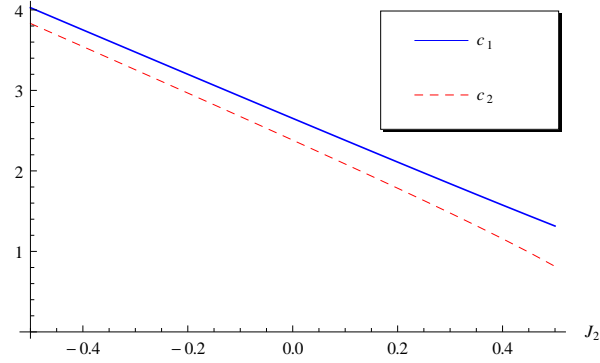


Figura 7.5: Velocidade das ondas de spin c_1 e c_2 .

Para o modelo de Heisenberg na rede quadrada é conhecido que o valor mínimo do spin para o qual a magnetização é não nula está em torno de 0,19 [75] e portanto o sistema é sempre ordenado para $T = 0$. A inclusão de termos extras à hamiltoniana assim como mudanças na estrutura da rede afetam esse valor crítico para o spin. No gráfico (7.6) é plotado o valor de spin que separa as fases com ordem de longo alcance e desordenada em função da constante biquadrático J_2 . O maior valor de S_c ocorre para $J_2 = 0,5J_1$ e está próximo de 0,4. Dessa forma, o sistema apresenta ordenamento para qualquer valor de spin fisicamente aceitável. Uma extrapolação sugere que para algum valor de J_2 o ponto crítico S_c exceda 0,5 o que tornaria possível um estado de líquido de spin porém, deve se tomar cuidado com tal raciocínio uma vez que altos valores de S_c estão relacionados à pequenos níveis de condensação. Para baixas condensações, a teoria deve ser corrigida de modo a levar em conta a ocupação de outros estados energéticos (o que no caso não foi feito). Além disso, o modelo desenvolvido se aplica somente no intervalo $|J_2| < J_1$ e mesmo no limite $J_2 = -J_1$ o resultado encontrado não demonstra uma possível existência de estado desordenado em temperatura nula. Ann

Mattsson e Per Fröjdh [79] estudaram a estabilidade de Néel para a rede de *honeycomb* com interações entre primeiros e segundos vizinhos. Os autores encontraram ordem de longo alcance além do limite clássico para grandes valores de S enquanto para spins pequenos os resultados não são conclusivos.

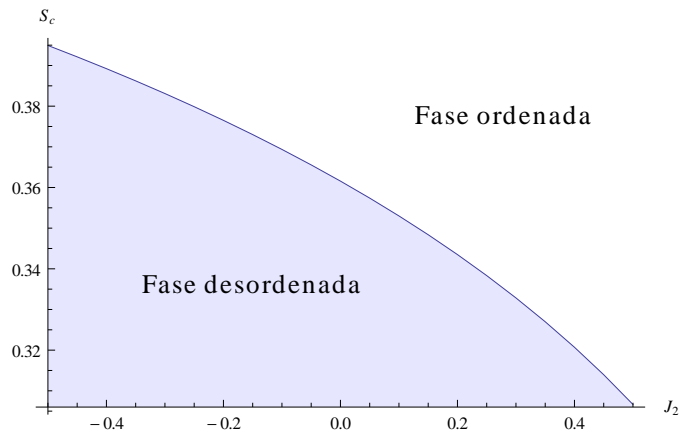


Figura 7.6: O valor crítico para o spin S_c que separa as regiões ordenada e desordenada em função do termo biquadrático J_2 .

7.3 Resultados para baixas temperaturas

Resultados para temperaturas finitas podem ser obtidos resolvendo-se as equações auto-consistentes (7.46), (7.47) e (7.48). Segundo o teorema de Mermin-Wagner, o sistema é desordenado para $T \neq 0$ e portanto um gap não nulo surge no espectro de excitação. Uma vez que as energias são sempre positivas, nenhuma divergência ocorre e os parâmetros A , B e λ podem ser obtidos estipulando um valor inicial e integrando as equações de campo médio consistentemente. Porém tal método não é prático se os valores iniciais não forem escolhidos apropriadamente e assim vamos adotar um segundo método mais simples de ser aplicado. O procedimento utilizado [81,82] é válido somente no limite de baixas temperaturas no qual o gap de energia tem, no máximo, a mesma ordem de grandeza da energia térmica T (estamos adotando $k_B = 1$) e devido às simplificações adotadas são apenas qualitativos. Por meio das equações (7.46) e

(7.55) o nível de condensação pode ser estipulado em temperaturas finitas como:

$$\rho = \frac{3}{2} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{\sigma} \left[\frac{\lambda - 3J_1B|\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_I} \coth\left(\frac{\beta E_I}{2}\right) + \frac{\lambda + 3J_1B|\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_{II}} \coth\left(\frac{\beta E_{II}}{2}\right) \right] - \frac{3}{2} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{\sigma} \left[\frac{\lambda_0 - 3J_1B_0|\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_{0,I}} + \frac{\lambda_0 - 3J_1B_0|\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_{0,II}} \right], \quad (7.58)$$

onde os parâmetros com um subíndice 0 são referentes às soluções obtidas em temperatura nula via a condensação dos bósons de Schwinger. Veremos mais adiante que a variação de A , B e λ para temperaturas dentro do limite adotado é pequena e será tomada como desprezível. O primeiro passo é dividir a integral acima em duas regiões separadas pela energia ck_M (a velocidade c é da mesma ordem que c_I e c_{II}). A primeira região é caracterizada por um disco circular em torno da origem (o ponto de condensação) de raio $k < k_M$ enquanto a segunda região é a área restante da primeira zona de Brillouin. k_M é o valor limite dentro do qual podemos usar a aproximação $E_I = \sqrt{\Delta_I^2 + \mathbf{k}^2 c_I^2}$ e $E_{II} = \sqrt{\Delta_{II}^2 + \mathbf{k}^2 c_{II}^2}$. Tal valor é subjetivo e depende da precisão que desejamos obter sendo que para $k_M = 1$ o erro máximo na energia E_I está em torno de 10%. Uma vez que para $T = 0$ ocorre a condensação no estado E_I , escrevemos $E_{0,I} = kc_{0,I}$ e $E_{0,II} = \sqrt{\Delta_{0,II}^2 + \mathbf{k}^2 c_{0,II}^2}$. Dentro da primeira região temos que $\frac{\beta E_{II}}{2} \approx \frac{\beta \Delta_{II}^2}{2} \gg 1$ e portanto vamos usar $\coth\left(\frac{\beta E_{II}}{2}\right) \approx 1$ enquanto $\coth\left(\frac{\beta E_I}{2}\right)$ é mantido sem nenhuma aproximação. Já na região externa, $k > k_M$, as energias não são pequenas o suficiente para serem aproximadas pelas relações de dispersão relativísticas porém os termos cotangentes podem ser tomados como unitários. Dessa forma a equação (7.58) é dada por:

$$\rho = \frac{3}{2} \int_0^{k_M} \frac{2\pi\mathbf{k} d\mathbf{k}}{\sigma} \left[\frac{\lambda - 3J_1B\left(1 - \frac{\mathbf{k}^2}{4}\right)}{\sqrt{\Delta_I^2 + \mathbf{k}^2 c_I^2}} \coth\left(\frac{\sqrt{\Delta_I^2 + \mathbf{k}^2 c_I^2}}{2T}\right) + \frac{\lambda - 3J_1B\left(1 - \frac{\mathbf{k}^2}{4}\right)}{\sqrt{\Delta_{II}^2 + \mathbf{k}^2 c_{II}^2}} - \frac{\lambda_0 - 3J_1B_0\left(1 - \frac{\mathbf{k}^2}{4}\right)}{kc_{0,I}} - \frac{\lambda_0 + 3J_1B_0\left(1 - \frac{\mathbf{k}^2}{4}\right)}{\sqrt{\Delta_{0,II}^2 + \mathbf{k}^2 c_{0,II}^2}} \right] + \frac{3}{2} \int_{\mathbf{k} > k_M} \frac{d^2\mathbf{k}}{\sigma} \left[\frac{\lambda - 3J_1B|\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_I} - \frac{\lambda_0 - 3J_1B_0|\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_{0,I}} + \frac{\lambda + 3J_1B|\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_{II}} - \frac{\lambda_0 + 3J_1B_0|\gamma_{\mathbf{k}}|}{E_{0,II}} \right], \quad (7.59)$$

na qual a integral na região central foi escrita em coordenadas cilíndricas. O segundo e o quarto termo da primeira integral são, dentro das aproximações, idênticos e se cancelam mutuamente. O mesmo ocorre com os termos da segunda integral e assim as únicas contribuições a serem consideradas são devido ao primeiro e ao terceiro termo da integral sobre $k < k_M$. Considerando apenas termos de segunda ordem em \mathbf{k} , obtemos:

$$\rho = \frac{6\pi(\lambda - 3J_1B)T}{\sigma c_I^2} \left[\ln \sinh \left(\frac{\sqrt{\Delta_I^2 + \mathbf{k}_M^2 c_I^2}}{2T} \right) - \ln \sinh \left(\frac{\Delta_I}{2T} \right) \right] - \frac{3\pi(\lambda_0 - 3J_1B_0)\mathbf{k}_M}{\sigma c_{0,I}}, \quad (7.60)$$

que ao adotar $k_M c_I \gg \Delta_I$, fornece $\Delta_I(T) = T e^{-\kappa/T}$ com $\kappa = \frac{\rho \sigma c_I^2}{6\pi(\lambda - 3J_1B)}$.

É importante ressaltar que o formalismo de Schwinger não é o ideal para o tratamento em temperaturas finitas. Conforme mostrado por Fukomoto [83], alguns resultados não apresentam boa concordância em baixas temperaturas com dados numéricos, como por exemplo a susceptibilidade transversa (no caso, para o modelo XXZ ferromagneto). Contudo, no mesmo trabalho o autor também mostra que o calor específico, o comprimento de correlação, e a energia interna, entre outros, quando calculados via bósons de Schwinger para temperaturas finitas, fornecem resultados de acordo com os previstos por simulações de Monte Carlo. O tratamento mais confiável para $T \neq 0$ é feito por meio da chamada aproximação harmônica auto-consistente (*Self Consistent Harmonic Approximation*, SCHA), porém ele não foi aplicado a esse trabalho. O mesmo procedimento utilizado para se obter o gap Δ_I pode ser usado para encontrar a dependência térmica dos parâmetros A e B . Nesse caso o resultado é um comportamento semelhante contudo as variações de A e B para baixas temperaturas são uma ordem menor.

Como é conhecido, o comprimento de correlação ξ é proporcional ao inverso do gap e portanto:

$$\xi \propto \frac{e^{\kappa/T}}{T}. \quad (7.61)$$

Como esperado pelo teorema de Mermim-Wagner, o sistema é desordenado para temperaturas finitas enquanto para $T = 0$ ele apresenta ordem de longo alcance. No gráfico (7.7) é mostrado Δ_I em função da temperatura para $J_2 = 0.25$ (em unidades de J_1).

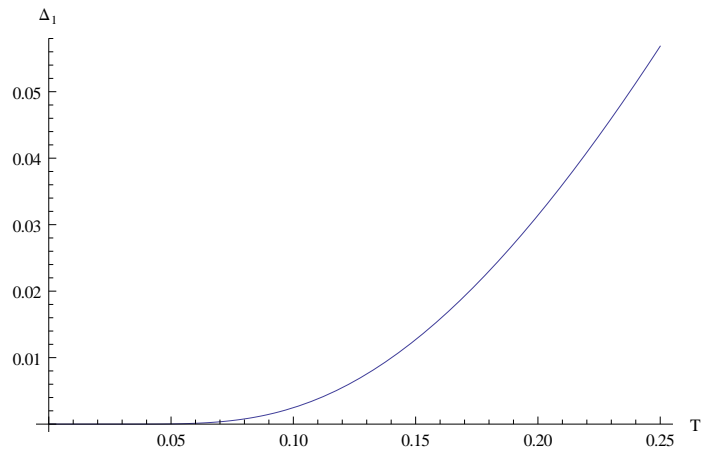


Figura 7.7: Gap de energia Δ_I em função da temperatura (em unidade de J_1).

Como $\Delta_{II}^2 = \Delta_I^2 + 12J_1B$, o comportamento de gap Δ_{II} é semelhante porém devido ao fato de $\Delta_I \ll 12J_1B \sim 1$ a variação com a temperatura é menos perceptível.

Conclusões e perspectivas

Durante o trabalho realizado, estudamos alguns problemas em física da matéria condensada relacionados a sistemas magnéticos nos quais foram considerados hamiltonianas dotadas de termos extras além do uso de redes não convencionais. Tais sistemas têm sido o centro das atenções em diversas áreas durante muito anos e ainda possuem várias lacunas a serem preenchidas. Como exemplo, podemos citar a procura por materiais magnéticos bidimensionais que não apresentam nenhum tipo de ordenamento mesmo em temperatura nula, os chamados líquidos de spin. Tais sistemas já são preditos há mais de duas décadas e apenas recentemente os primeiros experimentos começaram a confirmar a sua existência [24, 77, 78]. Vários modelos teóricos têm sido propostos a suportar tais fases do magnetismo e durante o nosso trabalho apresentamos algumas características que também podem levar a um estado desordenado em temperatura nula em sistemas bidimensionais. Sistemas dopados também são constantemente citados pela comunidade científica. Obviamente, produzir amostras com altos graus de pureza não é uma trabalho simples e mesmo pequenas quantidades de defeitos são capazes de mudar drasticamente as propriedades dos materiais, como ocorre em supercondutores. Dessa forma o conhecimento da dopagem de tais sistemas é de extrema importância.

Nos dois primeiros trabalhos estudamos alguns aspectos do modelo sigma não-linear $O(3)$. Como já é amplamente conhecido, tal modelo pode ser usado como aproximação contínua para diversos sistemas magnéticos. Obtemos que a introdução de um termo anisotrópico ao MSNL cria uma separação entre duas fases distintas. Embora tal modelo anisotrópico não descreva exatamente um sistema magnético com anisotropia, os resultados encontrados são por si muito interessantes. Devido às flutuações quânti-

cas, as soluções topológicas suportadas passam a apresentar interações que não existem classicamente. Vimos que entre os spinons (isto é, os modos coletivos que compõem o skyrmion) existe uma força atrativa quando o termo anisotrópico está no intervalo $-1 < \lambda < 0$. Tal interação leva ao confinamento das excitações de spin e o sistema apresenta ordem de longo alcance. Por outro lado, quando $\lambda > 0$ a interação entre os spinons é repulsiva, temos um estado de deconfinamento e o sistema é portanto desordenado. O deconfinamento é semelhante ao apresentado pelos quarks na cromodinâmica quântica, inclusive no tipo de repulsão. Tais resultados são analíticos e simulações computacionais também foram realizadas para verificar a dependência com o termo de anisotropia. Contudo, nenhum dado conclusivo pode ser obtido por meio de tais simulações uma vez que não foi possível estabilizar as soluções topológicas para uma rede discreta e finita com acoplamento antiferromagnético.

No segundo problema abordado foi estudado como a presença de um defeito na rede afeta a solução topológica. O defeito é considerado como um disco cilíndrico não magnético de raio ρ cujas dimensões são pequenas comparadas ao tamanhos do skyrmion e do sistema, R e L respectivamente. Encontramos que, dentro das aproximações adotadas, o centro do skyrmion interage com o defeito por meio de um potencial quadrático na separação entre os dois e portanto a excitação executa um movimento de oscilação harmônica simples. Encontramos que a frequência das oscilações dependem diretamente do tamanho do defeito e do inverso de R^2 estando qualitativamente de acordo com outros trabalhos sobre o assunto [51].

Para os outros dois trabalhos desenvolvidos foi adotado o formalismo bosônico de Schwinger ao invés do tradicional MSNL. Devido aos termos extras considerados, a representação por meio de bósons se mostrou mais adequada que a aproximação contínua. O primeiro desses trabalhos teve como foco o estudo do modelo de Heisenberg biquadrático e anisotrópico na rede quadrada em $T = 0$. O termo de anisotropia novamente tem um papel importante e separa o sistema entre fases ordenadas e desordenadas (semelhante ao primeiro trabalho). O termo biquadrático foi introduzido como uma correção na hamiltoniana para sistemas de spin-1 (o caso anisotrópico com spin-1/2 não apresenta nenhum interesse físico). Encontramos que as duas fases são

separadas por um valor crítico D_c da constante anisotrópica. Para $D < D_c$ temos a fase de D pequeno para o qual as excitações sobre o estado fundamental são não massivas e uma OLA é alcançada. Na chamada fase de D grande com $D > D_c$, as excitações apresentam gap de energia e dessa forma o sistema apresenta um comprimento de correlação finito. Vimos também que nos limites considerados o termo biquadrático não tem um papel tão significativo quanto o termo anisotrópico.

Por último, estudamos o modelo biquadrático sobre uma rede hexagonal do tipo *honeycomb*. Nesse caso, a geometria tem um papel importante uma vez que devido ao menor número de vizinhos (ou seja, menos interações), os spins são mais sensíveis à flutuações sobre o estado fundamental. Contudo, ao contrário da rede de kagomé (que também é hexagonal), não existe nenhuma frustração geométrica e assim encontramos que o sistema apresenta magnetização em temperatura nula para qualquer valor de spin. Para temperaturas finitas, os resultados encontrados estão de acordo com os previstos pelo teorema de Mermin-Wagner, desordem e excitações com gap de energia. O comportamento do gap de energia é semelhante ao encontrado para o modelo de Heisenberg tradicional, porém é importante ressaltar que os bósons de Schwinger não são o melhor tratamento para temperaturas finitas e os resultados devem ser tratados qualitativamente.

Os dois primeiros trabalhos já foram publicados em importantes periódicos [84,85] enquanto os dois seguintes ainda estão em processo de finalização. Esperamos num futuro próximo retornar a alguns pontos que não foram possíveis ser concluídos durante o desenvolvimento da pesquisa, como por exemplo as simulações computacionais, não somente para o primeiro trabalho mas também para os dois últimos modelos apresentados. Também temos como perspectiva, a inclusão de novos termos à hamiltoniana como a interação de Dzyaloshinskii-Moriya que se tem se mostrado a grande responsável pela observação experimental de skyrmions em sistemas magnéticos. Outro tópico de interesse é a influência da geometria nas propriedades do sistema. A aplicação de teorias bosônicas em sistemas frustrados ainda não está amplamente estabelecida e, embora existam alguns trabalhos nessa área, muitos problemas ainda aguardam soluções.

Apêndice A

Transformação de Hubbard-Stratonovich

Diversos problemas, como os apresentados nos capítulos 6 e 7, possuem interações de quarta ordem ou maior porém, somente ações quadráticas podem ser integradas de modo a obter algum resultado de interesse. A redução dos termos de ordem maior é feita pela transformação de Hubbard-Stratonovich. Tal método é baseado numa teoria de campo médio e somente no limite de infinitas interações ele fornece resultados exatos. Nos modelos estudados o número de interações é finito e portanto os resultados obtidos são aproximados de forma a obter os melhores valores possíveis.

O ponto inicial para o desacoplamento via Hubbard-Stratonovich é a identidade:

$$e^{ax^2} = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a\bar{x}^2 + 2a\bar{x}x} d\bar{x}, \quad (\text{A.1})$$

na qual \bar{x} é o valor médio de x . A demonstração pode ser feita facilmente completando o quadrado no expoente do lado direito e integrando sobre o termo $x - \bar{x}$. O mesmo procedimento pode ser aplicado aos casos N-dimensionais e também às integrais de caminho, como por exemplo:

$$\int \mathcal{D}[\mathcal{A}_{ij}] e^{\mathcal{A}_{ij}^\dagger \mathcal{A}_{ij}}. \quad (\text{A.2})$$

A partir da igualdade:

$$(\mathcal{A}_{ij}^\dagger - \langle \mathcal{A}_{ij}^\dagger \rangle)(\mathcal{A}_{ij} - \langle \mathcal{A}_{ij} \rangle) = \mathcal{A}_{ij}^\dagger \mathcal{A}_{ij} - \langle \mathcal{A}_{ij} \rangle \mathcal{A}_{ij}^\dagger - \langle \mathcal{A}_{ij}^\dagger \rangle \mathcal{A}_{ij} + \langle \mathcal{A}_{ij}^\dagger \rangle \langle \mathcal{A}_{ij} \rangle, \quad (\text{A.3})$$

e adotando os valores médios $\langle \mathcal{A}_{ij}^\dagger \rangle = \langle \mathcal{A}_{ij} \rangle = A$ temos que:

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}A e^{-A^2 + A(\mathcal{A}_{ij}^\dagger + \mathcal{A}_{ij})} &= \int \mathcal{D}A e^{-(\mathcal{A}_{ij}^\dagger - A)(\mathcal{A}_{ij} - A) + \mathcal{A}_{ij}^\dagger \mathcal{A}_{ij}} \\ &= \mathcal{N} e^{\mathcal{A}_{ij}^\dagger \mathcal{A}_{ij}}, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

onde \mathcal{N} é uma constante de normalização. Por meio das equações (A.2) e (A.4) fazemos a substituição:

$$\mathcal{A}_{ij}^\dagger \mathcal{A}_{ij} \rightarrow A \left(\mathcal{A}_{ij}^\dagger + \mathcal{A}_{ij} \right) - A^2 \quad (\text{A.5})$$

na ação mediante a inclusão de uma integral sobre o termo constante A . O valor de A pode ser determinado, por exemplo, através da minimização da energia livre de Helmholtz $F = -\beta^{-1} \text{Tr} e^{-\beta H/2}$. Nos trabalhos realizados, o termo \mathcal{A}_{ij} está relacionado ao produtos de dois operadores bosônicos e dessa forma conseguimos reduzir as ações de ordem quatro para modelos quadráticos.

Apêndice B

Transformação de Bogoliubov

Teorias bosônicas, como por exemplo os bósons de Schwinger apresentados no capítulo 5, são identificadas por obedecerem à relações de comutação. Em geral as hamiltonianas que descrevem sistemas bosônicos não são diagonais e para obter o espectro de energia é necessária a aplicação de transformações canônicas que mantenham as relações de comutação entre os operadores. Vamos considerar apenas o caso mais simples no qual temos somente um tipo de operador bosônico a (os casos mais complicados podem ser tratados exatamente da mesma forma). Definimos o vetor:

$$\alpha = \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

e seu conjugado $\alpha^\dagger = (a^\dagger \ a)$, onde a^\dagger e a são os operadores de criação e destruição, respectivamente. As posições dos operadores criação/destruição podem ser alternadas por:

$$\gamma\alpha = \begin{pmatrix} a^\dagger \\ a \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \alpha^\dagger\gamma = (a \ a^\dagger), \quad (\text{B.2})$$

na qual a matriz γ é definida como:

$$\gamma \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.3})$$

As relações de comutação são então representadas de forma simples:

$$[\alpha, \alpha^\dagger] = \begin{pmatrix} [a, a^\dagger] & [a, a] \\ [a^\dagger, a^\dagger] & [a^\dagger, a] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv \eta. \quad (\text{B.4})$$

Definimos a nova base (diagonal) pela transformação linear:

$$\beta = \begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U & -V \\ -Y & X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} = T\alpha. \quad (\text{B.5})$$

A transformação é canônica se, e somente se, a relação de comutação é mantida, ou seja $[\beta, \beta^\dagger] = \eta$. Portanto temos que:

$$\eta = T [\alpha, \alpha^\dagger] \gamma T^t \gamma = T \eta \gamma T^t \gamma \Leftrightarrow T \sigma T^t = \sigma, \quad (\text{B.6})$$

com $\sigma = \eta \gamma$. Vamos aplicar essa transformação na hamiltoniana quadrática:

$$H = \sum_{ij} \left[M_{ij} a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \left(N_{ij} a_i^\dagger a_j^\dagger + N_{ij}^* a_i a_j \right) \right], \quad (\text{B.7})$$

com M_{ij} e N_{ij} matrizes constantes que fornecem os acoplamentos entre os operadores a e a^\dagger . Se H é hermitiana então $M = M^\dagger$ e $N^t = N$ e em termos do vetor α temos:

$$H = \frac{1}{2} \alpha^\dagger \tilde{H} \alpha - \frac{1}{2} \text{Tr} M, \quad (\text{B.8})$$

na qual

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} M & N \\ N^* & M^* \end{pmatrix}. \quad (\text{B.9})$$

Na nova base a equação (B.7) é escrita como:

$$H = \frac{1}{2} \beta^\dagger \eta T \eta \tilde{H} T^{-1} \beta - H_0, \quad (\text{B.10})$$

com H_0 um termo constante (dado pelo traço de M). Na equação acima foi usada a relação $T \eta T^\dagger \eta = I$ obtida a partir da equação (B.6) ao exigir que b^\dagger e b sejam conjugados hermitianos. Note que a transformação canônica diagonaliza a matriz $\eta \tilde{H}$ e dessa forma os autovalores E da energia são encontrados corretamente ao trabalhar com a matriz $\eta \tilde{H}$ ao invés de \tilde{H} . Finalmente temos:

$$H = \frac{1}{2} \beta^\dagger \eta \tilde{E} \beta - H_0, \quad (\text{B.11})$$

na qual a matriz \tilde{E} é dada por:

$$\tilde{E} \equiv \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & -E \end{pmatrix}. \quad (\text{B.12})$$

O método descrito é conhecido como transformação de Bogoliubov [67] e embora tenha sido usado no tratamento do caso bosônico, com algumas mudanças ele também pode ser aplicado à fermions.

Referências Bibliográficas

- [1] P. R. Wallace. The band structure of graphite. *Physical Review*, 71:662, 1947.
- [2] Y. M. Lin, C. Dimitrakopoulos, K. A. Jenkins, D. B. Farmer, H.Y. Chiu, A. Grill e Ph. Avouris. 100-ghz transistors from wafer-scale epitaxial graphene. *Science*, 327:662, 2010.
- [3] O. Klein. Die reflexion von elektronen an einem potentialsprung nach der relativistischen dynamik von dirac. *Z. Phys.*, 53:157–165, 1929.
- [4] D. H. Kim, E. A. Rozhkova, I. V. Ulasov, S. D. Bader, T. Rajh, M. S. Lesniak e V. Novosad. Biofunctionalized magnetic-vortex microdiscs for targeted cancer-cell destruction. *Nature Materials*, 9:165–171, 2010.
- [5] J. M. Kosterlitz e D. J. Thouless. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 6:1181–1203, 1973.
- [6] V. L. Berezinskii. Destruction of long-range order in one-dimensional and two-dimensional systems possessing a continuous symmetry group. *Soviet Physics JETP*, 34:610–616, 1972.
- [7] I. Dzyaloshinskii. A thermodynamic theory of weak ferromagnetism of antiferromagnetics. *Journal Physics and Chemistry of Solids*, 4:241–255, 1958.
- [8] T. Moriya. Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism. *Physical Review*, 120:91–98, 1960.

-
- [9] X. Z. Yu, Y. Onose, N. Kanazawa, J. H. Park, J. H. Han, Y. Matsui, N. Nagaosa e Y. Tokura. Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal. *Nature*, 465:901–904, 2010.
- [10] O. Cépas, C. M. Fong, P. W. Leung e C. Lhuillier. Quantum phase transition induced by Dzyaloshinskii-Moriya interactions in the kagome antiferromagnet. *Physical Review B*, 78:140405–1–140405–5, 2008.
- [11] C. Pappas, E. Lelièvre-Berna, P. Bentley, P. Falus, P. Fouquet e B. Farago. Magnetic fluctuations and correlations in mnsi: Evidence for a chiral skyrmion spin liquid phase. *Physical Review B*, 83:224405–1–224405–10, 2011.
- [12] A. V. Chukubov. Spontaneous dimerization in quantum-spin chains. *Physical Review B*, 43:3337–3345, 1991.
- [13] Y. Xian. Spontaneous trimerization of spin-1 chains. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 5:7489–7502, 1993.
- [14] K. Katsumata. Experimental studies of one-dimensional quantum spin systems. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 140-144:1595–1598, 1995.
- [15] A. Schmitt, K. H. Mutter, M. Karbach, Y. Yu e G. Müller. Static and dynamic structure factors in the Haldane phase of the bilinear-biquadratic spin-1 chain. *Phy. Rev. B*, 58:5498–5509, 1998.
- [16] G. Fath e A. Suto. Commensurate and incommensurate correlations in Haldane-gap antiferromagnets. *Physical Review B*, 62:3778–3785, 2000.
- [17] A. Läuchli, G. Schmid e S. Trebst. Spin nematics correlations in bilinear-biquadratic $s=1$ spin chains. *Physical Review B*, 74:144426–1–144426–9, 2006.
- [18] T. A. Kaplan. Frustrated classical Heisenberg model in one dimension with nearest-neighbor biquadratic exchange: Exact solution for the ground-state phase diagram. *Physical Review B*, 80:012407–1–012407–4, 2009.

-
- [19] K. Harada e N. Kawashima. Quadrupolar order in isotropic Heisenberg models with biquadratic interaction. *Physical Review B*, 65:052403–1–052403–5, 2002.
- [20] B. A. Ivanov e A. K. Kolezhuk. Effective field theory for the $s=1$ quantum nematic. *Physical Review B*, 68:052401–1–052401–4, 2003.
- [21] B. A. Ivanov, A. Y. Galkin, R. S. Khymyn e A. Y. Merkulov. Nonlinear dynamics and two-dimensional solitons for spin-1 ferromagnets with biquadratic exchange. *Physical Review B*, 77:064402–1–064402–11, 2008.
- [22] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb e H. Tasaki. Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets. *Physical Review Letters*, 59:799–802, 1987.
- [23] M. Hermele, Ying Ran, P. A. Lee, and X. G. Wen. Properties of an algebraic spin liquid on the kagome lattice. *Physical Review B*, 77:224413–1–224413–23, 2008.
- [24] E. Kermarrec1, P. Mendels, F. Bert, R. H. Colman, A. S. Wills, P. Strobel, P. Bonville, A. Hillier e A. Amato. Spin-liquid ground state in the frustrated kagome antiferromagnet $\text{MgCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$. *Physical Review B*, 84:100401–1–100401–5, 2011.
- [25] A. R. Afrânio e A. S. T. Pires. *Teoria quântica de campos em sistemas magnéticos de baixas dimensões*. não publicado, 2011.
- [26] J. Goldstone. Field theories with superconductor solutions. *Nuovo Cimento*, 19:154–164, 1961.
- [27] F. D. M. Haldane. $O(3)$ Nonlinear Sigma Model and the topological distinction between integer and half-integer spin antiferromagnets in two-dimensional. *Physical Review Letters*, 61:1029–1932, 1988.
- [28] H. Bethe. Zur theorie der metalle. i. eigenwerte und eigenfunktionen der linearen atomkette. *Zeitschrift für Physik A*, 71:205, 1931.
- [29] J. Cloizeaux e J. J. Pearson. Spin-wave spectrum of the antiferromagnetic linear chain. *Physical Review*, 128:2131–2135, 1962.

-
- [30] N. D. Mermin e H. Wagner. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models. *Physical Review Letters*, 17:1133–1136, 1966.
- [31] C. N. Yang e R. L. Mills. Conservation of isotopic spin and isotopic gauge invariance. *Physical Review*, 96:191–195, 1954.
- [32] N. Nagaosa. *Quantum Field Theory in Strong Correlated Electronic Systems*. Springer, 1999.
- [33] F. D. M. Haldane. Nonlinear field theory of large-spin Heisenberg antiferromagnets: Semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis neel state. *Physical Review Letters*, 50:1153–1156, 1983.
- [34] F. D. M. Haldane. Continuum dynamics of the 1-d Heisenberg antiferromagnet: Identification with the $o(3)$ Nonlinear Sigma Model. *Physics Letters A*, 93:464–468, 1983.
- [35] M. V. Berry. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proceedings of the Royal Society of London A*, 392:45–57, 1984.
- [36] E. Fradkin e M. Stone. Topological terms in one- and two-dimensional quantum Heisenberg antiferromagnets. *Physical Review B*, 38:7215–7218, 1988.
- [37] T. Dombre e N. Read. Absence of the hopf invariant in the long-wavelength action of two-dimensional quantum antiferromagnets. *Physical Review B*, 38:7181–7183, 1988.
- [38] R. Rajaraman. *Solitons and Instantons: An Introduction to Solitons and Instantons in Quantum Field Theory*. North-Holland, 1989.
- [39] T. H. R. Skyrme. A unified field theory of mesons and baryons. *Nuclear Physics*, 31:556–569, 1962.
- [40] A. A. Belavin e A. A. Polyakov. Metastable states of two-dimensional isotropic ferromagnets. *JETP Letters*, 22:245–247, 1975.

-
- [41] A. A. Belavin, A. M. Polyakov, A. S. Schwartz e Y. S. Tyupkin. Pseudoparticle solutions of the yang-mills equations. *Physics Letters B*, 59:85, 1975.
- [42] D. J. Gross. Meron configurations in the two-dimensional $o(3)$ σ -model. *Nuclear Physics B*, 132:438–456, 1978.
- [43] T. Watanabi e H. Otsu. Vortices in two-dimensional anisotropic σ models. *Progress of Theoretical Physics*, 65:164–171, 1981.
- [44] A. R. Pereira, A. S. T. Pires e M. E. Gouvêa. Quantum fluctuations of solitons in two-dimensional anisotropic σ models. *Physical Review B*, 51:15974–15978, 1995.
- [45] N. Read e S. Sachdev. Spin-peierls, valence-bond solid, and néel ground states of low-dimensional quantum antiferromagnets. *Physical Review B*, 42:4568–4589, 1990.
- [46] G. Baskaram. Spinon deconfinement above a finite energy gap in two-dimensional quantum Heisenberg antiferromagnets. *Physical Review B*, 68:212409–1–212409–4, 2003.
- [47] Quantized topological point defects in two-dimensional antiferromagnets. J. p. rodrigues. *Physical Review B*, 39:2906–2909, 1989.
- [48] H. Walliser e G. Holzwarth. Casimir energy of skyrmions in the (2+1)-dimensional $o(3)$ -model. *Physical Review B*, 61:2819–2829, 2000.
- [49] J. Daie W. M. Zhang. Quantum Non Linear Sigma Model for arbitrary spin Heisenberg antiferromagnets. *Physical Review Letters*, 95:167205–1–167205–4, 2005.
- [50] Z. Nazario e D. I. Santiago. On spin 1/2 excitations and quantum criticality in two dimensional $o(3)$ antiferromagnets. 2004.
- [51] L. A. S. Mól, A. R. Pereira e W. A. Moura-Melo. Oscillating solitons pinned to a nonmagnetic impurity in layered antiferromagnets. *Physical Review B*, 67:132403–1–132403–4, 2003.

-
- [52] F. J. Dyson. General theory of spin-wave interactions. *Physical Review*, 102:1217–1230, 1956.
- [53] S. V. Maleev. Scattering of slow neutrons in ferromagnets. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 6:776, 1958.
- [54] T. Holstein e H. Primakoff. Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet. *Physical Review*, 58:1098–1113, 1940.
- [55] J. Schwinger. *On angular momentum in Quantum Theory of Angular Momentum*. Academic, New York, 1965.
- [56] D. P. Arovas e A. Auerbach. Functional integral theories of low-dimensional quantum Heisenberg models. *Physical Review B*, 38:316–332, 1988.
- [57] S. Saker, C. Jayaprakash, H.R. Krishnamurthy e M. Ma. Bosonic mean-field theory of quantum Heisenberg spin systems: Bose condensation and magnetic order. *Physical Review B*, 40:5028–5035, 1989.
- [58] T. K. Ng. Schwinger-boson mean field theory for $s=1$ open spin chain. *Physical Review B*, 45:8181–8184, 1992.
- [59] M. Azzouz e B. Douçot. Effect of small interchain coupling on one-dimensional antiferromagnetic quantum Heisenberg spin systems: The integer-spin case. *Physical Review B*, 47:8660–8666, 1993.
- [60] C. J. De Leone e G. T. Zimanyi. Schwinger-boson theory of the quantum XXZ model. *Physical Review B*, 49:1131–1136, 1994.
- [61] D. P. Arovas e A. Auerbach. Extended Heisenberg models of antiferromagnetism: Analogies to the fractional quantum hall effect. *Physical Review Letters*, 60:531–534, 1988.
- [62] R. L. Stratonovich. On a method of calculating quantum distribution functions. *Soviet Physics Doklady*, 2:416, 1957.

- [63] J. Hubbard. Calculation of partition functions. *Physical Review Letters*, 3:77–78, 1959.
- [64] P. Li e S. Q. Shen. Two-dimensional gapless spin liquid in frustrated SU(N) quantum magnets. *New Journal of Physics*, 6,160:1–13, 2004.
- [65] N. B. An. A step-by-step Bogoliubov transformation method for diagonalising a kind of non-hermitian effective hamiltonian. *Journal of Physics C*, 21:1209–1211, 1988.
- [66] A. L. Fetter e J. D. Walecka. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. McGraw-Hill, 1971.
- [67] J. P. Blaizot e G. Ripka. *Quantum Theory of Finite Systems*. MIT Press, 1985.
- [68] M. Takahashi. Modified spin-wave theory of a square-lattice antiferromagnet. *Physical Review B*, 40:2494–2501, 1989.
- [69] H. F. Lü e Z. F. Xu. Phase diagram and critical properties of the spin-1 Heisenberg model with single-ion anisotropy. *Physics Letters A*, 360:169–173, 2006.
- [70] A. S. T. Pires, L. S. Lima e M. E. Gouvêa. The phase diagram and critical properties of the two-dimensional anisotropic XY model. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 20:015208, 2008.
- [71] J. P. Renard, M. Verdaguer, L. P. Regnault, W. A. C. Erkelens, J. Rossat-Mignod, J. Ribas, W. G. Stirling e C. Vettier. Quantum energy gap in two quasi-one-dimensional $s=1$ Heisenberg antiferromagnets. *Journal of Applied Physics*, 63:3538–3545, 1988.
- [72] J. P. Renard, M. Verdaguer, L. P. Regnault, W. A. C. Erkelens, J. Rossat-Mignod e W. G. Stirling. Presumption for a quantum energy gap in the quasi-one-dimensional $s=1$ Heisenberg antiferromagnet $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2(\text{ClO}_4)$. *Europhys. Letters*, 3:945–952, 1987.

- [73] K. Katsumata, H. Hori, T. Takeuchi, M. Date, A. Yamagishi e J. P. Renard. Magnetization process of an $s=1$ linear-chain Heisenberg antiferromagnet. *Physical Review Letters*, 63:86–88, 1989.
- [74] Y. Ajiro, T. Goto, H. Kikuchi, T. Sakakibara e T. Inami. High-field magnetization of a quasi-one-dimensional $s=1$ antiferromagnet $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2(\text{ClO}_4)$: Observation of the Haldane gap. *Physical Review Letters*, 63:1424–1427, 1989.
- [75] A. Auerbach. *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. Springer-Verlag, 1994.
- [76] H. T. Wang e Y. Wang. Long-range order in gapped magnetic systems induced by Bose-Einstein condensation. *Physical Review B*, 71:104429–1–104429–5, 2005.
- [77] R. R. P. Singh e D. A. Huse. Ground state of the spin-half kagome-lattice Heisenberg antiferromagnet. *Physical Review B*, 76:180407–1–180407–4, 2007.
- [78] J. B. Marston e C. Zeng. Spin-peierls and spin-liquid phases of kagome quantum antiferromagnets. *Journal of Applied Physics*, 69:5962–5965, 1991.
- [79] A. Mattsson e P. Fröjdh. Frustrated honeycomb Heisenberg antiferromagnet: A Schwinger-boson approach. *Physical Review B*, 49:3997–4002, 1994.
- [80] A. Mattson. Spin dynamics of the triangular Heisenberg antiferromagnet: A Schwinger-boson approach. *Physical Review B*, 51:11574–11579, 1995.
- [81] D. Yoshioka. Mean field theory of the square lattice antiferromagnetic Heisenberg model. *Journal of the Physical Society of Japan*, 58-1:32–25, 1989.
- [82] D. Yoshioka. Boson mean field theory of the square lattice Heisenberg model. *Journal of the Physical Society of Japan*, 58-10:3733–3745, 1989.
- [83] Y. Fukumoto. Thermodynamic properties of the square lattice XXZ model: A Schwinger boson mean-field theory. *Journal of the Physical Society of Japan*, 65-2:569–580, 1996.

-
- [84] A. R. Moura, A. R. Pereira e A. S. T. Pires. Casimir-energy-induced confinement and deconfinement of spinons in a two-dimensional anisotropic nonlinear sigma model. *Physical Review B*, 75:014431–1–014431–9, 2007.
- [85] A. R. Moura, A. R. Pereira, W.A. Moura-Melo e A. S. T. Pires. Skyrmion dynamics in single-hole néel ordered doped two-dimensional antiferromagnets with arbitrary spin. *Phys. Letters A*, 372:4311–4314, 2008.