

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS  
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

TRANSIÇÃO DE FASE QUÂNTICA NO MODELO  $J_1 - J'_1 - J_2$   
ANTIFERROMAGNÉTICO

Griffith Mendonça Andrade Sousa

Manaus - 2009

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS  
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

TRANSIÇÃO DE FASE QUÂNTICA NO MODELO  $J_1 - J'_1 - J_2$   
ANTIFERROMAGNÉTICO

Griffith Mendonça Andrade Sousa

Orientador: Prof. Dr. José Ricardo de Sousa

Co-orientador: Prof. Dr. Minos Adão Neto

Dissertação de mestrado apresentada ao  
Departamento de Física da Universidade  
Federal do Amazonas, como parte dos re-  
quisitos básicos para obtenção do título de  
Mestre em Física

Manaus - 2009

# Índice

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Considerações Gerais . . . . .	1
1.2	Interação entre Spins: Modelo de Heisenberg . . . . .	10
1.2.1	Modelo de Ising . . . . .	16
1.2.2	Modelo XY . . . . .	17
1.3	Aspectos da Teoria de Fenômenos Críticos e Transições de Fase . . . . .	19
1.3.1	Expoentes Críticos e a Hipótese da Universalidade . . . . .	20
1.4	Apresentação da Tese . . . . .	30
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>31</b>
<b>2</b>	<b>Teoria de Campo efetivo</b>	<b>35</b>
2.1	Introdução . . . . .	35
2.2	Média Estatística em aglomerados finitos . . . . .	36
2.3	Campo Efetivo no Modelo de Ising . . . . .	38
2.4	Modelo de Heisenberg . . . . .	48
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>51</b>
<b>3</b>	<b>Modelos Frustrados e Resultados Teóricos</b>	<b>53</b>
3.1	Introdução . . . . .	53
3.2	Heisenberg Quântico Frustrado em 2D . . . . .	55
3.2.1	Modelagem Teórica dos Compostos de Vanádio . . . . .	55

3.2.2	Técnica do Operador Diferencial . . . . .	65
3.2.3	Estado Antiferromagnético . . . . .	66
3.3	Funcional de Energia Livre . . . . .	71
3.3.1	Resultados . . . . .	73
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>74</b>
4	<b>Considerações finais e Perspectivas Futuras</b>	<b>81</b>

# Lista de Tabelas

1.1	Valores teóricos e experimentais dos expoentes críticos [2] . . . . .	25
2.1	Valores de temperaturas críticas para várias redes $2d$ e $3d$ no modelo de Ising- $\frac{1}{2}$ . Resultados obtidos via teoria de campo efetivo com aglomerados de 1 spin (EFT-1) e dois spins (EFT-2). Na última coluna apresentamos os resultados via simulação de Monte-Carlo.[8] . . . . .	47
2.2	Temperaturas críticas reduzidas para o modelo de Heisenberg numa rede cúbica simples obtidos por várias técnicas, EFT-2[9], Aproximação de Pares[10] e Monte Carlo[11],[12]. . . . .	51

# Lista de Figuras

1.1	Magnetização como função da temperatura. Curvas obtidas para alguns valores de $J$ . [2] . . . . .	3
1.2	Célula unitária do composto isolante antiferromagnético $La_2CuO_4$ numa rede ortorrômbica [5] . . . . .	5
1.3	Esquema do estado líquido de spin LS numa rede quadrada formado por estados singletos de dímero LS, onde ao invés de existir ordem magnética de longo-alcance, existe na verdade uma ordem local de estado singletos. Em outro aspecto pode-se dizer que surgiu uma ordem de longo-alcance formada por estes dímeros (correlação entre dímeros).	7
1.4	Função de onda para os estados (LS). . . . .	7
1.5	Diagrama de fase do composto superconductor $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ [7]. . . . .	8
1.6	Comportamento assintótico $\ln(M)$ versus $\ln(-\epsilon)$ , $\ln(\chi^{-1})$ versus $\ln(\epsilon)$ e $\ln(M)$ versus $\ln(H)$ para uma liga metálica $Fe_{1-x}Al_x$ com concentração $x = 0.10$ [24] . . . . .	23
1.7	O estado fundamental de uma célula unitária de uma rede triangular do modelo de Ising-1/2 antiferromagnético. . . . .	28
1.8	Estado fundamental de uma célula unitária de uma rede triangular do modelo XY antiferromagnético (vórtices). . . . .	29
2.1	Aglomerado $\Omega$ e vizinhança $\Omega'$ . . . . .	37
2.2	Aglomerado $\Omega$ com um spin . . . . .	39
2.3	Aglomerado $\Omega$ com dois spins . . . . .	39

2.4	Topologia de redes em aglomerados de dois spins: (a) Rede Kagomé, (b) Rede quadrada, (c) Triangular e (d) Cúbica simples. . . . .	46
3.1	Frustrações na rede quadrada . . . . .	54
3.2	Estrutura do composto $Li_2VOSiO_4$ . a) Vista paralela às camadas $[VOPO_4]$ . b) Vista paralela à linha central de $c$ . Os cations de $Li$ são mostrados como esferas cinzas. O quadrado tracejado indica a estrutura 2D-quadrada dada forma pela interação $J_1 - J_2$ que é frustrada pela interação $J_2$ representada pelas linhas pontilhadas. . . . .	56
3.3	Aglomerado com dois spins modelando as interações $J_1 - J_2$ entre primeiros e segundos vizinho, respectivamente uma rede quadrada no modelo de Heisenberg quântico frustrado. . . . .	57
3.4	Diagrama de fase esquemático do modelo de Heisenberg quântico de spin 1/2 frustrado numa rede quadrada[4] . . . . .	58
3.5	Ordenamento magnético do modelo frustrado numa rede quadrada. (a) ordem de Néel ou antiferromagnética, (b) ordem colinear. . . . .	58
3.6	Esquema de uma rede pyrochlore. Os sítios são localizados nos vértices dos tetraedros.[3] . . . . .	59
3.7	Modelagem do modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ ; a) Fase antiferromagnética, b) colinear . . . . .	63
3.8	Diagrama de fase em $T=0$ do modelo $J_1 - J'_1 - J_2$ na rede quadrada no plano $J_2 - J'_1$ ( $J_1 \equiv 1$ , $J'_1 = J'$ ) obtido por Sindzinger[53] . . . . .	63
3.9	Diagrama de fase em $T=0$ do modelo $J_1 - J_1 - J_2$ numa rede quadrada no plano $J_2 - J'_1$ ( $J_1 = 1$ ) obtido por Bishop e colaboradores . . . . .	64
3.10	Condições de contorno da fase antiferromagnética . . . . .	66
3.11	Condições de contorno da fase colinear . . . . .	71

3.12	<p>Diagrama de fase em <math>T=0</math> no plano <math>\alpha - \lambda</math> do modelo <math>J_1 - J'_1 - J_2</math> na rede quadrada obtido por EFT-2 analisando a transição contínua entre as fases AF e PQ. As linhas tracejadas e contínua correspondem as transições de primeira a segunda ordem, respectivamente. As notações CAF, AF e PQ correspondem, respectivamente os estado colinear antiferromagnética coluna, antiferromagnética e paramagnética quântica, PTQ indica o ponto triplo quântico. . . . .</p>	75
3.13	<p>A figura do lado superior esquerdo corresponde a comparação da transição de fase entre AF-PQ obtida pelos dois métodos. As linhas tracejadas correspondem as transições de primeira ordem. As notações CAF, AF e PQ correspondem, respectivamente os estado colinear antiferromagnética coluna, antiferromagnética e paramagnética quântica, PTQ indica o ponto triplo quântico. . . . .</p>	76



## Agradecimentos

A Deus.

A minha família, em especial meus pais que financiaram meus estudos, fornecendo todo apoio necessário. A Sabrina Rufo e amigos que acompanham minha carreira acadêmica

Ao prof. Dr. José Ricardo de Sousa, por propor este trabalho, tendo sempre me ajudado como orientador e amigo.

Aos professores do departamento de Física da UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS que me acompanharam nas diversas disciplinas da graduação e Pós-graduação

A UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS (UFAM).

A Coordenação de Aperfeiçoamento Pessoal de Nível Superior (CAPES).

## Resumo

Nos últimos 20 anos a comunidade científica tem estudado bastante o modelo de Heisenberg spin-1/2 com interações de troca antiferromagnéticas entre primeiros e segundos vizinhos na rede quadrada (o modelo  $J_1 - J_2$ ) ideal, onde as interações  $J_1$  e  $J_2$  são tomadas, respectivamente ao longo dos lados e da diagonal de uma rede quadrada. O diagrama de fase no estado fundamental desse modelo apresenta duas fases ordenadas: antiferromagnética-AF e colinear-CAF para  $\alpha = \frac{J_2}{J_1} < \alpha_{1c}$  e  $\alpha > \alpha_{2c}$ , respectivamente. Enquanto que para valores de  $\alpha$  intermediários  $\alpha_{1c} < \alpha < \alpha_{2c}$  temos a fase paramagnética quântica-PQ (liquido-spin). Neste trabalho generalizamos o modelo  $J_1 - J_2$ , considerando a inequivalência dos acoplamentos de primeiros vizinhos  $J_1$  e  $J'_1$  (interações ao longo dos lados da estrutura quadrada), onde eles se relacionam através do parâmetro de competição entre cadeias lineares de spin ( $\lambda$ ) da seguinte forma:  $J'_1 = \lambda J_1$ . O diagrama de fase em  $T = 0$  no plano  $\alpha - \lambda$  do modelo  $J_1 - J'_1 - J_2$  na rede quadrada é estudada através da técnica do operador diferencial via teoria de campo efetivo em aglomerados com  $N = 2$  spins. Propomos um funcional para a energia livre como uma expansão em série de potência do parâmetro de ordem (expansão de Landau), e as linhas de transições entre as fases AF-PQ, CAF-PQ e CAF-AF foram obtidas numericamente. As linhas de transição emergem para um ponto triplo quântico (PTQ) com coordenadas ( $\alpha_t \approx 0.50$ ,  $\lambda_t \approx 0.52$ ), que a baixo temos uma transição direta de fase entre os estados CAF e AF, e acima, existe um estado intermediário desordenado PQ. A transição entre as fases AF e PQ é de segunda ordem quando analisamos o comportamento do parâmetro de ordem, enquanto entre as fases CAF e PQ é de primeira ordem

## Abstract

Over the last 20 years or so much theoretical effort has been expended on the two-dimensional quantum spin-1/2 Heisenberg model with competing nearest-neighbor (nn) and next-nearest-neighbor (nnn) antiferromagnetic exchange interactions on square lattice (the ideal  $J_1 - J_2$  model). The ideal  $J_1 - J_2$  model consists of a quantum spin-1/2 Heisenberg Hamiltonian with nn interaction  $J_1$  running along the side of the diagonal the square lattice and nnn interactions  $J_2$  running the diagonal the square lattice. The two interactions ( $J_1$  and  $J_2$ ) are equivalent along of all direction. The ground-state phase diagram reveals two ordered phases antiferromagnetic-AF and collinear-CAF for  $\alpha = \frac{J_2}{J_1} < \alpha_{1c}$  and  $\alpha > \alpha_{2c}$ , respectively, and an intermediate quantum paramagnetic (spin-liquid) phase without magnetic long-range order in the region  $\alpha_{1c} < \alpha < \alpha_{2c}$ . In this work, we will consider the inequivalence nn couplings  $J_1$  and  $J'_1 = \lambda J_1$  in the two orthogonal spatial lattice dimensions with all the two orthogonal spatial dimensions with all the nnn bonds across the diagonals to have the same strength  $J_2$  ( $J_1 - J'_1 - J_1$  model). This spatial anisotropy tends to narrow the critical region and to destroy it completely at a certain value of the interchain parameter  $\lambda$ . The Hamiltonian is solved by effective field theory (EFT) in cluster with two spins. We propose a functional for the free energy to obtain the phase diagram in the  $(\alpha, \lambda)$  plane. We found a result that there exists a quantum triple point (QTP) with coordinate at  $(\alpha_t \approx 0.50, \lambda_t \approx 0.52)$  below which there is a first-order phase transition between the AF and CAF phases, while above this QTP are these two ordered phases separated by the intermediate magnetically disordered phase. The transition between the AF and intermediate phase is of second-order, while between the intermediate and CAF phases is of first-order.

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Considerações Gerais

Desde muito tempo, o estudo das propriedades magnéticas da matéria tem chamado bastante atenção da comunidade científica e em particular os físicos de matéria condensada. Este interesse é justificado pela ampla aplicação das propriedades magnéticas no desenvolvimento tecnológico. Diversos materiais da natureza (universo) exibem propriedades magnéticas, ou seja, são capazes de atrair ou influenciar outros materiais magnéticos. Entre os materiais que exibem estas propriedades, pode-se destacar o *MnSb*, *CrTe*, *CrO<sub>2</sub>*, *CrBr<sub>3</sub>*, Ferro (*Fe*), Níquel (*Ni*), Cobalto (*Co*) e algumas de suas ligas.

Os primeiros relatos acerca do conhecimento humano desses materiais são comumente associados aos gregos, por volta de 800 a.c., embora, a primeira menção escrita à existência de ímãs esteja atribuída a um chinês chamado Guanzhong, que morreu em 645 a.c. Objetos feitos de materiais magnéticos foram recuperados em sítios arqueológicos muito mais antigos.

Já nos últimos séculos a.c os chineses conheciam o direcionamento dos ímãs em relação aos pólos geográficos terrestres, e por esta razão atribui-se a invenção da bússola (primeiro artefato tecnológico baseado no magnetismo construído pelo

homem) aos chineses, por volta de 1000 d.c.

Embora o magnetismo seja um dos fenômenos físico mais antigos conhecidos pelo homem, e talvez o primeiro a chamar a atenção do homem para o interior da matéria, a primeira explicação qualitativa atribuída ao magnetismo é relativamente nova e data do início do século XX.

Pierre Weiss [1] em 1907 foi o primeiro a tentar explicar qualitativamente as propriedades dos materiais magnéticos que possuíam a propriedade de magnetização espontânea, ou seja, materiais classificados como Ferromagnéticos (abaixo de uma temperatura característica  $T_c$ , conhecida como temperatura de Curie).<sup>1</sup>

A figura 1.1 mostra que esses materiais só possuem magnetização espontânea para valores de temperaturas menores que uma dada temperatura crítica  $T_c$  (característica do material), e para temperaturas maiores que a temperatura crítica  $T > T_c$ , o material perde sua magnetização tornando-se um material paramagnético, ou seja, sem magnetização espontânea (o parâmetro  $J$  mostrado na figura 1.1 representa o momento magnético total (spin)).

A teoria de Pierre Weiss propõem que um único momento magnético associado a um íon da rede cristalina do material interage através de um campo com todos os demais íons da rede. Pierre chamou este campo de **campo molecular**, definido como sendo proporcional à média dos momentos magnéticos da rede, ou seja a magnetização. Apesar da teoria de Pierre levar em conta aspectos microscópicos da matéria, a teoria de campo molecular proposta por ele não se baseia na mecânica quântica que se originou à partir dos estudos de Bohr, dessa forma, é perfeitamente natural que esteja sujeita a inconsistências físicas.

A teoria de Pierre prevê qualitativamente bem a temperatura crítica  $T_c$  de compostos ferromagnéticos que apresentam temperatura crítica *baixa, como por exemplo*  $MnSb$ ,  $CrTe$ ,  $CrO_2$ ,  $CrBr_3$ ,  $EuO$ ,  $EuS$ , enquanto que para materiais que

---

<sup>1</sup> Pierre obteve sua teoria fazendo uso de argumentos fenomenológicos, ou seja, uma teoria cujas proposições se refiram exclusivamente a propriedades e relações baseadas apenas em experiências (fenomenologicamente) acessíveis entre os fenômenos

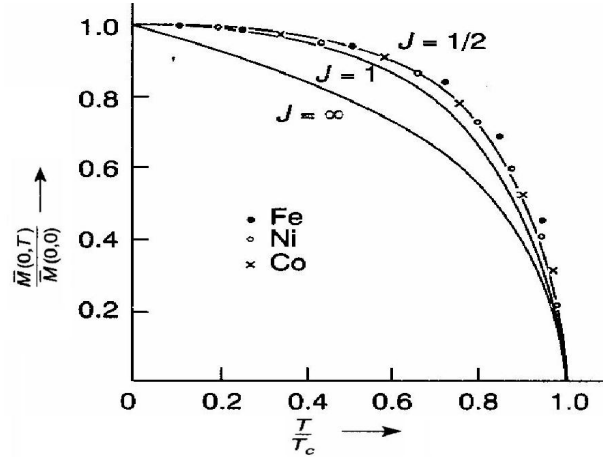


Figura 1.1: Magnetização como função da temperatura. Curvas obtidas para alguns valores de  $J$ . [2]

apresentem altas temperaturas críticas como;  $Fe$ ,  $Ni$  e  $Co$ , a teoria falha completamente. A falha descrita acima está diretamente relacionada com as considerações física básica da teoria. Fisicamente, para explicar as propriedades de compostos ferromagnéticos Pierre considerou que apenas a energia de interação entre os momentos de dipolo magnéticos dos íons do composto contribuíam para a formação dos ordenamentos, no caso ferromagnético. Esta consideração supõe uma energia de interação tipo dipolos magnéticos da ordem de  $\Delta E \approx \frac{\mu^2}{a^3} = 10^{-4}eV$ , onde  $\mu$  é o momento magnético (magnéton de bohr) dos íons e  $a = 10^{-10}m$  é o parâmetro de rede, ou seja a distância entre íons. Baseado na energia de interação entre os íons, podemos estimar um valor para  $T_c$ , para isso, igualamos a energia térmica  $k_B T$  (energia adquirida pelos íons do material no processo de aumento de temperatura) com a energia de interação entre seu íons (energia responsável para manter o ordenamento estável). Fazendo isso, obtém-se um valor da ordem de  $T_c = 10^{-1}K$ . Este valor para a temperatura crítica não está consistente com a realidade observada, uma vez que experiências mostram que alguns materiais como  $Fe$ ,  $Ni$  e  $Co$  apresentam temperatura crítica muito mais elevadas (i.e.  $T_c(Fe) = 543K$ ,  $T_c(Ni) = 731K$ ,  $T_c(Co) = 1395K$ ). Essas temperaturas nos permitem concluir que o magnetismo no interior da matéria

é capaz de resistir a altos valores de energia térmica.

A inconsistência acima entre a teoria de Pierre Weiss e a experiência mostra que a origem do forte magnetismo da matéria não se deve exclusivamente as interações entre os íons. Sendo assim, deve existir outro tipo de energia proveniente de uma interação mais forte que a interação entre momentos de dipolos. Esta especulação só seria respondida após a formulação da mecânica quântica.

A mecânica quântica aliada as modernas técnicas experimentais, permitiram que o homem interpretasse de forma mais consistente o interior da matéria. Os conceitos proveniente da mecânica quântica permitiram a descoberta de uma propriedade quântica e intrínseca dos elétrons, chamada de spin. Diferentemente da interação entre os íons, que dá origem a uma energia que não explica os altos valores de temperatura crítica, a interação entre os spins produz uma energia representada pelo símbolo ( $J$ ) que é suficientemente forte para explicar altos valores de  $T_c$ . A energia  $J$  é de natureza eletrostática e é conhecida como **energia de troca**, *energia de intercâmbio* ou do termo em inglês **exchange** [3]. Essa interação microscópica é a principal responsável pelo forte magnetismo da matéria. Numa estimativa temos que  $J \approx \frac{e^2}{a}$  ( $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$  é a carga do elétron) e que comparada com a energia térmica  $k_B T_c$  obtemos  $T_c \approx 10K$  em concordância com a experiência.

O ferromagnetismo F não é o único tipo de manifestação magnética da matéria, Além dos materiais F existem ainda os materiais antiferromagnéticos AF, ferrimagnéticos, diamagnéticos e paramagnéticos P. Neste trabalho, deteremo-nos no estudo do ordenamento AF, inicialmente estudado por L. Néel em 1936 [4]. O ordenamento AF não apresenta magnetização na ausência de campo externo. A principal diferença (macroscópica) entre os ordenamentos magnéticos F e AF está na magnetização total de cada um, pois na ausência de campo magnético externo, o ordenamento F possui magnetização total diferente de zero.

O comportamento dos materiais AF é explicado pelo fato de que nesses materiais, abaixo da temperatura crítica  $T_N$  conhecida como temperatura de Néel, os átomos magnéticos interagem de forma a alinhar antiparalelamente a direção de

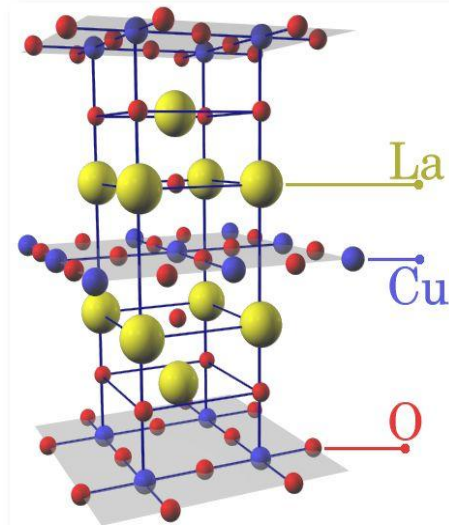


Figura 1.2: Célula unitária do composto isolante antiferromagnético  $La_2CuO_4$  numa rede ortorrômbica [5]

seus momentos magnéticos (spins), resultando assim numa magnetização total nula. Sabe-se ainda que do ponto de vista microscópico os materiais AF são constituídos por duas sub-redes que se interpenetram formando momentos magnéticos não nulo em cada uma delas, mas de tal forma que suas magnitudes se cancelam resultando numa magnetização total nula em qualquer temperatura. <sup>2</sup>

Essencialmente, a interação que cria os ordenamentos magnéticos AF e F têm origem na energia de troca  $J$  entre seus momentos de spins. Os compostos F e AF são modelados através de um Hamiltoniano, proposto por Heisenberg em 1926 [3], e expresso matematicamente por.

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

onde  $J_{ij} > 0$  ( $J_{ij} < 0$ ) é a interação de troca F(AF) entre os dois sítios  $i$  e  $j$  na rede cristalina, a soma é feita entre primeiros, segundos, etc vizinhos mais próximos e  $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$  é o operador de spin no sítio  $i$ ,

<sup>2</sup>Esse tipo de descrição só é válido para  $T < T_N$ , acima de  $T_N$  o material torna-se paramagnético sem ordenamento



Nas últimas três décadas, o modelo de Heisenberg antiferromagnético de  $spin - 1/2$  na rede quadrada tem sido muito explorado na literatura [6], motivado, sobretudo, pela possibilidade de ser aplicado para tratar os compostos supercondutores em altas temperaturas formados por planos de  $CuO_2$ , por exemplo, o composto  $La_{2-x}(Sr, Ba)_xCuO_4$ . Este composto puro ( $x = 0$ ), i.e,  $La_2CuO_4$  (ver figura 1.2, célula unitária da rede ortorrômbica) é um isolante quase bidimensional descrito pelo modelo Heisenberg antiferromagnético, onde os íons de  $Cu^{+2}$  no plano a-c interagem antiferromagneticamente com uma interação de troca  $J$  e entre os planos de  $CuO_2$  com uma interação  $\lambda J$  onde  $\lambda \sim 10^{-5}$ . Acontece que através do processo de dopagem, por meio de elementos alcalinos, como  $(Ba, Sr)$ , são formados buracos no átomo de oxigênio criando um spin efetivo  $S = \frac{1}{2}$  entre os dois átomos de cobre no plano de  $CuO_2$ . Estes buracos, aleatoriamente distribuídos neste plano, interagem ferromagneticamente com os dois átomos de cobre vizinhos, introduzindo assim uma frustração magnética fazendo com que a ordem antiferromagnética AF seja destruída para certo valor de concentração crítica  $x_{1c}$ . A destruição da ordem AF (fase isolante) é acompanhada pelo surgimento da fase supercondutora em temperaturas inferior a 36K. Nestes Cupratos, o antiferromagnetismo e supercondutividade são separados através de um regime de pseudogap

Nos últimos anos, têm sido conjecturado que este regime de pseudogap está conectado através de um ponto crítico quântico não usual. Em particular, a ordem AF pode ser destruída dando origem a um estado líquido de spin (LS) sem ordem de longo-alcance e que pode ser a responsável pelo acoplamento dos pares de Cooper. Por esse motivo, os pontos críticos quânticos, presentes no estado líquido de spin (LS), têm sido muito explorados na literatura, tanto do ponto de vista teórico como experimental [7]. Esta conjectura têm sido muito discutida porque em particular, este estado (LS) é caracterizado pela existência de estados singletos que podem ser formados por dímeros ou plaquetas distribuídos aleatoriamente sobre uma rede cristalina. A Fig.(1.3) esquematiza este estado LS para o caso de dímeros, onde a função de onda do estado fundamental é uma superposição de várias configurações

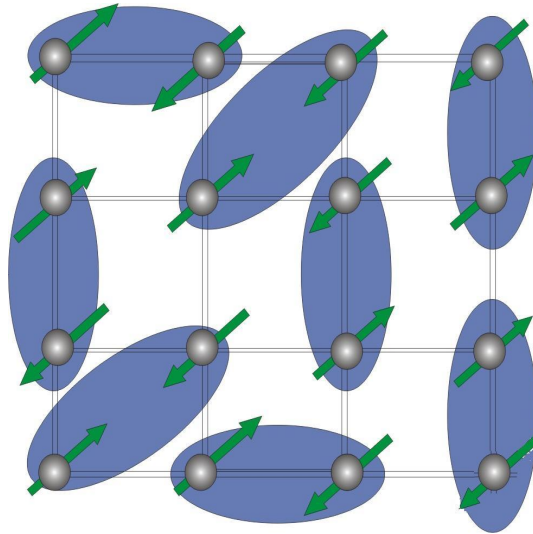


Figura 1.3: Esquema do estado líquido de spin LS numa rede quadrada formado por estados singletos de dímero LS, onde ao invés de existir ordem magnética de longo-alcance, existe na verdade uma ordem local de estado singletos. Em outro aspecto pode-se dizer que surgiu uma ordem de longo-alcance formada por estes dímeros (correlação entre dímeros).

destes estados singletos de dímeros, representado esquematicamente na Fig.(1.4).

Os primeiros estudos sobre este tipo de ordenamento foi feito na década de oitenta por Shastry e Sutherland [8], e somente em 1989 este estado LS foi estudado usando teoria ondas de spin [7].

Uma grande motivação para estudar este estado LS deve-se ao fato de que o  $\text{gap-}\Delta$  é proporcional a interação de troca (i.e  $\Delta \approx J$ ), logo ele pode ser o responsável pelo emparelhamento dos pares de Cooper nos compostos supercondutores de altas

$$|\Psi\rangle = \left[ \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \text{blue} & \text{white} & \text{white} & \text{blue} \\ \hline \text{white} & \text{blue} & \text{white} & \text{white} \\ \hline \text{white} & \text{white} & \text{blue} & \text{white} \\ \hline \text{blue} & \text{white} & \text{white} & \text{blue} \\ \hline \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \text{white} & \text{blue} & \text{white} & \text{white} \\ \hline \text{blue} & \text{white} & \text{white} & \text{white} \\ \hline \text{white} & \text{white} & \text{blue} & \text{white} \\ \hline \text{white} & \text{white} & \text{white} & \text{blue} \\ \hline \end{array} \right] + \dots$$

Figura 1.4: Função de onda para os estados (LS).

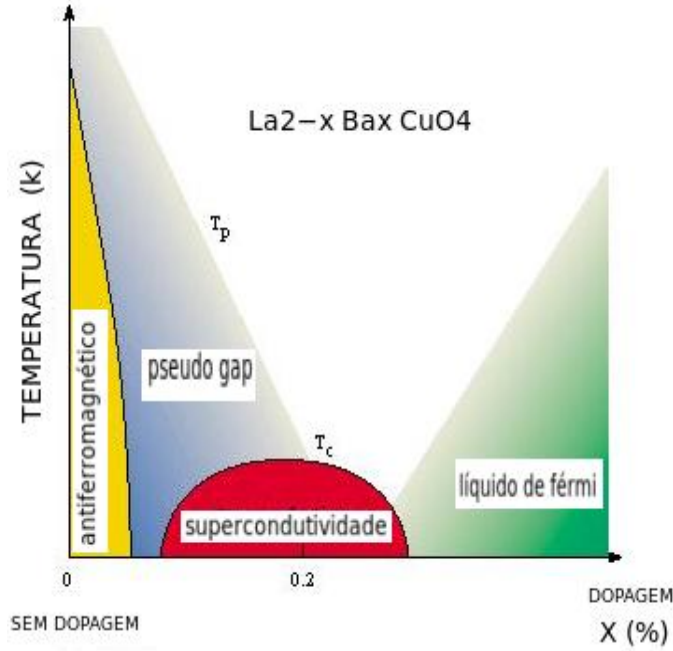


Figura 1.5: Diagrama de fase do composto supercondutor  $La_{2-x}Ba_xCuO_4$  [7].

temperaturas formados por planos de  $CuO_2$ , tipo  $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ , o que a princípio explica os altos valores de  $T_c$  nestes compostos, não compreendidos através da teoria BCS, que associa o valor do gap a interação fônon ( $\hbar\omega$ ). Na Fig.(1.5) temos o diagrama de fase deste composto supercondutor, que para baixas concentrações de buracos o sistema é um isolante com ordenamento AF e para  $x_{1c} < x < x_{2c}$  temos um estado metálico supercondutor, e acima  $x > x_{2c}$  um condutor normal.

Teoricamente, o modelo de Heisenberg  $s = 1/2$  numa rede quadrada com interações entre primeiros ( $J_1$ ) e segundos ( $J_2$ ) vizinhos (denotado de modelo  $J_1 - J_2$ ) é modelado pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_1 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} J_2 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.2)$$

onde a primeira soma é feita sobre os primeiros vizinhos e a segunda sobre os segundos vizinhos.

O modelo  $J_1 - J_2$  tem sido usado na descrição das propriedades magnéticas dos compostos de vanádio quase-2d, como, por exemplo, o  $Li_2VO_2SiO_4$ , que através de

medidas experimentais de ressonância magnética nuclear (RMN) foi observado que este composto apresenta um ordenamento colinear e estimaram que  $J_2 = 1.1J_1$ . Outros compostos formados por vanádio tipo  $Li_2VOGeO_4$ ,  $VOMoO_4$  e  $BaCdVO(PO_4)_2$  são bem descritos teoricamente pelo modelo  $J_1 - J_2$  e o seu estado fundamental é colinear [9].

Numa rede quadrada em  $T = 0$ , o Hamiltoniano (1.2) apresenta dois tipos de ordenamentos dependendo do raio  $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$ . No caso  $J_2 > 0$  (AF) e  $J_1$  arbitrário, os spins na rede não satisfazem as orientações presentes no Hamiltoniano, ou seja, se  $J_1 > 0$  então todos os primeiros vizinhos tendem a se orientarem, antiparalelamente, provocando assim um conflito de orientação dos spins na rede quadrada. A este conflito de orientação dos spins na rede cristalina denominamos de frustração magnética. Note que a frustração no Hamiltoniano (1.2) é induzida pela competição entre interações, porém, o conceito foi inicialmente introduzido por Thoulouse [10] para descrever o conflito de configuração do modelo de Ising AF numa rede triangular, neste caso dizemos ter uma frustração induzida pela topologia da rede. Outras topologias de redes que têm como uma célula unitária um triângulo são frustradas quando um dado Hamiltoniano é AF, por exemplo, as redes kagomé e cúbica de faces centradas (fcc). Uma consequência dessa frustração (infinitos estados fundamentais) está associada a existência de uma entropia residual em  $T = 0$  ( $S(0) \neq 0$ ), contrário ao resultado da rede ferromagnética que apresenta uma única configuração dos spins apresentando  $S(0) = 0$ .

A presença de frustração magnética pode induzir o sistema a evoluir para estados magnéticos complexos, como, por exemplo, estado vidro de spin, helimagnetismo, etc. No caso do Hamiltoniano (1.2), que descreve as propriedades magnéticas dos compostos formados por planos de vanádios, para pequenos valores do parâmetro de frustração  $\alpha \ll 1$  o estado fundamental é AF se  $J_1 < 0$ , ou F se  $J_1 > 0$ . Para  $\alpha \gg 1$ , o estado é denominado colinear, onde os spins são orientados ferromagneticamente ao longo de uma cadeia e alternada em direções opostas dos spins entre cadeias. No caso de spin clássico, existe um ponto crítico  $\alpha_c = 1/2$  que delimita

estes dois estados ordenados, ou seja, para  $\alpha < \alpha_c$  temos uma ordem AF(F) e  $\alpha > \alpha_c$  uma ordem colinear (ou superantiferromagnética-SAF). Adotamos a nomenclatura CAF para o estado colinear AF quando  $J_1 > 0$  no Hamiltoniano (1.2) e CF para o estado colinear F quando  $J_1 < 0$ . Por outro lado, no caso de spin quântico, em particular  $s=1/2$ , existe um estado intermediário desordenado (líquido spin) na região  $\alpha_{1c} < \alpha < \alpha_{2c}$ , onde para  $\alpha < \alpha_{1c}$  temos uma ordem AF(F) e para  $\alpha > \alpha_{2c}$  uma ordem CAF(CF). A natureza do estado LS, assim como a ordem de transição de fase nos pontos  $\alpha = \alpha_{1c}$  e  $\alpha = \alpha_{2c}$ , constitui tema de muita investigação teórica e será objeto de estudo deste trabalho de dissertação de mestrado. Do ponto de vista experimental, o composto  $Li_2VOGeO_4$  apresenta um ordenamento CAF 3d com  $\alpha \approx 1$ . Recentemente, este composto colocado sob a ação de pressão na direção do eixo de fácil magnetização reduz em até 40% do valor do parâmetro de frustração  $\alpha(p)$ , o que de certa forma pode obter o diagrama de fase em  $T = 0$  e analisar a estrutura dos aglomerados no estado LS a ser obtido experimentalmente. Os dados experimentais [11] ainda não foram capazes de estabilizar o cristal sob pressão e obter o estado LS, mas pesquisas em andamento tem-se mostrado promissoras e motivadoras para o real entendimento deste estado quântico desordenado, bem como, as ordens de transição de fases em  $\alpha_{1c}$  e  $\alpha_{2c}$ .

## 1.2 Interação entre Spins: Modelo de Heisenberg

Com advento da mecânica quântica a partir da segunda metade da década de 20, surgiram novos conceitos físicos e foram descobertas muitas propriedades da matéria. Na área do magnetismo, em especial, o conceito de spin desempenhou um papel preponderante para o entendimento, do ponto de vista microscópico do magnetismo. Para explicar o forte magnetismo capaz de manter o ordenamento magnético à altos valores de temperatura, Heisenberg propôs em 1928 um modelo baseado na interação de troca entre spins [3].

Basicamente o modelo consiste de um sistema de spins localizados nos sítios

de uma rede cristalina e acoplados via uma interação de origem eletrostática. A descrição do modelo acima pode ser aplicado a um cristal que consiste de  $N$  átomos idênticos localizados nos sítios da rede. Para aplicar o modelo de Heisenberg a sistemas ferromagnéticos, antiferromagnéticos ou ferrimagnéticos, devemos fazer algumas considerações. Primeiramente, fisicamente devemos considerar que os elétrons das camadas mais cheias e os da banda de valência (ou condução) interagem fracamente entre si, e dessa maneira podem ser considerados como dois sistemas independentes.

As propriedades magnéticas da matéria podem ser estudadas levando em conta somente os elétrons das camadas mais internas (elétrons tipo  $d$  e elétrons tipo  $f$ ). Para isso, vamos supor que cada átomo tem um elétron tipo  $d$ , onde o momento orbital e a interação entre o momento magnético e orbital podem ser desprezados. Nestas circunstâncias, estamos considerando somente a interação entre o elétron tipo  $d$  e o tipo  $s$  dos átomos dos sítios da rede. Nestas considerações estão presentes os argumentos físicos que permitem estudar os ordenamentos magnéticos numa rede constituída de átomos em que cada átomo tem um elétron tipo  $s$  de valência como sendo o responsável pelo magnetismo.

A necessidade de estudar os sistemas magnéticos por meio do modelo de Heisenberg está no fato de que o magnetismo é um fenômeno quântico.

A energia de troca introduzida por Heisenberg, Frenkel e Dorfman [3] corresponde fisicamente a diferença de energia entre os ordenamentos de spins paralelos e antiparalelos, ou seja

$$J = E(\uparrow\uparrow) - E(\uparrow\downarrow)$$

Para entendermos a natureza da interação de troca entre spins, vamos considerar um sistema de dois elétrons descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_e} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_e} + V_L(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + V_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2), \quad (1.3)$$

onde as duas primeiras partes da soma correspondem a energia cinética dos elétrons,

e o restante a energia potencial ao qual os elétrons estão submetidos. O primeiro termo da energia potencial  $V_L(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  é simplesmente a energia de ligação (coulombiana) de cada elétrons com seu núcleo e  $V_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$  é o potencial coulombiano de interação entre os elétrons.

O Hamiltoniano da equação acima não contém termos que envolvam explicitamente os operadores de spin, sendo assim, a função de onda espacial é obtida por meio da equação de Schrodinger independente do tempo

$$\mathcal{H}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E(1, 2)\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (1.4)$$

onde  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  é a auto função e  $E(1, 2)$  a auto-energia dos dois elétrons. Como os elétrons são férmions, a função de onda total  $\Psi_T$  composta do produto entre a solução espacial  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  e spinorial  $\chi(1, 2)$  precisa ser antisimétrica com respeito a troca de coordenadas espaciais e spinoriais dos elétrons. O termo de spin pode ter duas configurações spinoriais, uma para o spins total  $S = 1$ , representada pelo estado tripleto (função de onda simétrica)

$$\chi_S^\alpha(1, 2) = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle, M = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), M = 0 \\ |\downarrow\downarrow\rangle, M = -1 \end{cases} \quad (1.5)$$

e outra para o spin total  $S = 0$ , representada pelo estado singleto(função de onda antisimétrica)

$$\chi_A(1, 2) = \frac{1}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), M = 0, \quad (1.6)$$

onde  $\chi(m_1, m_2)$  é o spinor dos dois elétrons com componente  $m_1$  e  $m_2$  representadas pelos símbolos  $\uparrow$  (up) e  $\downarrow$  (down) respectivamente.

Para obter a solução espacial devemos recorrer à teoria de perturbação estacionária, uma vez que o termo de potencial entre os elétrons,  $V_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ , não permiti uma solução tratamento analítica exata. O tripleto ( $\chi_S^\alpha$ ) e o singleto ( $\chi_A$ ) de spin correspondem a um tripleto e um singleto para as funções de onda total:

$$\Psi_{\text{triplete}}^\alpha(1, 2) = \Phi_A(1, 2)\chi_S^\alpha(1, 2) \quad (1.7)$$

$$\Psi_{\text{singleto}}(1, 2) = \Phi_S(1, 2)\chi_A(1, 2) \quad (1.8)$$

onde as funções  $\Phi_A(1, 2)$  e  $\Phi_S(1, 2)$  devem ser, respectivamente, antisimétricas e simétricas frente a troca, para que as funções totais sejam sempre antisimétricas.

A escolha mais simples que permite tratar  $V_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$  em primeira ordem de perturbação, consiste em escolher

$$\Psi_S(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) + \phi_\alpha(2)\phi_\beta(1)] \quad (1.9)$$

$$\Psi_A(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) - \phi_\alpha(2)\phi_\beta(1)], \quad (1.10)$$

onde  $\phi_\alpha$  e  $\phi_\beta$  são autofunções de  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$ . Conhecidas as funções de onda, podemos calcular as energias dos estados singletos e tripleto que serão, respectivamente,

$$E_s = \frac{\langle \Psi_S | H | \Psi_S \rangle}{\langle \Psi_S | \Psi_S \rangle} \quad (1.11)$$

$$E_A = \frac{\langle \Psi_A | H | \Psi_A \rangle}{\langle \Psi_A | \Psi_A \rangle} \quad (1.12)$$

Lembrando que  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$  são idênticos, constituindo o Hamiltoniano atômico de um único elétron, e  $V(1, 2)$  é a repulsão coulombiana entre os dois elétrons, temos que  $\phi_\alpha$  e  $\phi_\beta$  pertencem ao mesmo conjunto de autofunções ortogonais. Se a subcamada é degenerada, usando teoria de perturbação em primeira ordem temos que

$$E_s = \varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta + K_{\alpha\beta} + J_{\alpha\beta} \quad (1.13)$$

$$E_t = \varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta + K_{\alpha\beta} - J_{\alpha\beta}, \quad (1.14)$$

onde  $E_0 = \varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta + K_{\alpha\beta}$  é a energia na ausência da perturbação Coulombiana, sendo

$$K_{\alpha\beta} = \int dr_1 \int dr_2 |\phi_{\alpha(1)}|^2 |\phi_{\alpha(2)}|^2 V(1, 2) \quad (1.15)$$



e

$$J_{\alpha\beta} = \int dr_1 \int dr_2 \phi_{\alpha(1)}^* \phi_{\beta(2)}^* V(1,2) \phi_{\alpha(2)} \phi_{\beta(1)} \quad (1.16)$$

representa a diferença da energia entre os estado singleto e tripleto, ou seja,  $J_{12} = E_{\uparrow\downarrow}(S=0) - E_{\uparrow\uparrow}(S=1)$ , e é chamada de integral de troca.

Da equação (1.16) podemos substituir o valor do potencial  $V(1,2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}$ , e verificar que  $J_{\alpha\beta} \leq 0$ , o que indica que  $E_t < E_s$ . Assim, esta energia pode ser entendida como a quantidade de energia necessária para trocar os elétrons dos átomos.

Quando  $J_{12} > 0$ , o estado de menor energia é o tripleto, e assim prevalece a orientação dos spins paralelos (estado ferromagnético) e se  $J_{12} < 0$  o estado de menor energia é o singleto, prevalecendo a orientação anti-paralela (estado antiferromagnético). A energia de troca  $J_{12}$  tem a propriedade física de decrescer rapidamente com a distância entre os íons (exponencialmente), uma vez que a definição de  $J_{12}$  contém o produto das funções de onda dos elétrons de átomos diferentes, e dependerá assim do **overlap** das funções de onda envolvidas. Como o overlap varia exponencialmente com a distância, dizemos que a energia  $J_{12}$  é uma interação de curto alcance. Considerando as relações dos operadores de spin,  $\vec{S}^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$  e com base nas autofunções correspondentes as auto-energias  $E_t$  e  $E_s$ , Dirac [12] mostrou o seguinte Hamiltoniano efetivo de spins

$$\mathcal{H}_{12} = E_0 - \frac{J_{12}}{2}(1 + 4\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2) \quad (1.17)$$

que pode ainda ser generalizado para a rede cristalina de N spins localizados, e o Hamiltoniano de interação entre spins é escrito como

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (1.18)$$

onde  $\sum_{\langle i,j \rangle}$  denota uma somatória sobre todos os pares de spins  $i, j$  com interação  $J_{ij}$  de troca entre primeiros, segundos, terceiros,... vizinhos. e  $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$  é o

operador de spin no sítio  $i$ . Para os casos em que  $J_{ij} > 0$  e  $J_{ij} < 0$  temos o Hamiltoniano de Dirac-Heisenberg ferromagnético e antiferromagnético respectivamente.

O Hamiltoniano de Heisenberg na forma da Eq.(1.18) independe da orientação dos spin, e desta maneira é o mesmo em qualquer rotação de spins. No entanto, quando consideramos outros tipos de interação no modelo, como, por exemplo, spin-órbita, introduzimos anisotropia. O efeito da anisotropia no modelo de Heisenberg se manifesta através da dependência da energia de troca  $J$  com a direção. O modelo anisotrópico é escrito como

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta} J_{ij}^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_j^\beta, \quad (1.19)$$

onde a quantidade  $J_{ij}^{\alpha\beta}$  é a interação entre os sítio  $i$  e  $j$  associados as direções  $\alpha$   $\beta$  dos spins.

É importante notar que o Hamiltoniano generalizado Eq.(1.19) contém a parte simétrica do Hamiltoniano (1.18), caso em que  $\alpha = \beta$  e  $J_{ij}^\alpha = J_{ji}^\alpha$  e antissimétrica  $\alpha \neq \beta$  e  $J_{ij}^\alpha \neq J_{ji}^\alpha$ . Fisicamente, o termo antisimétrico surge em redes com baixa simetria e é o responsável por uma baixa magnetização em materiais antiferromagnético. Este resultado é conhecido como a interação de Dzyaloshinski- Moriya [13],[14]. A maioria dos materiais isolantes na natureza são antiferromagnéticos.

As autofunções do operador Hamiltoniano de Heisenberg são muito importantes para o estudo do magnetismo da matéria. Para o caso ferromagnético  $\mathcal{H}^F$ , a autofunção para o estado fundamental corresponde a todos os spins em paralelo estado (singleto), enquanto para o Heisenberg antiferromagnético  $\mathcal{H}^{AF}$  a autofunção não corresponde àquela que leve em conta todos os spins antiparalelos (estado de Néel). Isso ocorre porque o estado de Néel não é um auto-estado do Hamiltoniano. Na realidade, existem um quantidade muito grande de combinações cujo valor de  $S = 0$ , e que devem ser combinadas para gerar a autofunção do operador Heisenberg antiferromagnético.

Embora o estado de Néel não seja um auto-estado do Hamiltoniano  $\mathcal{H}^{AF}$ ,

nesta tese vamos utilizá-lo como tal. No fundo está consideração constitui uma primeira aproximação, necessária, pois até o presente momento não sabemos como é este estado.

O modelo de Heisenberg, Eq.(1.19), comporta ainda, dependendo da interação  $J_{ij}^{\alpha\beta}$ , alguns modelos de spins, a saber modelo de Ising, modelo  $XY$  e o modelo de Heisenberg isotrópico. Vejamos esses casos:

### 1.2.1 Modelo de Ising

Este modelo corresponde ao caso em que a interação  $J_{ij}^{\alpha}$  em uma das direções é mais forte que as outras direções. por exemplo a interação na direção de  $S^z$ . Se considerarmos que  $J_{ij}^z \gg J_{ij}^x$  e  $J_{ij}^y$  podemos desprezar as outras componentes para escrever o Hamiltoniano de Ising, dado por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^z S_i^z S_j^z \quad (1.20)$$

O modelo de Ising [15] descreve muito bem os materiais magnéticos que apresentam simetria axial, como, por exemplo, os compostos  $DyAlO_3$ ,  $DyPO_4$ ,  $FeCl_2$ ,  $FeBr_2$ ,  $Rb_2CoF_4$ .

Wilhelm Lenz propôs esse modelo como parte da tese de doutorado para o seu estudante Ernest Ising, em 1920. O modelo proposto por Wilhelm tinha como objetivo estudar as propriedades termodinâmicas de uma rede unidimensional. Para a frustração de Ising, com base nos cálculos das grandezas termodinâmicas, verificou-se a ausência de ordem de longo-alcance, sendo assim, Ising não obteve magnetização espontânea  $M(T, H = 0) = 0$ . Somente em 1936 Peierls apresentou estudos baseados em idéias fenomenológica provando que o modelo de Ising em duas dimensões apresenta ordem de longo-alcance para  $T < T_c$ . Este resultado trouxe de volta o interesse em estudar o modelo de Ising.

Em 1941, os físicos holandeses Kramers e Wannier conseguiram determinar de forma exata a temperatura crítica  $T_c$  do modelo de Ising numa rede quadrada.

Em 28 de Fevereiro de 1942, numa reunião da Academia de Ciências de Nova York, o químico norueguês- norte-americano Lars Onsager [16], obteve de forma exata a equação que expressa a dependência da magnetização espontânea com a temperatura, Fig(1.1), resolvendo o Modelo de Ising numa rede quadrada. Esse fato representou um marco significativo na história da mecânica estatística, em especial no estudo de fenômenos críticos e transições de fases. Para uma vasta aplicação do modelo de Ising em materiais reais, incluindo dinâmica, frustração, comportamento tricrítico, etc, ver trabalho de Wolf [17] comemorativo ao centenário do modelo de Ising, e também as diversas referências do vol.30 do Brazilian Journal of Physical.

### 1.2.2 Modelo XY

O modelo XY ou modelo planar, por si tratar de um modelo que está essencialmente em um plano, corresponde ao caso em que apenas uma das interações  $J_{ij}^\alpha$  pode ser desprezada, por exemplo, a interação entre as componentes z do operador de spins. Desta forma, se considerarmos que  $J_{ij}^z \ll J_{ij}^x$  e  $J_{ij}^y$  o Hamiltoniano para este modelo é escrito como

$$\mathcal{H}_{XY} = - \sum_{\langle i,j \rangle} (J_{ij}^x S_{ij}^x + J_{ij}^y S_{ij}^y) \quad (1.21)$$

Matsubara e Matsuda[18] foram os primeiros a introduzir o modelo planar na literatura. O modelo apresenta solução exata apenas para uma dimensão [19]. Esse modelo apresenta ainda a característica de não ter temperatura crítica diferente de zero em duas dimensões, ou seja, em outras palavras não possui magnetização espontânea.

A existência de ordem de longo-alcance está associada á magnetização espontânea não nula. Assim sendo, o composto ferromagnético tipo (Fe,Ni,Co) diremos que para  $T < T_c$  temos uma ordem de longo-alcance e  $T > T_c$  o sistema está desordenado (paramagnético) apresentando uma configuração de spins orientados em todas as direções aleatórias. O caso de simetria axial Ising, as orientações

possíveis aleatórias dos spins são restritas na direção  $z$ , enquanto que no modelo XY os spins estão restritos às suas posições no plano XY,  $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, 0)$ .

No caso do modelo Ising, a ordem de longo alcance é estabelecida em dimensão espacial  $d \geq 2$ , então dizemos que a dimensão crítica inferior (lower) para este modelo é  $d_l = 2$ . Por outro lado, no caso do modelo XY foi verificado que em duas dimensões não existe ordem de longo alcance em temperatura não nula, e dizemos que  $T_c = 0$ . Apesar de não existir ordem de longo-alcance, Kosterlitz e Thouless [20] perceberam que existe uma ordem topológica dos spins formando uma estrutura de vórtices abaixo da temperatura  $T_{KT}$ , onde a função de correlação decai segundo uma lei de potência da distância. Um vórtice (antivórtice) é uma excitação topológica na qual os spins em um caminho fechado ao redor do centro da excitação giram por  $2\pi(-2\pi)$  no mesmo sentido. Experimentalmente tem sido usado o modelo XY para descrever as propriedades magnéticas dos compostos  $3d$   $CoBr_2$  e  $CoCl_2$ , e um superfluido de  $H_e^4$ .

O modelo de Heisenberg isotrópico também não apresenta ordem de longo-alcance em duas dimensões, e é expressa matematicamente através do teorema de Mermin e Wagner [21], através da seguinte desigualdade:

$$|M(H, T)| \leq \begin{cases} \left[ \frac{\pi^2 \beta^2 W}{\tanh^{-1} \sqrt{\frac{\pi^2 s(s+1)W}{H|M(T, H)|}}} \right]^{\frac{1}{3}} s(s+1)H^{\frac{1}{3}}, d = 1 \\ \left[ \frac{4\pi\beta W}{\log(1 + \frac{\pi^2 s(s+1)W}{H|T, M|})} \right]^{\frac{1}{2}} s(s+1), d = 2 \end{cases} \quad (1.22)$$

onde  $W = \sum_{\vec{r}, \vec{r}'} |\vec{r} - \vec{r}'|^2 |J(\vec{r} - \vec{r}')| < \infty$ ,  $s$  é a magnitude de spin,  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  e  $H$  o campo externo. No limite de campo nulo, das desigualdades acima, obtemos  $M(T, 0) = 0$  para  $T > 0$ . O teorema de Mermin e Wagner é aplicado para interações  $J(\vec{r} - \vec{r}')$  variando entre os primeiros vizinhos ou decaindo exponencialmente, tipo  $J(r) \approx e^{-\alpha r}$ , desta maneira  $W < \infty$ . Este teorema tem sido generalizado por Bruno [22] para incluir interação de longo-alcance do tipo  $J(r) \approx \frac{J_e}{r^p}$ . Bruno concluiu que para  $T > 0$  o modelo de Heisenberg apresenta ordem magnética em  $d = 1$  quando  $p > 1$ ,  $d = 2$  quando  $p > \frac{5}{2}$ .

## 1.3 Aspectos da Teoria de Fenômenos Críticos e Transições de Fase

A partir da década de 60, começaram a surgir na literatura alguns trabalhos que introduziram as idéias básicas sobre classes de universalidade, invariância de escala e criticalidade para as funções termodinâmicas. Estas definições surgiram no contexto da teoria de fenômenos críticos. A teoria de fenômenos críticos foi desenvolvida para tratar fenômenos que ocorrem geralmente em sistemas que se encontram fora do equilíbrio. Geralmente, esses fenômenos ocorrem em processos nos quais a história é importante. Diversas grandezas termodinâmicas, tais como calor específico e susceptibilidade magnética, apresentam comportamento singular na região crítica, ou em outras palavras, regiões onde próximas a transições de fase. Nestas regiões, as grandezas termodinâmicas acima exibem divergências (descontinuidades) assintóticas caracterizadas por *expoentes críticos*. Em termodinâmica, transição de fase ou mudança de fase é a transformação de um sistema termodinâmico de uma fase para outra.

As transições de fase são classificadas através das descontinuidades das derivadas parciais da energia livre  $g(T, H)$ . Denota-se uma transição de fase de primeira ordem, àquela que está vinculada a uma descontinuidade na primeira derivada da energia livre. Este tipo de transição está associada as grandezas termodinâmicas como magnetização e/ou entropia  $M = -\frac{\partial g}{\partial H}$  ou  $S = -\frac{\partial g}{\partial T}$ .

Existem ainda as transições de segunda ordem, ou ditas contínuas, vinculadas à descontinuidade da segunda derivada da energia livre, ou seja, ao calor específico e/ou susceptibilidade, respectivamente  $\chi = -\frac{\partial^2 g}{\partial H^2}$ ,  $C_H = -\frac{\partial^2 g}{\partial T^2}$ . Algumas grandezas termodinâmicas, como o caso da susceptibilidade, pode eventualmente sofrer divergência na temperatura crítica  $T_c$  mesmo passando por uma transições de primeira ordem, contrastando com o fato de que em transições de segunda ordem a magnetização espontânea vai a zero continuamente quando  $T = T_c$ . Além da magnetização, outras grandezas podem apresentar singularidades no ponto crítico  $T_c$ .

Vale apenas salientar que denominamos de ponto crítico, aquele que indica o término de uma linha de transição de segunda ordem, enquanto os pontos que indicam o término de linhas de primeira ordem são classificados como pontos de transição. À medida que  $T \rightarrow T_c$ , o sistema começa a se ajustar sobre uma escala microscópica. Estes ajustes são identificados e relacionados sob a forma de flutuações térmicas que se tornam muito grandes nas vizinhanças desses pontos. Por exemplo, a susceptibilidade está associada às flutuações da magnetização, o calor específico à flutuação da energia interna do sistema.

### 1.3.1 Expoentes Críticos e a Hipótese da Universalidade

Para caracterizar uma transição de fase é necessário observar a existência de singularidades nos potenciais termodinâmicos e em suas derivadas. Uma das maneiras de verificar se o sistema sofreu uma transição de fase ou não, é analisando o *parâmetro de ordem*. Esta grandeza é definida de modo que a partir da transição de fase contínua, o parâmetro se torna nulo. Por exemplo, para um sistema antiferromagnético, o parâmetro de ordem é a diferença das magnetizações das subredes A e B,  $m_S = \frac{m_A - m_B}{2}$ .

Na seção anterior, destacamos que diversas grandezas termodinâmicas, tais como calor específico, compressibilidade e susceptibilidade magnética, podem apresentar comportamento singular na região crítica (próxima a transição de fase). Esse comportamento singular é verificado por meio de divergências assintóticas caracterizadas por *expoentes críticos*. O comportamento das grandezas termodinâmicas próximas a um ponto crítico apresenta caráter universal. É interessante também notar que a teoria das perturbações, geralmente útil na análise de problemas de muitos corpos, não funciona na vizinhança dos pontos críticos. Fora da criticalidade, um sistema contendo muitos corpos apresenta correlações de curto alcance, com decaimento exponencial. Na criticalidade, no entanto, as correlações decaem lentamente, sem escala característica, temporal ou espacial. A universalidade

e o caráter peculiar da criticalidade são fatos bem conhecidos da física há mais de um século, apesar de que somente as teorias mais recentes fornecem, em geral, valores corretos para os expoentes críticos. Em um estado crítico, não há razão para buscar causas específicas para grandes eventos. Pequenas forças podem ter efeitos enormes e até mesmo eventos raros, inesperados, podem se manifestar. A frequência de tais eventos raros pode ser estimada, mas não a sua intensidade ou a data de sua ocorrência [23]. Um exemplo é o comportamento anômalo das derivadas termodinâmicas. As flutuações no estado crítico não podem ser consideradas genuinamente aleatórias, e nem previsíveis. É muito importante e motivador entender os estados críticos (expoentes críticos) de um sistema que pertencente a uma determinada classe de fenômenos, uma vez que sua compreensão nos leva ao entedimento de todos os demais sistemas que pertençam a essa classe. Com base em todos esses argumentos, a seguir apresentaremos alguns comportamentos assintóticos de grandezas relacionadas a sistemas magnéticos, bem como os expoentes críticos. Para um sistema geral que passe por uma transição de fase de segunda ordem, nas vizinhanças do ponto crítico ( $H = 0, T = T_c$ ), os comportamentos assintóticos das grandezas termodinâmicas são:

### 1. Magnetização

$$M(T, H) \approx -\frac{\partial g}{\partial H} \begin{cases} (-t)^\beta, & (t \rightarrow 0^-, H = 0) \\ H^{\frac{1}{\delta}}, & (H \rightarrow 0^+, t = 0), \end{cases} \quad (1.23)$$

onde  $t = (T - T_c)/T_c$  e  $g(t, H)$  é a energia livre de Gibbs. A relação acima indica que  $M(T, H)$  é a grandeza canonicamente conjugada ao campo  $H$ , assim sendo, para o antiferromagnético  $m_s$  está conjugada com o campo **staggered**  $H_s$

### 2. Susceptibilidade

$$\chi_o(t) = -\left(\frac{\partial^2 g}{\partial H^2}\right)_{H=0} \approx |t|^{-\gamma} \quad (1.24)$$



### 3. Calor específico

$$C_o(t) = -T \left( \frac{\partial^2 g}{\partial T^2} \right)_{H=0} \approx |t|^{-\alpha} \quad (1.25)$$

### 4. Função de Correlação

$$G_c = \langle \sigma(\vec{0}) \cdot \sigma(\vec{r}) \rangle - \langle \sigma(\vec{0}) \rangle \cdot \langle \sigma(\vec{r}) \rangle \approx \frac{e^{-\frac{r}{\xi}}}{r^{d-2+\eta}}, \quad (1.26)$$

onde  $\xi \approx |t|^{-\nu}$  é o comprimento de correlação que mede o tamanho médio dos aglomerados correlacionados.

Fisicamente, podemos compreender a transição de fase contínua no ferromagneto analisando a competição entre a energia de troca  $J$  que tende a orientar os spins paralelamente, e a energia térmica  $k_B T$ , que desestabiliza a ordem magnética, orientando os spins em ordem aleatórias. Na região de altas temperaturas  $k_B T \gg J$ , o sistema se comporta como se não existisse a interação entre os momentos magnéticos, de tal modo que a ordem de longo-alcance é nula ( $m = 0$ ). Por outro lado, na região de baixas temperatura,  $k_B T \ll J$ , a energia de troca  $J$  é predominante fazendo que os momentos magnéticos apontem em média ao longo de uma direção do espaço (eixo de fácil magnetização). Por conseguinte, a magnetização é não nula na região de baixas temperaturas. Para  $k_B T \approx J$ , os momentos magnéticos estão correlacionados sofrendo flutuações cada vez maiores a medida que a temperatura se aproxima do valor crítico  $T_c$ . Definimos o comprimento de correlação  $\xi$  como sendo uma medida média característica do tamanho de aglomerados correlacionados. No limite crítico  $T = T_c$  observamos que, devido as fortes flutuações  $\xi(T = T_c) \rightarrow \infty$ , todos os momentos magnéticos da rede se correlacionam, e o sistema sofre uma transição de fase. A divergência do comprimento de correlação  $\xi$  explica o aparecimento do fenômeno da opalescência crítica nos fluidos no ponto crítico  $(V_c, P_c, T_c)$ .

Do ponto de vista experimental, a determinação dos expoentes críticos ( $\beta, \delta, \gamma, \alpha, \eta, \nu$ ) dependem da escolha do intervalo para a variável  $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ . Nessa região  $t \ll 1$ , o expoente crítico de uma dada grandeza termodinâmica  $\Psi \approx |t|^\Theta$ , onde  $\Theta$  é o expoente crítico desta grandeza, é obtido através da inclinação da curva  $\ln \Psi$  versus

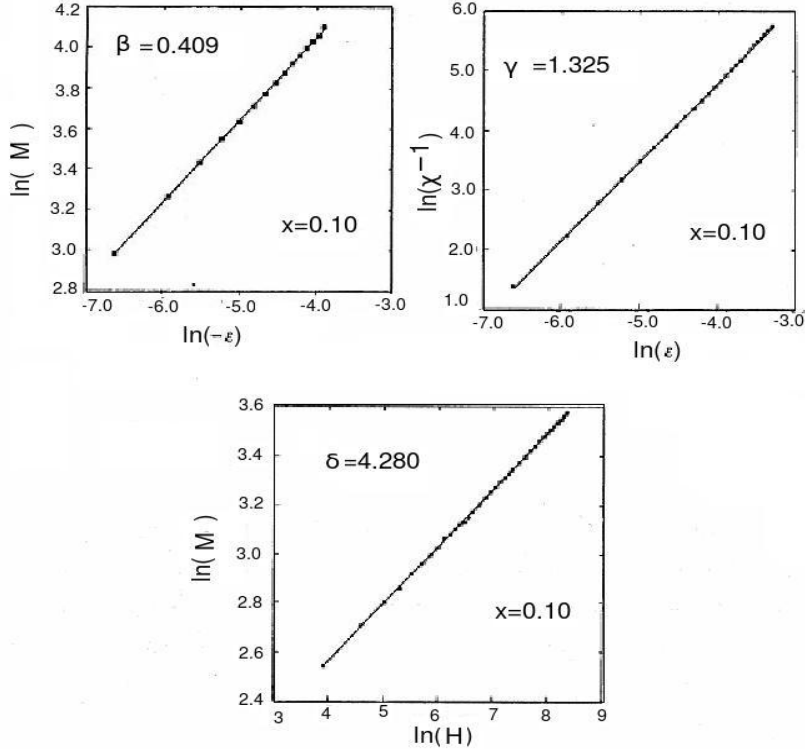


Figura 1.6: Comportamento assintótico  $\ln(M)$  versus  $\ln(-\epsilon)$ ,  $\ln(\chi^{-1})$  versus  $\ln(\epsilon)$  e  $\ln(M)$  versus  $\ln(H)$  para uma liga metálica  $Fe_{1-x}Al_x$  com concentração  $x = 0.10$  [24]

$\ln(t)$ . Teoricamente o problema é simples, uma vez que  $\Theta = \pm \lim_{t \rightarrow 0} \left[ \ln \frac{|\Psi|}{\ln|t|} \right]$ . Para os valores físicos experimentais, o primeiro problema é identificar a região crítica, ou seja, o quanto  $t$  é pequeno, na região onde temos fortes flutuações térmicas. Para sistemas magnéticos escolhe-se  $|t| \approx 10^{-3}$ , enquanto que para supercondutores  $|t| \approx 10^{-10}$ , transição lambda  $H_e^4$   $|t| \approx 10^{-7}$ , e assim por diante. Esta escolha da região crítica é feita baseada no fato de que a medida do expoente crítico não é afetada por esta escolha.

Na Fig.(1.6), apresentamos os comportamentos assintóticos das grandezas termodinâmica, magnetização espontânea e susceptibilidade magnética, e de seus expoentes críticos  $\beta = 0.409$ ,  $\delta = 4.280$  e  $\gamma = 1.325$  da liga metálica  $Fe_{1-x}Al_x$  obtidos

experimentalmente por Salazar [24] para a concentração  $x = 0.10$ , notando-se ainda que eles pouco variam com a concentração. Com este indício pode-se concluir que esta liga é descrita por um Hamiltoniano tipo Heisenberg.

No caso do calor específico, Eq.(1.25), podemos ter uma singularidade logarítmica e  $\alpha = 0$  (log), como ocorre com o modelo de Ising 2d (solução exata) :  $C_o \approx 0.4945 \ln |t|$ . Este modelo na ausência de campo magnético ( $H=0$ ) apresenta solução exata, onde temos os seguintes expoentes críticos :  $\beta = 1/8$ ,  $\gamma = 7/4$ ,  $\delta = 15$ ,  $\alpha = 0$  (log),  $\nu = 1$ ,  $\eta = 1/4$ .

No caso do modelo de Ising 3d, o comportamento crítico das grandezas termodinâmicas é conhecido com alta precisão através de técnicas de grupo de renormalização [25] e simulação de Monte Carlo [26].

Recentemente, a criticalidade do modelo de Ising numa rede ortorrômbica foi estudada de forma exata por Zhang [27] que obteve :  $\beta = 3/8$ ,  $\gamma = 5/4$ ,  $\delta = 13/3$ ,  $\alpha = 0$  (log),  $\nu = 2/3$ ,  $\eta = 1/8$ . O valor exato do expoente  $\gamma = 5/4 = 1.25$  está no intervalo dos valores obtidos numericamente entre 1.244 e 1.250, com um erro da ordem de 0.48%. Os expoentes críticos  $\alpha = 1/8$ ,  $\beta = 5/16$ ,  $\gamma = 5/4$ ,  $\delta = 5$ ,  $\nu = 5/8$  e  $\eta = 0$  sugeridos por Fisher [28] e Domb [29], foram estabelecidos como base em uma conjectura dos resultados de expansão em séries, esses expoentes forão bem aceitos pela comunidade científica por mais de quarenta anos. No entanto, esses resultados apresentam discrepâncias com os resultados numéricos, por exemplo,  $\eta \approx 1/8$  que difere do valor  $\eta = 0$  conjecturado por Fisher e Domb. Valores precisos de simulação de Monte Carlo [26] estimaram:  $\beta = 0.3265(3)$ ,  $\gamma = 1.2372(5)$ ,  $\delta = 4.789(2)$ ,  $\alpha = 0.110(1)$ ,  $\nu = 0.6301(4)$ ,  $\eta = 0.0364(5)$ , o que mostra a conjectura de Zhang [27] ser mesmo a solução exata.

Na Tabela (1.1) apresentamos, resumidamente, os valores dos expoentes críticos (teóricos e experimentais) de modelos teóricos que apresentam transição de fase de segunda ordem. Os resultados dos expoentes obtidos via aproximação de campo médio são universais e independem da dimensão e simetria do Hamiltoniano. Este resultado teorico pode ser visto da seguinte forma: Para a simetria Ising os expo-

<b>Resultados teóricos</b>						
Modelo	$\beta$	$\gamma$	$\delta$	$\alpha$	$\nu$	$\eta$
Ising 2d	$\frac{1}{8}$	$\frac{7}{4}$	15	0	1	$\frac{1}{4}$
Ising 3d	$\frac{3}{8}$	$\frac{5}{4}$	$\frac{13}{3}$	0	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{8}$
XY 3d	0.34	1.30	4.8	0.01	0.66	0.04
Heisenberg 3d	0.36	1.39	4.8	-0.012	0.71	0.04
Campo médio	$\frac{1}{2}$	1	3	0	$\frac{1}{2}$	0
<b>Resultados experimentais</b>						
Materiais	$\beta$	$\gamma$	$\delta$	$\alpha$	$\nu$	$\eta$
Fe	0.39	1.33	4.35	-0.11	—	—
Co	0.44	1.23	3.35	-0.095	—	—
Ni	0.38	1.31	4.48	0.10	—	—
$H^4e$	0.36	1.24	4.44	-	—	—
$Fe_{0.8}Al_{0.2}$	0.42	1.35	4.26	-0.20	—	—
$Gd_{0.67}Co_{0.33}$	0.41	1.16	3.60	0.02	—	—
$Gd_{0.8}Co_{0.2}$	0.44	1.29	3.96	-0.17	—	—

Tabela 1.1: Valores teóricos e experimentais dos expoentes críticos [2]

entes críticos apresentam distinções para dimensões diferentes ( $2d$  e  $3d$ ). Porém, quando se usa topologias diferentes numa mesma dimensão, os expoentes críticos ficam invariantes, ou seja, são os mesmos. Os expoentes críticos do modelo de Ising  $3d$  numa rede cúbica simples e numa rede cúbica de corpo centrado são os mesmos, pois trata-se do uso de topologias diferentes numa mesma dimensão. Outro resultado teórico, interessante observado na Tabela (1.1), está relacionado com as universalidades dos expoentes  $\delta$  e  $\eta$  para os três modelos exibidos. Os expoentes críticos mostrados na tabela (1.1) são independentes entre si, e satisfazem as igualdades das relações abaixo.

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha + 2\beta + \gamma = 2 \\ \alpha + \beta(\delta + 1) = 2 \\ \gamma = \beta(\delta - 1)\nu d = 2 - \alpha \\ (2 - \eta)\nu = \gamma \end{array} \right. \quad (1.27)$$

A aproximação de campo médio despreza as flutuações térmicas, que são relevantes na criticalidade, e foi argumentado por Ginzburg [30] (critério Ginzburg) que para  $d \geq 4$  os expoentes críticos são universais, independem da simetria do Hamiltoniano e assim os expoentes críticos de campo médio são considerados exatos. Esses expoentes críticos pertencem ainda uma classe de universalidade que é caracterizada pelos critérios abaixo:

1. Dependência do número de componentes do Hamiltoniano (simetria), por exemplo, para os modelos Ising,  $XY$  e Heisenberg são caracterizados por  $n = 1$ ,  $n = 2$ ,  $n = 3$ , respectivamente, onde esses números de componentes do Hamiltoniano representa também o número de componentes do parâmetro de ordem;
2. Dependência da dimensão espacial ( $d$ ) do sistema, porém não depende da topologia da rede;

3. Alcance das interações. Para sistemas com interações de longo-alcance os expoentes críticos são universais e equivalentes aos de campo médio.

A priori, os expoentes críticos para valores definidos de  $d$  e  $n$ , bem como o alcance das interações, são independentes dos detalhes microscópicos do Hamiltoniano. Pode-se verificar isso através dos expoentes críticos do modelo de Ising numa rede quadrada anisotrópica. Esses expoentes apresentam expoentes críticos independentes dos valores de  $J_x$  (interação entre primeiros vizinhos ao longo eixo-x) e  $J_y$  (interação entre primeiros vizinhos ao longo do eixo-y) Salazar [16].

As propriedades críticas associadas com classe de universalidade do modelo com  $n$ -componentes têm sido exaustivamente bem efetuadas e estabelecidas com certa precisão as grandezas críticas associadas. Do ponto de vista do grupo de renormalização, as criticalidades são governadas pelos chamados pontos fixos  $O(n)$  de Wilson-Fisher. Por outro lado, existem certas classes de magnetos exibindo transições de fase que apresentam classes de universalidade diferente do modelo  $O(n)$ . Um exemplo desta quebra de universalidade são os magnetos aleatórios com presença de frustração, os vidros de spin. Um exemplo de modelo exatamente solúvel é o modelo de oito vértices [31], que viola os critérios da universalidade. Este modelo tem uma linha crítica no diagrama de fase, definido pelo parâmetro  $\mu$  do modelo, no qual os expoentes críticos variam continuamente, ou seja,  $\alpha = 2 - \frac{2\pi}{\mu}$ ,  $\beta = \frac{\pi}{16\mu}$  e  $\nu = \frac{\pi}{2\mu}$ , mas satisfazem as relações de escala.

A natureza das transições de fases dos magnetos frustrados é diferente das transições de fase dos magnetos convencionais não frustrados, guiados pelos pontos fixos  $O(n)$ . Frustração pode ser introduzida através da geometria da rede ou por presença de competição de interações. O exemplo tradicional de frustração geométrica é um antiferromagneto numa rede triangular (2d) ou numa rede triangular empilhada (3d), que consiste em planos de redes triangulares empilhados ao longo de uma direção ortogonal. O último tipo de frustração pode ser realizado em helimagnetos, onde uma ordem espiral é formada ao longo de uma certa direção da rede.

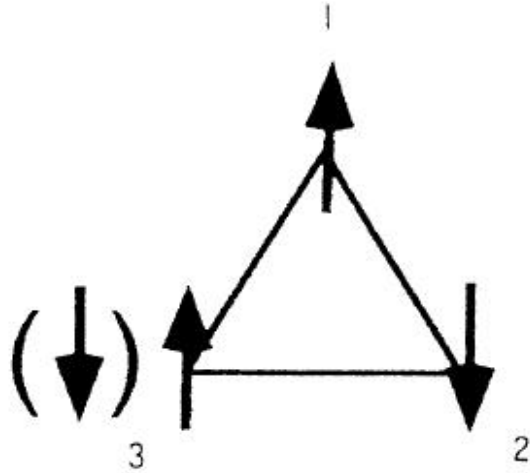


Figura 1.7: O estado fundamental de uma célula unitária de uma rede triangular do modelo de Ising-1/2 antiferromagnético.

A configuração do estado fundamental depende fortemente do tipo de simetria dos spins ou número de componentes do spin ( $n$ ). No caso do modelo de Ising ( $n=1$ ), o estado fundamental é infinitamente degenerado e está ilustrado na figura (1.7).

Por outro lado, quando o spin tem simetria contínua como nos casos dos vetores de spin com duas componentes-modelo XY ( $n = 2$ ) e três componentes-modelo Heisenberg ( $n = 3$ ), o estado fundamental das configurações dos spins são não-colinear (*canted* ou **inclinados**), como ilustrado na Fig. (1.8). Uma interessante consequência da estrutura dos spins *inclinados ou oblíquo* é a aparência de um grau de liberdade “chiral”. Consideremos, por exemplo, o caso de spins XY ( $n=2$ ) como mostrados na Fig.(1.8). Se as interações de *troca* são iguais em magnitudes nas três ligações, o estado fundamental das configurações dos spins é denominado de “estruturas de spins 120°”, no qual três spins XY formam um ângulo de 120° entre primeiros vizinhos. Como mostrado na figura (1.8), o estado fundamental é duplamente degenerado de acordo com a estrutura de spin não-colinear ser para direita (+) ou para esquerda (−) (degenerescência chiral). Um dado estado chiral não pode ser transformado no estado com ordem chiral oposta, via alguma rotação de spin

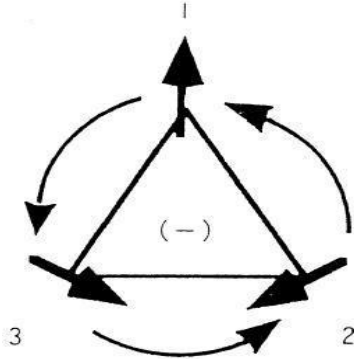


Figura 1.8: Estado fundamental de uma célula unitária de uma rede triangular do modelo XY antiferromagnético (vórtices).

global no espaço de spin XY ou reflexão de spin global.

Para caracterizar os dois estados chiral na figura (1.8), é conveniente introduzir uma quantidade escalar, chiralidade, definida por [32]:

$$K_p = \frac{2}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle i,j \rangle}^p (\vec{S}_i \times \vec{S}_j) = \frac{2}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle i,j \rangle}^p (S_i^X S_j^Y - S_i^Y S_j^X), \quad (1.28)$$

onde a soma é feita sobre três ligações diretas de uma plaqueta (triângulo). Na figura (1.8) temos  $K_p = \pm 1$  para as duas configurações de spins.

Historicamente, os estudos das propriedades críticas de magnetos não-colineares teve início a 30 anos atrás com os helimagnetos de Terras-Raras *Ho*, *Dy* e *Tb* [33]. Bak e Mukamel derivaram um Hamiltoniano efetivo, chamado de Hamiltoniano Landau-Ginzburg-Wilson (LGW), para o modelo XY ( $n = 2$ ) no estado helimagnético e efetuaram um grupo de renormalização numa expansão  $\varepsilon = 4 - d$ . Eles encontraram um ponto fixo tipo  $O(4)$  com expoentes críticos  $\alpha \approx -0.17$ ,  $\beta \approx 0.39$ ,  $\gamma \approx 1.39$  e  $\nu \approx 0.70$ . Resultados experimentais nos helimagnetos *Ho*, *Dy* e *Tb* dão algumas vezes resultados inconclusivos. Experimentos de espalhamentos de nêutrons [34] para *Ho* mostram o comportamento crítico do modelo  $O(4)$ , enquanto outros experimentos, tais como, medida do calor específico para *Dy* [35], medidas de Mössbauer para *Dy* [36] e difração de nêutrons para TB [37], encontraram expoentes



críticos diferentes dos valores do modelo  $O(4)$ .

Na década de oitenta, o primeiro estudo teórico das propriedades críticas de antiferromagnetos numa rede triangular empilhada foi feita por Kawamura, para os casos dos spins  $XY$  [38, 39, 40] e Heisenberg [3]. Por meio de simulação de Monte Carlo [38], mostrou que devido os graus de liberdade chiral, a transição de fase destes antiferromagnetos triangular empilhados, apresenta uma nova classe de universalidade, chamada de classe de universalidade chiral, diferentemente do ponto fixo  $O(4)$  dado pela classe de universalidade Wilson-Fisher.

Os valores dos expoentes críticos estimados pela simulação de Monte Carlo [38] foram  $\alpha = 0.34 \pm 0.06$ ,  $\beta = 0.253 \pm 0.01$ ,  $\gamma = 1.13 \pm 0.05$  e  $\nu = 0.54 \pm 0.02$  para o caso  $XY$ , e  $\alpha = 0.24 \pm 0.08$ ,  $\beta = 0.30 \pm 0.02$ ,  $\gamma = 1.17 \pm 0.07$  e  $\nu = 0.59 \pm 0.02$  para o caso Heisenberg. dessa forma foi previsto que para antiferromagneto  $XY$  triangular empilhado  $CsMnBr_3$  (classe de universalidade chiral  $n = 2$ ) [38] e para o antiferromagneto Heisenberg triangular empilhado  $VCl_2$  e  $VBr_2$  (classe de universalidade chiral é  $n = 3$ ) [38], enquanto que para os helimagnetos de Terra-Rara  $Ho$ ,  $Dy$  e  $Tb$  argumentou-se que estes materiais exibem uma nova classe de universalidade chiral  $n = 2$ . Estes resultados mostram que sistemas frustrados violam o critério de universalidade estabelecido nos anos 70, e dão origem a uma nova classe de universalidade característica para cada sistema.

## 1.4 Apresentação da Tese

Nesta dissertação de mestrado vamos apresentar alguns resultados obtidos do ponto de vista teórico que visam contribuir para o estudo do diagrama de fase quântico ( $T = 0$ ) do modelo  $J_1 - J'_1 - J_2$  (interação entre primeiros e segundos vizinhos). Inicialmente, no capítulo 2 apresentaremos a teoria de campo efetivo com base nas aplicações no modelo de Ising e Heisenberg em aglomerados finitos. A teoria de campo efetivo via a técnica do operador diferencial é importante para o tratamento estatístico de problemas de muitos corpos em interação. No capítulo 3,

introduziremos a idéia de frustração magnética que será discutida a priori no modelo  $J_1 - J_2$ . Os primeiros resultados na literatura serão discutidos, em particular, o obtido pela técnica do operador diferencial. Devido a distorção da rede cristalina, uma inequivalência das interações deve ser introduzida.

Motivado por este aspecto estrutural, generalizaremos o modelo  $J_1 - J_2$  considerando ligações  $J_1$  e  $J_1'$  ao longo das direções  $x$  e  $y$  respectivamente. Definindo os parâmetros  $\lambda = \frac{J_1'}{J_1}$  e  $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$ , obteremos o diagrama de fase no plano  $(\alpha, \lambda)$  para o caso  $J_1 > 0$ . Finalmente, no capítulo 4 apresentamos as conclusões e perspectivas futuras.

# Referências Bibliográficas

- [1] P. Weiss, J. Phys. Radium, **4**, 661 (1907).
- [2] J. Robert Viana, Tese de Doutorado, DF-UFAM-2007. Transição de fase quântica e modelos de spins frustrados
- [3] W. Heisenberg, Z. Phys. **49**, 619(1928)
- [4] L. Néel Ann. Physique **18**, 5(1932)
- [5] Department of physics and astronomy, Universit of British Columbia, Research interests. Disponível em: [www.physics.ubc.ca/~berciu/RESEARCH/](http://www.physics.ubc.ca/~berciu/RESEARCH/). Acesso em 09/10/2009
- [6] P. Chandra e B. Doucot, Phys. Rev. B **38**, 9335 (1988); E. Dagotto e A. Moreo, Phys. Rev. Lett. **63**, 2148 (1989).
- [7] S. Sachdev, Quantum phase transitions (Cambridge University Press, Cambridge, 1999); *ibid* in Quantum Magnetism, Lectures Notes in Physics, Vol. **645**, edited by U. Schollwock, J. Richter, D. J. J. Farnell e R. F. Bishop (Springer, Berlin, 2004).
- [8] B. S. Shastry e B. S. Sutherland, Physica B **108**, 1069 (1981).
- [9] R. Melzi, et al. Phys. Rev. Lett. **85**, 1318 (2000)
- [10] G. Toulouse, Commum. Phys. **2**, 115 (1977).

- [11] E. Pavarani, S.C.Tarantino, T.Boffa Ballaram, M. Zema, P. Ghigma e P. Carretta, Phys. Rev. B **77**, 014425(2008)
- [12] P. A. M. Dirac, The Principles of quantum mechanics (1958).
- [13] I. E. Dzyoloshinski, J. Phys. Chem. Solids, **4**, 241 (1958).
- [14] T. Moriya, Magnetism vol **1** - Ed. G. T. Rado e H. Suhl (1963).
- [15] E. Ising, Z. Physik **31**, 253 (1925)
- [16] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [17] W. P. Wolf, The Ising Model and Real Magnetic Materils, Braz. J. Phys. **30**, 794 (2000).
- [18] T. Matsubara e H. Matsuda, Progr. Theor. Phys. **16**, 416 (1956).
- [19] E. H. Lieb, Phys. Rev. Lett. **18**, 1046 (1967).
- [20] J.M. Kostelitz e D.J. Thouless, J.Phys. C **6**,1181 (1973)
- [21] N.O. Mermim e H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133(1966).Errata em Phys. Rev. Lett. **17**,1307(1966)
- [22] P. Bruno, Phys. Rev. Lett. **87**, 1372031 (2001)
- [23] I. Gleria, R. Matsushita e S. D. SILVA, Rev. Bras. Ensino Fís. vol.**26** (2005)
- [24] N. M. Salazar, Propriedades magnéticas intrínsecas e comportamento crítico da liga metálica  $Fe_{1-x}Al_x$  , dissertação de mestrado, UFPE (1994).
- [25] K.G. Wilson e J. Kogut, Phys. Rep. **12**,75 (1975)
- [26] A. Pelissetto e E. Vicari, Phys. Rep. **368**, 549 (2002)
- [27] Z. D. Zhang, Phil. Magazine **87**, 5309 (2007)

- [28] M. E. Fisher, Rep. Prog. Phys. **30**, 615 (1967)
- [29] C. Domb, In Phase Transitions and Critical Phenomena, editado por C. Domb e M. S. Green, Vol. **3**. (Academic Press, London, 1974)
- [30] V. L. Ginzburg, Sov. Phys. Sol. State **2**,1824 (1960)
- [31] R. J. Baxter, Exactly, Solved Models in Statistical Mechanics (Academic Press, New York, 1982)
- [32] S. Miyashita e H. Shiba, J. Phys. Soc. Jpn. **53**, 1145 (1985)
- [33] P. Bak e D. Mukamel, Phys. Rev. B **13**, 5086 (1976)
- [34] J. Eckert e G. Shirane, Sol. St. comm. **19**, 911 (1976)
- [35] E. L. Elederman e M. B. Salamom, Sol. St. comm. **15**, 1376 (1974)
- [36] E. Loh, C. L. Chien e J. C. Walker, Phy. Lett. A **49**, 357 (1974)
- [37] O. W. Dietrich e J. Als-Nielsen, Phys. Rev. **162**, 315 (1967)
- [38] H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. **54**, 3220 (1985)
- [39] H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 2095 (1986)
- [40] H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 1299 (1992)

# Capítulo 2

## Teoria de Campo efetivo

### 2.1 Introdução

O modelo de Heisenberg tem sido muito aplicado no estudo de ligas metálicas que dão origem a compostos supercondutores. A principal motivação surgiu do fato de que existe uma conexão entre as flutuações antiferromagnéticas nos planos de  $CuO_2$  e os novos supercondutores de altas temperaturas, como o caso do  $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ . Para estudar o modelo de Heisenberg inevitavelmente nos deparamos com um problema de muitos corpos em interação, mas precisamente no total de  $N \approx 10^{23}$  partículas em interações. Seja qual for a técnica empregada, um problema com graus de liberdade da ordem do número de Avogrado não tem solução exata.

Em problemas de muitos corpos, o mais importante é saber quais são os estados acessíveis das partículas, sem se preocupar com o que acontece com uma partícula em especial, ou seja, o problema deve ser tratado considerando as propriedades comuns ao conjunto de partículas interagentes. Frequentemente na resolução desses tipo de problemas nos deparamos com sistemas de infinitas equações acopladas. Para contornar esta dificuldade existem na literatura vários desenvolvimentos de técnicas aproximativas que visam desacoplar as equações. Dependendo do sistema físico, algumas técnicas aproximativas permitem encontrar soluções satisfatórias

(qualitativas). Um grande exemplo é a teoria BCS (conferindo prêmio Nobel de 1962 aos físicos John Bardeen, Leon Cooper e Robert Schrieffer) que carrega na sua solução a aproximação de campo médio. Em Mecânica Estatística, as propriedades termodinâmicas relevantes nos sistemas quânticos são obtidas mediante a função de partição  $Z = \text{Tr} e^{-\beta H}$ , onde o traço da exponencial de  $-\beta H$  é fundamentalmente uma soma sobre todos os estados acessíveis ao sistema. Alguns poucos modelos apresentam solução analítica, como o caso do modelo de Ising em uma e duas dimensões e na ausência de campo externo, por exemplo, a solução para o modelo de Ising-1/2 bidimensional à campo nulo, obtida por Onsager em 1944[1]

Os métodos computacionais como Monte Carlo, diagonalização exata e expansão em série fornecem resultados ditos como exatos. Porém, esses métodos estão restritos a sistemas simples, sendo de difícil aplicação em problemas complexos, como o caso de sistemas frustrados. Neste trabalho não aplicaremos os métodos computacionais mencionados acima, ao invés disso utilizaremos a teoria de campo efetivo via técnica do operador diferencial que foi desenvolvida por Honmura e Kaneyoshi em 1979[2]

## 2.2 Média Estatística em aglomerados finitos

A mecânica estatística de equilíbrio se baseia no cálculo da média dos observáveis em um ensemble conveniente. Por exemplo, no ensemble canônico a média de um operador  $\mathcal{A}$  é definida como [3]

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \frac{\text{Tr}[\mathcal{A} e^{-\beta \mathcal{H}}]}{Z}, \quad (2.1)$$

onde  $Z = \text{Tr}[e^{-\beta \mathcal{H}}]$  é a função de partição,  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ , sendo  $\mathcal{H}$  o Hamiltoniano do sistema em estudo. O símbolo  $\text{Tr}$  significa o traço da matriz.

Vamos considerar o Hamiltoniano de um sistema qualquer, compostos por  $N$  partículas interagentes através do spin e por meio da interação  $J_{ij}$ , divididas em duas partes. A primeira parte é representada pelo símbolo  $\Omega$  (Aglomerado ou Cluster), enquanto a segunda será representada por  $\Omega'$  (Vizinhança), como ilustra a

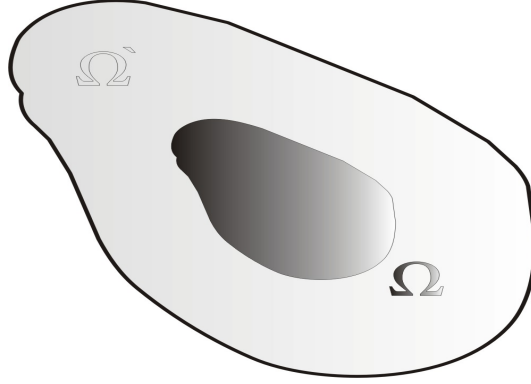


Figura 2.1: Aglomerado  $\Omega$  e vizinhança  $\Omega'$

Figura(2.1). Consideremos agora que a parte  $\Omega$  contém  $n < N$  partículas, enquanto  $\Omega'$  contém o resto  $n' = N - n$ .

A fim de estendermos a média dada pela Eq.(2.1) para aglomerados finitos, devemos notar que o Hamiltoniano do sistema pode ser decomposto pela soma dos Hamiltonianos das duas partes envolvidas, ou seja,

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

Seja  $O(\Omega)$  um observável dependente das variáveis de spin que estão contidas no aglomerado  $\Omega$ , a sua média no ensemble canônico é obtida mediante a Eq(2.1), ou seja,

$$\langle O(\Omega) \rangle = \frac{\text{Tr}[O(\Omega)e^{-\beta(\mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}_{\Omega'})}]}{\text{Tr}e^{-\beta(\mathcal{H}_\Omega + \mathcal{H}_{\Omega'})}}. \quad (2.3)$$

Para o caso em que  $[\mathcal{H}_\Omega, \mathcal{H}_{\Omega'}] = 0$ , vale a igualdade  $e^{-\beta\mathcal{H}} = e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega}e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega'}}$ . Neste caso, o traço presente na Eq.(2.3) poderá ser realizado primeiramente sobre o aglomerado finito  $\text{Tr}_\Omega$ , e posteriormente sobre os spins da vizinhança  $\text{Tr}_{\Omega'}$ , dessa forma ficaremos com a expressão

$$\langle O(\Omega) \rangle = \frac{\text{Tr}_{\Omega'}\text{Tr}_\Omega[O(\Omega)e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega}e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega'}}]}{\text{Tr}_{\Omega'}\text{Tr}_\Omega[e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega}e^{-\beta\mathcal{H}_{\Omega'}}]}, \quad (2.4)$$

que pode ser reescrita como



$$\langle O(\Omega) \rangle = \frac{Tr_{\Omega'} e^{-\beta \mathcal{H}_{\Omega'}} Tr_{\Omega} [O(\Omega) e^{-\beta \mathcal{H}_{\Omega}}]}{Tr_{\Omega'} e^{-\beta \mathcal{H}_{\Omega'}} Tr_{\Omega} [e^{-\beta \mathcal{H}_{\Omega}}]}. \quad (2.5)$$

Se multiplicarmos a Eq.(2.5) por  $1 = \frac{Tr_{\Omega} [e^{-\beta \mathcal{H}_{\Omega}}]}{Tr_{\Omega} [e^{-\beta \mathcal{H}_{\Omega}}]}$  chegaremos a

$$\langle O(\Omega) \rangle = \frac{1}{Z} \frac{Tr_{\Omega'} \{ e^{-\beta \mathcal{H}_{\Omega'}} Tr_{\Omega} e^{-\beta \mathcal{H}_{\Omega}} Tr_{\Omega} O(\Omega) e^{-\beta \mathcal{H}_{\Omega}} \}}{Tr_{\Omega} e^{-\beta \mathcal{H}_{\Omega}}}. \quad (2.6)$$

A partir das propriedades de separação do traço, podemos chegar finalmente a expressão.

$$\langle O(\Omega) \rangle = \frac{1}{Z} Tr \left\{ \frac{Tr_{\Omega} O(\Omega) e^{-\beta \mathcal{H}}}{Tr_{\Omega} e^{-\beta \mathcal{H}}} e^{-\beta \mathcal{H}} \right\}, \quad (2.7)$$

que comparada com Eq.(2.1) nos fornece um resultado importante para o valor médio de  $O(\Omega)$  que é dado por

$$\langle O(\Omega) \rangle = \left\langle \frac{Tr_{\Omega} [O(\Omega) e^{-\beta \mathcal{H}_{\Omega}}]}{Tr_{\Omega} [e^{-\beta \mathcal{H}_{\Omega}}]} \right\rangle, \quad (2.8)$$

A Eq.(2.8) está evidenciando o fato de que o valor médio de  $O(\Omega)$  sobre todo o sistema pode ser reduzido ao cálculo parcial no aglomerado finito de  $n$  spins. Vale apenas ressaltar que a Eq.(2.8) só é verdadeira para sistemas que apresentem a comutação exigida entre os Hamiltonianos do aglomerado e da vizinhança. Esta exigência só é obedecida pelos sistemas clássicos, pois no limite clássico as variáveis de spin comutam entre si. No caso de sistemas quânticos, a Eq.(2.8) é usada de forma aproximada.

## 2.3 Campo Efetivo no Modelo de Ising

### Aglomerado com um spin

Para ilustrar o desenvolvimento e implementação da técnica do operador diferencial[2], vamos aplicá-la em dois aglomerados distintos ( $\Omega$ ), onde para o primeiro caso temos um spin, e para o segundo dois spins. Estas situações correspondem respectivamente as Fig.(2.2) e Fig.(2.3).

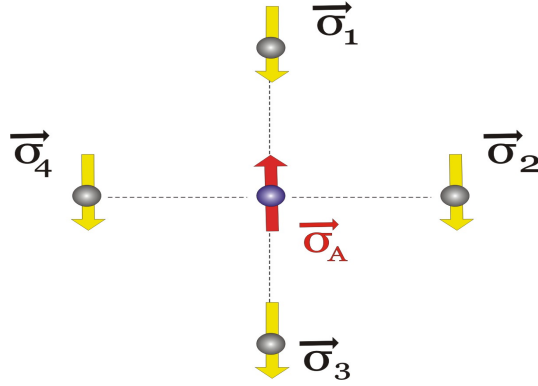


Figura 2.2: Aglomerado  $\Omega$  com um spin

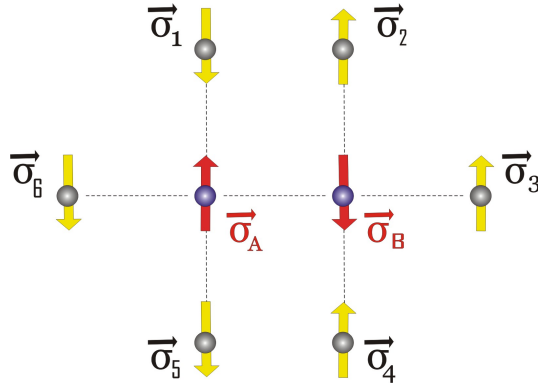


Figura 2.3: Aglomerado  $\Omega$  com dois spins

Para aplicar a teoria de campo efetivo (EFT) no modelo de Ising de spin-1/2, devemos utilizar o Hamiltoniano dado pela Eq.(1.20)

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (2.9)$$

onde  $J_{ij}$  é a interação de troca. Nesse modelo as interações entre os primeiros spins são todas iguais a  $J_{ij} = J$ , e  $\sigma_i = \pm 1$  é a variável de spin na direção axial (z). O caso antiferromagnético no modelo de Ising corresponde ao limite em que  $J < 0$ , sendo assim, o Hamiltoniano assume a forma

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j. \quad (2.10)$$

O Hamiltoniano (2.10) pode ser aplicado para o aglomerado da Fig.(2.2), onde

o spin  $\sigma_A$  do aglomerado  $\Omega$ , chamado de spin central, interage com todos os demais spins da sua vizinhança (primeiros vizinhos). Essas interações são denotadas por  $\sum_{\vec{\delta}}^z \sigma_{i+\vec{\delta}}$ , onde  $z$  é o número de coordenação da rede e  $\vec{\delta}$  será definido como **vetor primeiro vizinho**, ou seja,

$$\mathcal{H}_\Omega = J\sigma_A \sum_{\vec{\delta}}^z \sigma_{1+\vec{\delta}}. \quad (2.11)$$

A grandeza termodinâmica de interesse será a magnetização de sub-rede A, que neste aglomerado, Fig.(2.2), será representada por  $m_A = \langle \sigma_A \rangle$ , sendo assim, vamos escolher o observável  $O(\Omega) \equiv \sigma_A$  de tal forma que

$$m_A = \left\langle \frac{1}{Z_A} \text{Tr}_{\sigma_A} [\sigma_A e^{-K\sigma_A \sum_{\vec{\delta}}^z \sigma_{1+\vec{\delta}}}] \right\rangle, \quad (2.12)$$

onde  $Z_A = \text{Tr}_{\sigma_A} e^{-\beta\mathcal{H}_\Omega}$  e  $\frac{J}{K_B T}$ .

Tomando o traço sobre as configurações de  $\sigma_i = \pm 1$ , obtemos

$$m_A = -\left\langle \tanh\left(K \sum_{\vec{\delta}}^z \sigma_{1+\vec{\delta}}\right) \right\rangle = -\langle \tanh(a) \rangle, \quad (2.13)$$

onde  $a = K \sum_{\vec{\delta}}^z \sigma_{1+\vec{\delta}}$  e  $K = \beta J$ . A identidade acima para a magnetização é conhecida como identidade de Callen e Suzuki[4].

A equação de estado Eq.(2.13) para a magnetização foi calculada de forma exata, porém o desenvolvimento dessa equação se torna muito difícil, devido as variáveis de spins presentes no argumento da função hiperbólica  $\tanh(a)$ . Como saída para esta dificuldade, vamos utilizar a técnica do operador diferencial (ou projeção). A técnica do operador diferencial consiste em remover as variáveis de spin dos argumentos das funções através do operador de projeção[2], representado pela relação

$$e^{aD_x} f(x) = f(x + a), \quad (2.14)$$

onde  $D_x = \frac{\partial}{\partial x}$ .

Aplicando a relação da Eq.(2.14) na Eq.(2.13), ficaremos com a seguinte equação para a magnetização

$$m_A = -\langle e^{(K \sum_{\vec{\delta}} \sigma_{1+\vec{\delta}}) D_x} \rangle \tanh(x)|_{x=0}, \quad (2.15)$$

que combinada com a propriedade das funções exponenciais ( $e^{a+b} = e^a \cdot e^b$ ) resulta em

$$m_A = -\langle \prod_{\vec{\delta}=1}^z e^{K \sigma_{1+\vec{\delta}} D_x} \rangle \tanh(x)|_{x=0}. \quad (2.16)$$

Neste ponto, para dar continuidade ao tratamento analítico do problema, vamos considerar a identidade de Van der Waerden, ou seja,

$$e^{\lambda \sigma_A} = \cosh(\lambda) + \sigma_A \sinh(\lambda). \quad (2.17)$$

Desta maneira a Eq.(2.16) ficará reescrita na forma

$$m_A = -\langle \prod_{\vec{\delta}=1}^z (\alpha_x + \sigma_{i+\vec{\delta}} \beta_x) \rangle \tanh(x)|_{x=0}, \quad (2.18)$$

onde  $\alpha_x = \cosh(K D_x)$  e  $\beta_x = \sinh(K D_x)$ . É importante considerar a seguinte propriedade: Sendo  $f(x) = \tanh(x)$  uma função ímpar, então qualquer atuação de um operador par na função em  $x = 0$  terá resultado nulo, ou seja,  $\mathcal{O}^{par} f(x)|_{x=0} = 0$ .

A fim de ilustrar o desenvolvimento da Eq.(2.18), usaremos o aglomerado com um spin numa rede quadrada conforme mostra a Fig.(2.2). Assim sendo, a equação de estado fica escrita por

$$m_A = \langle \sigma_A \rangle = -A_1(K) m_B - A_3(K) \Gamma, \quad (2.19)$$

sendo  $A_1(K) = \frac{1}{2}[\tanh(4K) + 2 \tanh(2K)]$ ,  $A_3(K) = \frac{1}{2}[\tanh(4K) - \tanh(2K)]$ ,  $m_B = \langle \sigma_i \rangle$ ,  $i = 1, 2, 3, 4$  e  $\Gamma = \langle \sigma_i \sigma_j \sigma_l \rangle$   $i \neq j \neq l = 1, 2, 3, 4$  (simetria invariacional). A Eq.(2.19) é exata e gera um conjunto infinito de equações de funções de correlação,

sendo muito difícil de ser tratada exatamente. Na aproximação de primeira ordem teremos

$$\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \dots \rangle \approx \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \langle \sigma_k \rangle \dots \quad (2.20)$$

Esta aproximação despreza as correlações multi-spins em sítios diferentes. A aproximação **RPA** (*random phase approximation*) acima é diferente da aproximação de campo médio, no sentido de que RPA trata de maneira exata as médias das propriedades cinemáticas local de spin ( $\langle \sigma_i^{2n} \rangle = 1$ ), enquanto a teoria de campo médio padrão fornece um tratamento de aproximação  $\langle \sigma_i^{2n} \rangle \approx \langle \sigma_i \rangle^{2n}$  para as auto correlações, desprezando dessa forma todas as flutuações.

Expandindo o produtório e aplicando a aproximação Eq.(2.20) ficamos com

$$m = A_1(K)m + A_3(K)m^3 \mapsto m = \sqrt{\frac{1 - A_1(K)}{A_3(K)}}, \quad (2.21)$$

onde temos usado a condição de contorno  $m_A = m$  e  $m_B = -m$  para a obtenção da equação de estado do modelo de Ising AF, que na ausência de campo externo é equivalente ao caso F (isomorfismo).

A Eq.(2.21) é muito importante para o estudo dos materiais magnéticos, é a partir dessa equação de estado que obtemos a criticalidade e a magnetização do sistema, em especial, pode-se chegar a temperatura de Néel  $m_1 = 0$ , o que corresponde a tomar a equação  $A_1(T_N) = 1$ , por exemplo, para a rede quadrada encontra-se  $\tau_c = \frac{k_b T_N}{J} = 3.09$  (temperatura reduzida), e a solução exata é  $\tau_c = 2.27$ .

Para uma rede arbitrária com número de coordenação  $z$ , aplicando o desacoplamento (2.20), obtemos

$$m_A = -(\alpha_x + m_B \beta_x)^z \tanh(x)|_{x=0}, \quad (2.22)$$

utilizando a condição de contorno para a fase AF (i.e.,  $m_A = m$  e  $m_B = -m$ ), no limite de  $m \rightarrow 0$  encontramos a temperatura crítica  $\tau_c \equiv K_c^{-1}$  através da seguinte expressão:

$$A_1^z(K_c) = z\alpha_x^{z-1}\beta_x \tanh(x)|_{x=0} = 1. \quad (2.23)$$

Para a rede cúbica simples ( $z=6$ ), resolvendo numericamente a Eq.(2.23) obtemos  $K_c^{-1} = 5.07$  que pode ser comparada com o resultado da expansão em série  $K_c^{-1} = 4.51$ . Note que a medida que o número de coordenação cresce, a precisão dos resultados aproximados (EFT-1) melhoram, de modo que no limite de  $z \rightarrow \infty$  os resultados tendem para o valor de campo médio  $\tau_c = z$ . Verificamos nesta análise que, a medida que aumentamos o valor de  $z$  ( pensando na dimensionalidade (d)), concluimos que as flutuações (térmicas) diminuem, mostrando que em baixa dimensionalidade temos fortes flutuações e as aproximações são mais relevantes na obtenção das grandezas críticas.

Outro resultado importante obtido pelo presente formalismo, no qual encontra-se uma equação de estado auto consistente do tipo  $m = \Psi(m)$ , se refere aos expoentes críticos. Uma vez que expandindo o coeficiente  $A_1(K)$  próximo da criticalidade ( $T \simeq T_c$ ), da Eq.(2.21) podemos obter o comportamento assintótico  $m \approx (T_c - T)^{1/2}$ , indicando assim  $\beta = 1/2$  equivalente ao de campo médio, como o esperado neste tipo de aproximação.

A fim de melhorar o valor de  $T_c$ , mantendo a simplicidade da técnica do operador diferencial, Kaneyoshi e colaboradores[5] propuseram uma nova aproximação, na qual as flutuações em um sítio são proporcionais às flutuações de um sítio vizinho. Considerando que às flutuações nas variáveis  $\sigma_i$  do spin no sítio  $i$  valem  $\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle$ , externo ao spin do aglomerado, seja proporcional a flutuação da variável  $\sigma_A$ , isto é,

$$\sigma_i = \langle \sigma_i \rangle + \lambda(\sigma_A - \langle \sigma_A \rangle), \quad (2.24)$$

onde  $\lambda$  representa uma reação de um spin devido a presença do vizinho (campo de reação Onsager).

Substituindo a aproximação (2.24) na Eq.(2.22), no limite  $m \rightarrow 0$  e após algumas manipulações algébricas obtêm-se  $K_c^{-1} = \frac{2}{\ln(2)}$  equivalente ao resultado na

aproximação Bethe-Peierls. Para qualquer valor de  $z$ , temos

$$K_c^{-1} = \frac{2}{\ln\left(\frac{z}{z-2}\right)} \quad (2.25)$$

e

$$\lambda_c = \frac{1}{z-1}, \quad (2.26)$$

onde  $\lambda_c$  corresponde a função de correlação de dois spins na temperatura crítica  $T_c$ .

Mantendo ainda o espírito da técnica do operador em aglomerado com  $N = 1$  spin, citamos a aproximação do tripleto médio desenvolvida por Taggart e Fittipaldi [6], que para a rede quadrada  $K_c^{-1} = 2.60$ . Combinando esta nova aproximação e introduzindo o campo de reação de Onsager, Taggart[7] obteve uma melhora nos resultados, com  $K_c^{-1} = 2.49$  para a rede quadrada ( $K_c^{-1} = 2.27$ , solução exata).

### **Aglomerado com dois spins**

A seguir aplicaremos a técnica do operador diferencial no modelo de Ising para  $N = 2$  sítios centrais, para o caso antiferromagnético  $J < 0$ . Para o caso de um aglomerado com dois spins, figura (2.3), o procedimento é semelhante ao tomado em um aglomerado com um spin, sendo que agora o Hamiltoniano é composto por interações dos dois sítios centrais com os primeiros vizinhos, inclusive deve-se levar em conta a interação entre os sítios centrais, ou seja,

$$\mathcal{H}_2 = -J\sigma_A\sigma_B - J\sigma_A \sum_{\vec{\delta}}^{z-1} \sigma_{1+\vec{\delta}} - J\sigma_B \sum_{\vec{\delta}}^{z-1} \sigma_{2+\vec{\delta}}. \quad (2.27)$$

Temos usado o Hamiltoniano ferromagnético para evitar usar o formalismo de duas subredes. Esta escolha é devida ao Hamiltoniano F ser equivalente ao caso AF (isomorfismo).

Para o cálculo da magnetização defini-se a grandeza  $m = \langle \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2} \rangle$ , aplicando a definição (2.8) para  $m$ , podemos escrever

$$m = \left\langle \frac{1}{Z_2} \text{Tr}_{\sigma_A, \sigma_B} \left[ \frac{1}{2} (\sigma_A + \sigma_B) e^{-\beta \mathcal{H}_2} \right] \right\rangle, \quad (2.28)$$

onde  $Z_2 = \text{Tr}_{(\sigma_A, \sigma_B)} e^{-\beta \mathcal{H}_2}$ .

Tomando o traço sobre as configurações de spins, obtemos

$$m = \left\langle \frac{\sinh(a_1 + a_2)}{\cosh(a_1 + a_2) + e^{2K} \cosh(a_1 - a_2)} \right\rangle \quad (2.29)$$

onde  $a_n = K \sum_{\vec{\delta}}^{z-1} \sigma_{n+\vec{\delta}}$ .

Mais uma vez, como no caso do aglomerado de um spin, a solução dessa equação é muito difícil, sendo assim, da mesma forma como feito para o caso anterior, aplicaremos a técnica do operador diferencial. Dessa vez, ao invés da função  $f(x)$  de uma única variável, deve-se definir uma função  $g(x, y)$  de duas variáveis, que satisfaça a identidade matemática do operador de projeção. Em outras palavras, essa função deve ser tal que

$$e^{aD_x + bD_y} g(x, y)|_{x,y=0} = g(a, b), \quad (2.30)$$

Aplicando esta relação em (2.29), a magnetização média assume a forma

$$m = \langle e^{a_1 D_x + a_2 D_y} \rangle g(x, y)|_{x,y=0}, \quad (2.31)$$

onde  $g(x, y) = \frac{\sinh(x+y)}{\cosh(x+y) + e^{2K} \cosh(x-y)}$ . Aplicando a identidade de Van der Waerden

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{z-1} (\alpha_x + \sigma_{(i+\vec{\delta}_1)} \beta_x) \prod_{\vec{\delta}_2}^{z-1} (\alpha_y + \sigma_{(i+\vec{\delta}_2)} \beta_y) \right\rangle g(x, y)|_{x,y=0}. \quad (2.32)$$

É importante notar que para o caso de aglomerados com mais de um spin surge uma nova classe de vizinhos que antes não existiam no modelo com um spin central, pois dependendo da topologia da rede os spins centrais  $\sigma_A$  e  $\sigma_B$  podem admitir vizinhos comuns que serão denotados por  $z'$ . Para incluir esta peculiaridade, deve-se reescrever a Eq.(2.32) da seguinte forma:



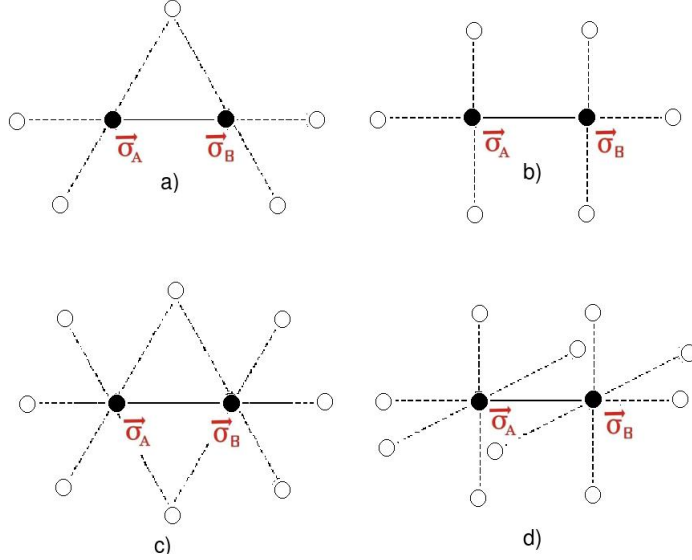


Figura 2.4: Topologia de redes em aglomerados de dois spins: (a) Rede Kagomé, (b) Rede quadrada, (c) Triangular e (d) Cúbica simples.

$$m = \left\langle \prod_{\vec{\delta}_1}^{z-z'-1} (\alpha_x + \sigma_{(1+\vec{\delta}_1)} \beta_x) \prod_{\vec{\delta}_2}^{z-z'-1} (\alpha_y + \sigma_{(2+\vec{\delta}_2)} \beta_y) \prod_{\vec{\delta}}^{z'} e^{(\alpha_{x+y} + \sigma_{\vec{\delta}} \beta_{x+y})} \right\rangle g(x, y)|_{x,y=0} \quad (2.33)$$

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

A figura(2.4) ilustra a idéia de vizinhos comuns, mostrando algumas redes no aglomerado com dois spins, por exemplo, kagomé ( $z = 4$  e  $z' = 1$ ), quadrada ( $z = 4$  e  $z' = 0$ ), triangular ( $z = 6$  e  $z' = 2$ ) e cúbica simples ( $z = 6$  e  $z' = 0$ ).

Considerando a rede quadrada ( $z' = 0$ ), podemos aplicar a aproximação RPA na Eq.(2.32), para escrever uma expressão para a magnetização.

$$m = (\alpha_x + m\beta_x)^{z-z'-1} (\alpha_y + m\beta_y)^{z-z'-1} (\alpha_{x+y} + m\beta_{x+y})^{z'} g(x, y)|_{x,y=0}. \quad (2.34)$$

A equação acima pode ser reduzida a sua forma polinomial, num processo semelhante ao caso de um spin. No entanto, o produto dos termos que contém a

Resultados teóricos					
Rede	$z$	$z'$	$EFT - 1$	$EFT - 2$	$MONTE CARLO$
Kagomé	4	1	3.089	2.923	2.143
Quadrada	4	0	3.089	3.025	2.269
Triangular	6	2	5.073	4.950	3.641
Cúbica simples	6	0	5.073	5.039	4.511

Tabela 2.1: Valores de temperaturas críticas para várias redes  $2d$  e  $3d$  no modelo de Ising- $\frac{1}{2}$ . Resultados obtidos via teoria de campo efetivo com aglomerados de 1 spin (EFT-1) e dois spins (EFT-2). Na última coluna apresentamos os resultados via simulação de Monte-Carlo.[8]

magnetização do lado direito torna a equação acima muito extensa. Para auxiliar no tratamento algébrico, devemos recorrer à algumas propriedades importantes. Por exemplo, apenas as combinações de funcionais ímpares sobrevivem na expressão acima. (i.e.  $\mathcal{O}^{par} f(x)^{impar}|_{x=0}$ ).

Tomando esta propriedade pode-se resolver esta equação com auxílios computacionais (i.e Maple, fortran etc..). No limite de  $m \rightarrow 0$  podemos determinar  $T_c$  a partir da Eq.(2.34), baseada na teoria de campo efetivo EFT-2. Os resultados para os valores de temperatura crítica para EFT-1 e EFT-2 são comparados na tabela 2-1.

De acordo com a tabela 1.2 podemos verificar que o crescimento do número de spins no aglomerado tende a melhorar os resultados do ponto de vista quantitativo, quando comparados com resultados mais rigorosos obtidos via simulação de Monte Carlo. Por outro lado, a convergência é muito lenta no uso de EFT o que certamente não é encorajador para encontrar resultados quantitativos precisos para as grandezas críticas, mas é motivador para estudar sistemas mais complexos de forma qualitativos como veremos a seguir no caso do modelo de Heisenberg quântico.

## 2.4 Modelo de Heisenberg

O próximo sistema no qual vamos aplicar a teoria de campo efetivo, via técnica do operador diferencial, é o modelo de **Heisenberg Isotrópico Antiferromagnético** composto por duas sub-redes interpenetrantes.<sup>1</sup> O Hamiltoniano efetivo desse tipo de rede é dado por

$$\mathcal{H}^{AF} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j, \quad (2.35)$$

onde  $\vec{\sigma}_i = (\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z)$  é o operador de spin de Pauli no sítio  $i$ , e a soma sobre os primeiros vizinhos.

A teoria de campo efetivo que será empregada neste exemplo é tomada para um aglomerado de dois spins ('Cluster' dois spins na aproximação axial), portanto, seguindo a nomenclatura, estamos nos referindo a EFT-2. O Hamiltoniano (2.35) para o aglomerado de dois spins seguindo a aproximação axial (considera-se a direção  $z$  como privilegiada para interações fora do cluster) é dado por

$$-\beta\mathcal{H}_2 = -K\vec{\sigma}_A \cdot \vec{\sigma}_B + a_A\sigma_A^z + a_B\sigma_B^z, \quad (2.36)$$

onde  $a_\nu = -K \sum_{\delta}^{z-1} \sigma_{n+\delta}^z$ ,  $K = \beta J$  e  $z$  é o número de coordenação.

A magnetização  $m_A$  da sub-rede  $A$  pode ser obtida a partir da Eq.(2.9), ou seja,

$$m_A = \left\langle \frac{\partial \ln Z_2}{\partial a_A} \right\rangle, \quad (2.37)$$

sendo a função de partição

$$Z_2 = Tr_{A,B} e^{-\beta\mathcal{H}_2}. \quad (2.38)$$

A função de partição para o sistema é obtida através da diagonalização do Hamiltoniano (2.36). Para escrever a função de partição, devemos escrever o traço do operador  $e^{-\beta\mathcal{H}_2}$ , e com este intuito, devemos escolher uma base. A base escolhida é

---

<sup>1</sup>Assumidas neste trabalho, aproximação, como sendo o estado fundamental do Hamiltoniano de Heisenberg

formada pelos autovetores ( $|++\rangle = |1\rangle, |+-\rangle = |2\rangle, |-+\rangle = |3\rangle$  e  $|--\rangle = |4\rangle$ ). Podemos diagonalizar  $\mathcal{H}_2$  encontrando seus autovalores  $\lambda_i$ , uma vez que para calcular a exponencial de uma matriz necessitaremos da sua forma diagonal. A matriz  $\mathcal{H}_2$  pode ser obtida mediante o Hamiltoniano (2.36) reescrito em termos dos operadores  $\sigma_{A,B}^x, \sigma_{A,B}^y$  e  $\sigma_{A,B}^z$ , ou seja,

$$-\beta\mathcal{H} = -K[\sigma_A^x\sigma_B^x + \sigma_A^y\sigma_B^y + \sigma_A^z\sigma_B^z] + a_A\sigma_A^z + a_B\sigma_B^z, \quad (2.39)$$

onde os elementos de matriz são

$$\mathcal{H}_{ij} = \langle ij|\mathcal{H}_2|i'j'\rangle, \quad (2.40)$$

obtendo finalmente a forma matricial

$$-\beta\mathcal{H}_2 = \begin{bmatrix} -K + a_A + a_B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -K + a_A - a_B & -2K & 0 \\ 0 & -2K & K - a_A + a_B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -K - a_A - a_B \end{bmatrix}, \quad (2.41)$$

Diagonalizando (2.41) e substituindo os autovalores na Eq.(2.38), obtemos

$$Z_2 = e^{-K} \cosh(a_A + a_B) + e^K \cosh(W(a_A, a_B)), \quad (2.42)$$

onde  $W(a_A, a_B) = \sqrt{(a_A - a_B)^2 + 4K^2}$ . Utilizando a Eq.(2.42) na Eq.(2.37), a magnetização toma a seguinte forma

$$m_A = \left\langle \frac{\sinh(a_A + a_B) + \Gamma(a_A, a_B)\sinh(W(a_A, a_B))}{\cosh(a_A + a_B) + \Gamma(a_A, a_B)\cosh(W(a_A, a_B))} \right\rangle, \quad (2.43)$$

onde  $\Gamma(a_A, a_B) = e^{2K(\frac{a_A - a_B}{W})}$ . Utilizando a técnica do operador diferencial, obtemos a magnetização da subrede A.

$$m_A = \left\langle \prod_{i \neq 1,2}^{z-1} (\alpha_x + \sigma_i^z \beta_x)_A \prod_{j \neq 1,2}^{z-1} (\alpha_y + \sigma_j^z \beta_y)_B \right\rangle g(x, y)|_{x,y=0}, \quad (2.44)$$

com

$$g(x, y) = \frac{\sinh(x + y) + \Gamma(x, y)\sinh(W(x, y))}{\cosh(x + y) + \Gamma(x, y)\cosh(W(x, y))}. \quad (2.45)$$

O primeiro produtório se refere aos primeiros vizinhos que estão interagindo com o spin localizado na sub-rede  $A$ , enquanto o segundo se refere a interação entre os primeiros vizinhos e o spin da sub-rede  $B$ .

Tomando como base o desenvolvimento da magnetização do modelo de Ising para 2 spins centrais, vamos calcular a Eq.(2.44), tomando também a aproximação RPA

$$\langle \sigma_i^z \sigma_j^z \dots \sigma_k^z \rangle \approx \langle \sigma_i^z \rangle \langle \sigma_j^z \rangle \dots \langle \sigma_k^z \rangle, \quad (2.46)$$

que despreza as correlações dos spins entre os primeiros vizinhos fora do cluster, e considera as correlações dos spins nos mesmos **sítios** de forma exata. A expressão (2.46) pode ser aplicada para o caso  $z = 6$ , que consiste numa rede cúbica simples, onde a magnetização média  $m_A = -m_B = m$ . Aplicando as condições de contorno de uma rede cúbica obtemos

$$m_A = m = (\alpha_x - m\beta_x)^5 (\alpha_y + m\beta_y)^5 g(x, y)|_{x,y=0}. \quad (2.47)$$

Expandindo esta equação em potências de  $m$ , obtemos uma expressão para a magnetização com a seguinte forma polinomial

$$m = A_1 m + A_3 m^3 + A_5 m^5 + A_7 m^7 + A_9 m^9, \quad (2.48)$$

que para uma caso geral (sem campo externo) pode ser escrita como

$$m = \sum_{p=0}^{2p+1} A_{2p+1} m^{2p+1}, \quad (2.49)$$

onde os  $A_{2p+1}$  são coeficientes que dependem da temperatura.

A temperatura de Néel  $T_N$  é obtida numericamente, via métodos computacionais numéricos. Para isso, deve-se fazer o limite  $m \rightarrow 0$ , o que se resume a resolver uma para o primeiro coeficiente de Eq.(2.49)

<b>Heisenberg</b>		
Técnica	$T_c(K)$	$T_N(K)$
EFT-2	4.891	4.947
Aprox. de Pares	3.640	4.071
Monte Carlo	3.340	3784

Tabela 2.2: Temperaturas críticas reduzidas para o modelo de Heisenberg numa rede cúbica simples obtidos por várias técnicas, EFT-2[9], Aproximação de Pares[10] e Monte Carlo[11],[12].

Ou seja, para  $A(T_N)_1^{AF} = 1$  temos  $T_N = 4,95K$  maior do que  $T_c = 4.89K$  obtido na ref.[9] para uma rede cúbica simples. Agora nos deparamos com um resultado muito importante, contrariamente ao modelo de Ising, o modelo de Heisenberg obtém resultados diferentes para as temperaturas críticas nos casos Ferro e Antiferromagnético. Isso decorre fundamentalmente da diferença entre as funções de partição, que no modelo de Ising são idênticas fazendo com que para sistemas clássicos  $T_N = T_c$ . A tabela (1.3) apresenta os valores da temperatura crítica reduzida para o modelo de Heisenberg com interações AF e F, onde os cálculos de EFT-2 nos modelos de Heisenberg quântico foram realizados por[13].

# Referências Bibliográficas

- [1] L. Onsager, Physical Review, **65**, 117-149, (1944).
- [2] R. Honmura e T. Kaneyoshi, J. Phys. C **12**, 3970 (1979).
- [3] A. R. Salinas, "Introdução à Física Estatística". **EDUSP**, São Paulo, 1997.
- [4] N. Suzuki, Phys. Lett., 19, **267** (1965); H.B. Callen, Phys. Lett. **4**, 161(1963).
- [5] T. Kaneyoshi, I. P. Fittipaldi, R. Hommura e T. Manabe, Phys. Rev. B **24**, 481 (1981)
- [6] G. B. Taggart e I. P. Fittipaldi, Phys.Rev. B. **25**, 7026 (1982)
- [7] G. B. Taggart, Physica A **113**, 535 (1982)
- [8] J. Robert Viana, Tese de Doutorado, DF-UFAM-2007. Transição de fase quântica e models de spins frustrados
- [9] T. Idoaki e N. Uryú, Physica A, **181**, 172 (1992)
- [10] J. A. Plascak, Lúgia E. Zamora e G. A. Pérez Alcazar, Phys. Rev. B 61, 3188 (200)
- [11] A. K. Murtazaev e I. A. Favorski, Fiz. Nizk. Temp. **18**, 144 (1999)
- [12] A. W. Sandvic, Phys. Rev. Lett. **80**, 5196 (1998)
- [13] J. Ricardo de Sousa e D. F. de Albuquerque, Physica A 236, 149 (1997); D. F. Albuquerque, Physica A **287**, 185 (2000)

# Capítulo 3

## Modelos Frustrados e Resultados Teóricos

### 3.1 Introdução

O modelo de Heisenberg com frustração tem sido muito estudado nos últimos 20 anos por vários métodos. O conceito de **frustração** introduzido por Thouless[1] está associado ao conflito de ordenamento de um dado íon magnético distribuído sobre a matriz de um cristal magnético. Na rede quadrada, as interações de troca  $J_2 < 0$  ao longo da diagonal, introduz uma competição entre as interações de primeiros e segundos vizinhos. Essa competição cria frustração no sistema. A figura 3.1 ilustra o conceito de frustração. Nesta figura podemos observar que os spins segundos vizinhos do sítio central (i.e.,  $\vec{\sigma}_1$ ), não satisfaz simultaneamente as interações antiferromagnética  $J_2$  com  $\vec{\sigma}_A$  e  $J_1$  com  $\vec{\sigma}_2$ ,<sup>1</sup> entre o sítio central  $\sigma_A$  e seus primeiros vizinhos.

Em particular, os diagramas de fases obtidos para este modelo são muitos promissores para o entendimento dos novos supercondutores de alta temperatura. Foi

---

<sup>1</sup>  $J_1$  pode ser menor ou maior que zero, ou seja, essa interação pode ser antiferromagnética ou ferromagnética, ao passo que para haver frustração na rede quadrada,  $J_2$  é necessariamente uma interação antiferromagnética



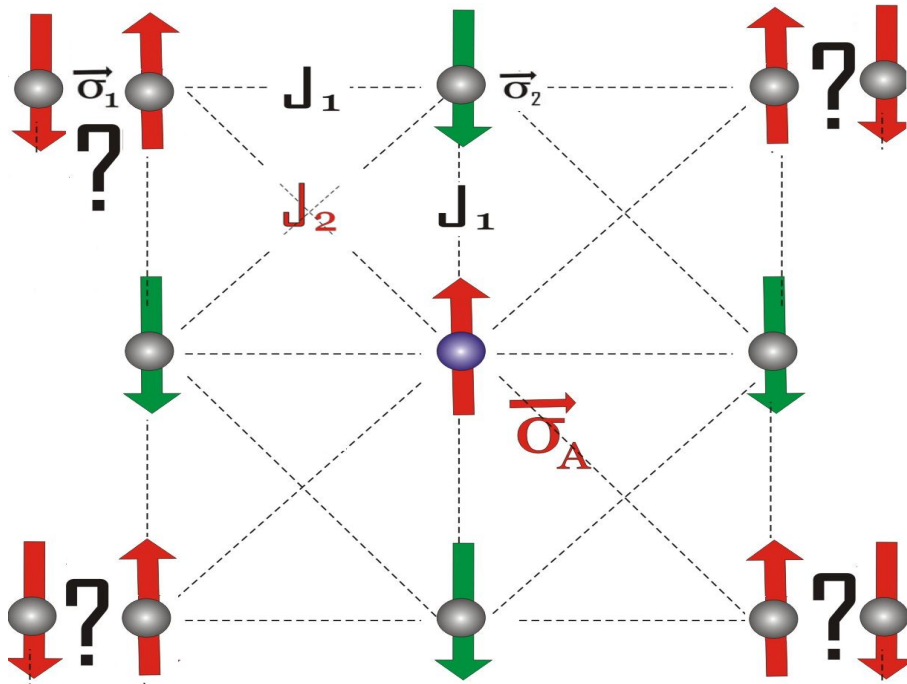


Figura 3.1: Frustrações na rede quadrada

com a descoberta desses novos compostos supercondutores, formados por planos de  $CuO_2$ , que incentivou o estudo das frustrações quânticas no modelo de Heisenberg. O entendimento desses supercondutores através desse modelo foi conjecturado por Anderson [2], que imaginava que as frustrações quânticas, nesse materiais, seriam capazes de destruir a ordem de longo-alcance, criando uma ordem de curto-alcance responsável pela formação de pares de elétrons em estados singletos. Essa idéia ganhou muitos adeptos depois da descobertas da fase de líquido de spin (LS) no modelo de Heisenberg frustrado.

A ligação física entre as frustrações quânticas e os supercondutores de alta temperatura estaria no fato de que essas frustrações criam uma ordem de curto-alcance, formada por dímeros ou plaquetas (estado LS). Esse estado, em tese, é o responsável pela formação dos novos pares de Cooper para esses compostos. Essa teoria é fisicamente bastante atraente, pois a energia de acoplamento  $J$  é suficientemente forte para suportar altas energias térmica (em comparação com a energia térmica que os

compostos supercondutores de alta temperatura estão sujeitos), o que não pode ser explicado pela teoria (BCS) dos supercondutores convencionais em baixa temperatura.

## 3.2 Heisenberg Quântico Frustrado em 2D

Nesta seção vamos introduzir os aspectos estruturais do modelo de Heisenberg frustrado em 2D. Para isso vamos nos basear no composto  $Li_2VO_2SiO_4$ . A estrutura microscópica[3] desse composto é mostrada na Fig. (3.2).

A parte superior da Fig.(3.2) mostra um corte paralelo as camadas, enquanto a parte inferior retrata uma visão perpendicular as camadas e na direção do eixo  $c$ . Este composto apresenta uma estrutura tetragonal altamente simétrica em que as camadas são separadas somente por uma única camada de átomos de Li, onde estas camadas são completamente planas e sem distorção. Do ponto de vista físico, nos compostos  $VOAO_4$  (com  $A = P^{5+}$ , de  $Si^{4+}$  ou de  $Ge^{4+}$ ) as camadas são compostas de  $V^{4+}$  magnético,  $S = \frac{1}{2}$  cujos primeiros vizinhos são quatro  $V^{4+}$  localizados nas pirâmides que apontam no sentido oposto. Os segundos vizinhos são mais quatro  $V^{4+}$  localizados em pirâmides ver Fig(3.2). Desta topologia têm-se duas interações de troca entre o  $V^{4+}$  competindo para ser dominante: um entre os primeiros vizinhos, denotado por  $J_1$  e uma entre segundos vizinhos  $J_2$

### 3.2.1 Modelagem Teórica dos Compostos de Vanádio

As propriedades termodinâmicas, por exemplo, a magnetização, de modelos de spins frustrados são fortemente afetadas pela topologia da rede. A topologia da rede cria frustrações que de certa forma estão por trás de algumas características das transições de fases, por exemplo, o tipo de linha de transição (primeira ou segunda ordem).

O modelo de Heisenberg frustrado é descrito pelo seguinte Hamiltoniano

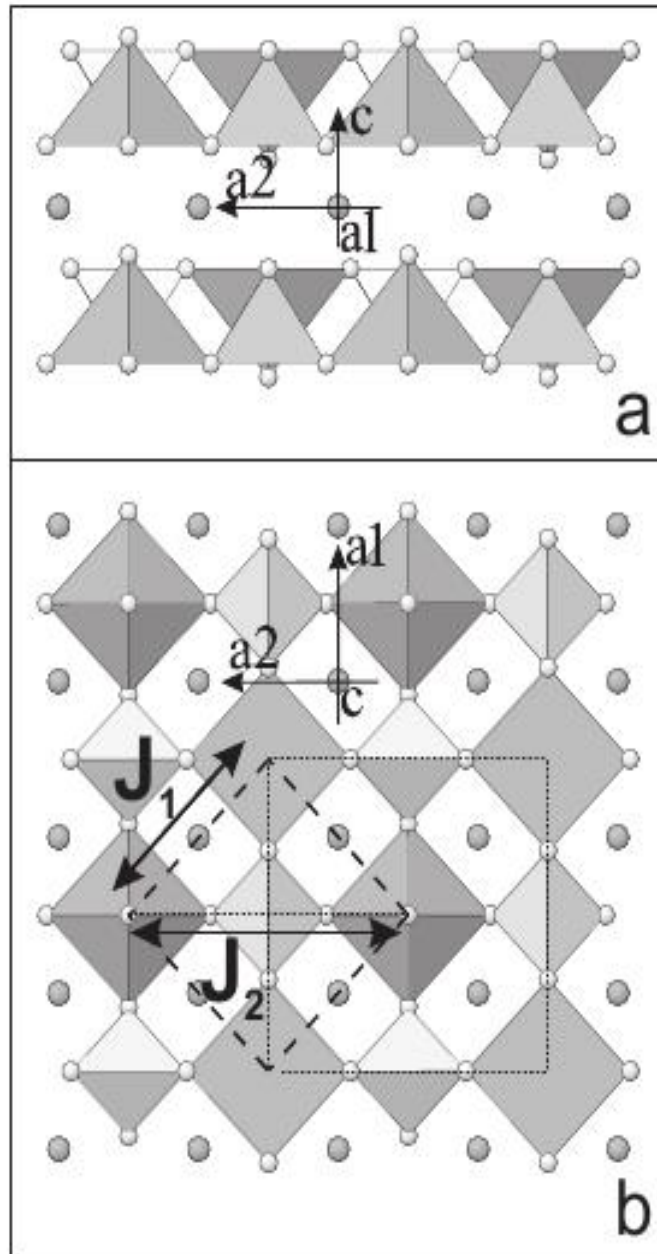


Figura 3.2: Estrutura do composto  $Li_2VOSiO_4$ . a) Vista paralela às camadas  $[VOPO_4]$ . b) Vista paralela à linha central de  $c$ . Os cations de  $Li$  são mostrados como esferas cinzas. O quadrado tracejado indica a estrutura 2D-quadrada dada forma pela interação  $J_1 - J_2$  que é frustrada pela interação  $J_2$  representada pelas linhas pontilhadas.

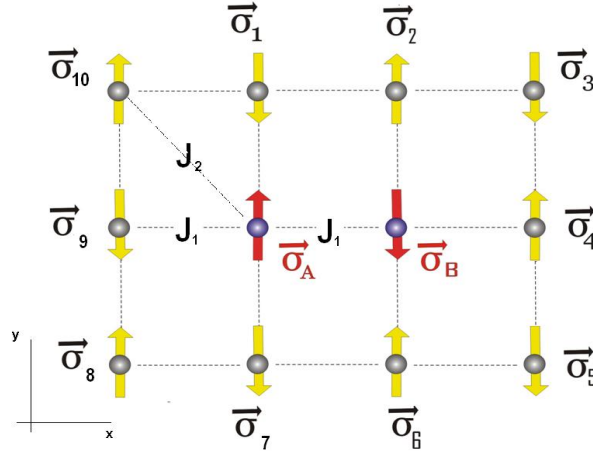


Figura 3.3: Aglomerado com dois spins modelando as interações  $J_1 - J_2$  entre primeiros e segundos vizinho, respectivamente uma rede quadrada no modelo de Heisenberg quântico frustrado.

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j, \quad (3.1)$$

onde os símbolos  $(\langle, \rangle)$  e  $(\langle\langle, \rangle\rangle)$  indicam somas sobre primeiros e segundos vizinhos, respectivamente.

Dependendo do valor do parâmetro de frustração  $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$ , em  $T = 0$  (estado fundamental), teremos dois tipos de ordenamentos. Abaixo de um determinado valor crítico  $\alpha_{1c}$  ( $\alpha < \alpha_{1c}$ ), o estado fundamental corresponde ao ordenamento ferromagnético-F (ou antiferromagnético-AF) cujo os spins estão orientados paralelamente (antiparalelamente) sob toda a rede cristalina, dependendo do sinal  $J_1 < 0$  ( $J_1 > 0$ ).

Para  $\alpha > \alpha_{2c}$  temos um ordenamento colinear ou superantiferromagnético, que corresponde aos spins orientados ferromagneticamente ao longo da direção vertical (ou horizontal) e interagindo antiferromagneticamente entre cadeias. Na Fig.(3.4) temos os esquemas das ordens antiferromagnética e colinear numa rede quadrada.

Experimentalmente, os compostos óxidos de vanádio  $Li_2VO(Si, Ge)O_4$  são candidatos para serem descritos pelo modelo de Heisenberg de spin 1/2 com interações

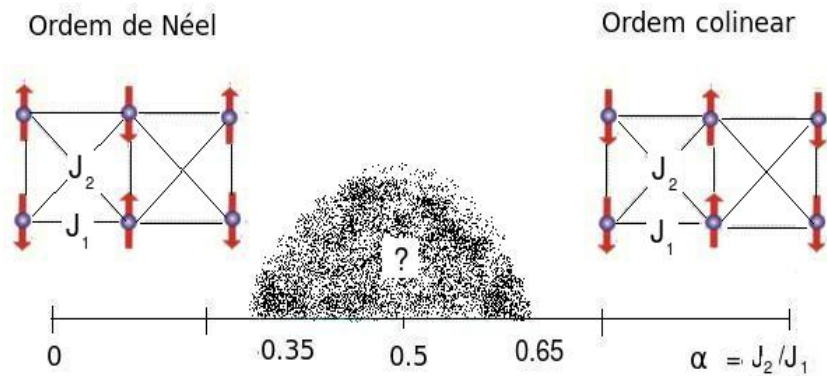


Figura 3.4: Diagrama de fase esquemático do modelo de Heisenberg quântico de spin1/2 frustrado numa rede quadrada[4]

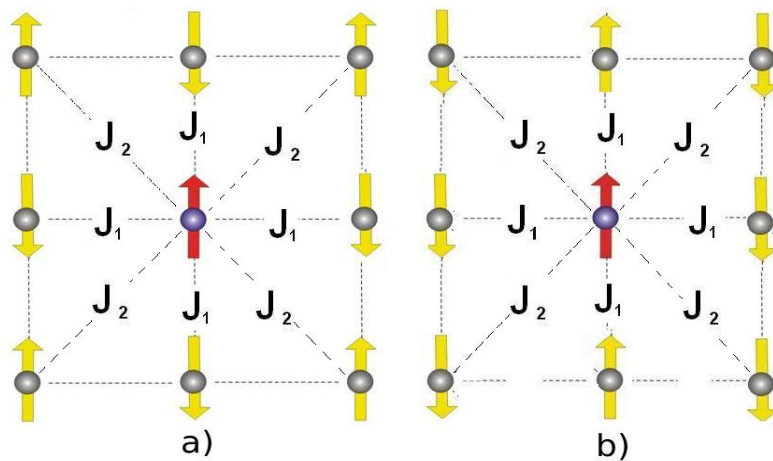


Figura 3.5: Ordenamento magnético do modelo frustrado numa rede quadrada. (a) ordem de Néel ou antiferromagnética, (b) ordem colinear.

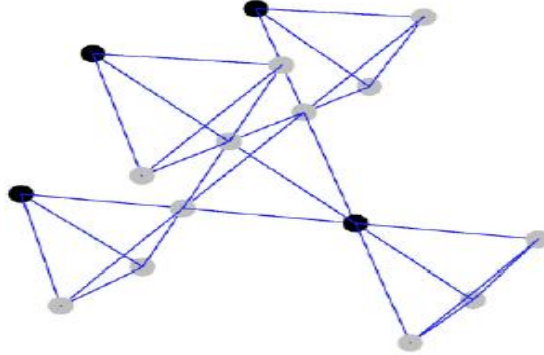


Figura 3.6: Esquema de uma rede pyrochlore. Os sítios são localizados nos vértices dos tetraedros.[3]

entre primeiros e segundos vizinhos (modelo  $J_1 - J_2$ ) numa rede quadrada[5]. Através de medidas experimentais de ressonância magnética nuclear (RMN), Melzi e colaboradores [6] encontraram evidência para o estado ordenado dos spins na fase colinear, e estimaram o parâmetro de frustração como sendo da ordem de  $\alpha = 1.1$ , onde para estes óxidos de vanádio são caracterizados por apresentar estruturas de camadas contendo íons  $V^{4+}$  com spin localizado de valor  $S = 1/2$ . Na Fig.(3.5) apresentamos a estrutura destes óxidos, que são formados por íons  $V^{4+}$  numa rede quadrada.

No caso quântico com spin-1/2, existe um estado intermediário entre  $\alpha_{1c} \simeq 0.40$  e  $\alpha_{2c} \simeq 0.60$  com ausência de ordem de longo alcance (fase paramagnética quântica-PQ), conhecido na literatura como estado líquido de spin (LS). Este estado LS é caracterizado pela existência de estados singletos (dímeros, plaquetas, etc) distribuídos aleatoriamente sob a rede quadrada, assemelhando-se com o estado líquido da água, que apresenta momentos de dipolos distribuídos aleatoriamente sobre todo o volume. O diagrama de fase em  $T = 0$  do modelo  $J_1 - J_2$  com spin  $s = 1/2$ , esquematizado na Fig.(3.4), tem sido amplamente discutido por diversas técnicas [7-25], onde qualitativamente os resultados são todos equivalentes. Porém, alguns problemas ainda estão em aberto e necessitam de mais investigações, como, por exemplo, a natureza do estado LS e a ordem de transição de fase nos pontos

$\alpha = \alpha_{1c}$  (entre AF-LS) e  $\alpha = \alpha_{2c}$  (entre LS-CAF, onde CAF representa o estado colinear antiferromagnético). De uma maneira geral, acredita-se que o ponto  $\alpha = \alpha_{1c}$  corresponde a uma transição de fase contínua (segunda ordem) e no ponto  $\alpha = \alpha_{2c}$  uma transição de primeira ordem. No estado LS temos presença de gap [18],  $\Gamma$ , que se manifesta com um comportamento assintótico com uma lei exponencial no limite de baixa temperatura, por exemplo,  $\chi_o(T \rightarrow 0) \approx e^{-\frac{\Gamma}{T}}$ , onde próximo do ponto crítico  $\alpha = \alpha_{1c}$  temos que  $\Gamma \approx \Gamma_o(\alpha - \alpha_{1c})^{z\nu}$  ( $z$  e  $\nu$  são os expoentes críticos dinâmicos e do comprimento de correlação, respectivamente). A extensão deste modelo, usando o grupo de renormalização com matriz densidade (DMRG), para o caso de spin  $s = 1$  foi recentemente tratado por Moukouri[25], no qual o estado LS não tem sido observado, apenas existe uma transição entre as fases AF e CAF. A ordem desta transição em  $\alpha = \alpha_c$  não foi devidamente esclarecida, acredita-se ser de primeira ordem. Assim sendo, este modelo  $J_1 - J_2$  na rede quadrada com spin semi-inteiro ( $s = 1/2, 3/2, \dots$ ) apresenta o estado LS com gap, enquanto o caso de spin inteiro ( $s = 1, 2, \dots$ ) não tem gap (estado LS inexistente). Esta afirmação sobre a existência ou não do estado LS como uma função do valor spin é uma conjectura nossa, que está sendo investigado por diversos grupos. No caso da cadeia de Heisenberg AF, a conjectura de Haldane[20] indica que o sistema tem gap ( $\Gamma$ ) quando o sistema tem spin inteiro, oposto ao resultado do modelo  $J_1 - J_2$  na rede quadrada que tem gap (fase LS) para o caso de spin semi-inteiro.

O limite do modelo  $J_1 - J_2$ , Eq.(3.1), com spin clássico ( $s \rightarrow \infty$ ) ocorre uma transição direta (primeira ordem) entre as fases AF e CAF que é observada em  $\alpha = \alpha_c = 1/2$ . Flutuações quânticas modificam este valor  $\alpha_c$ , que dependendo do spin (inteiro ou semi-inteiro) o sistema pode apresentar o estado intermediário LS entre as fases AF e CAF (spin semi-inteiro). Uma maneira de tratar o modelo  $J_1 - J_2$  classicamente, consiste em trocar a variável de spin  $\vec{\sigma}_1$  por spin Ising  $\sigma_1^z$ . Este modelo  $J_1 - J_2$  com simetria Ising na rede quadrada foi discutido intensamente por vários autores [27-35]. As propriedades magnéticas quânticas dependem fortemente da dimensionalidade [30]. A tendência para o ordenamento é mais pronunciada em

sistemas tridimensionais ( $d = 3$ ) do que em duas dimensões ( $d=2$ ), mas uma fase magneticamente desordenada pode também ser observada em sistemas frustrados 3-d, como, por exemplo, no modelo de Heisenberg-1/2 AF na rede Kagomé empilhada [34] ou na rede Pirocloro[38]. Recentemente, tem sido mostrado que o modelo  $J_1 - J_2$  quântico 3d nas redes cúbica simples [33] e cúbica de corpo centrado [34]-[45] não apresenta o estado intermediário LS.

Em sistemas reais, desvios do modelo  $J_1 - J_2$  ideal na rede quadrada tem de ser introduzidos, tais como, anisotropia de exchange [36-41] e interação entre planos [42,43], a fim de modelar adequadamente as propriedades magnéticas dos compostos formados por planos de vanádios. Medidas experimentais [44] no composto  $Li_2VOSiO_4$  tem estimado que  $\frac{J'}{J_1} \simeq 0.07$  e  $\alpha = \frac{J_2}{J_1} \simeq 1.0$  ( $J'$  é a interação de exchange AF entre planos), mostrando que este material pode ser descrito por um modelo  $J_1 - J_2$  quase-2d.

Do ponto de vista experimental, simular o diagrama de fase teórico esquematizado na Fig.(3.4) é bastante motivante, sobretudo para entender fisicamente a natureza do estado LS. Uma maneira que se tem conseguido variar o parâmetro de frustração  $\alpha$  no monocristal  $Li_2VOSiO_4$  é através da aplicação de alta pressão, que evidência uma compressibilidade anisotrópica e uma significativa contração das ligações  $Li-O$ . O cálculo da estrutura eletrônica por processo *ab initio* [45] tem indicado que o parâmetro de frustração  $\alpha$  sob ação da pressão no composto  $Li_2VOSiO_4$  é reduzido de até 40% do seu valor original (sem pressão) quando a pressão varia de 0 até 7.6 *GPa*. Porém, nessa experiencia, a redução do parâmetro  $\alpha$  ,sob pressão, não foi suficiente para destruir o estado colinear, obrigando o sistema a passar por uma transição de fase para o estado LS, ou seja, o diagrama de fase esquematizado na Fig.(3.4) ainda continua um enigma do ponto de vista experimental.

O modelo  $J_1 - J_2$  ideal assume duas interações competitivas: a interação  $J_1$  dos primeiros vizinhos ao longo das arestas da rede quadrada e a interação  $J_2$  dos segundos vizinhos ao longo das diagonais (ver a Fig.(3.3)). A frustração magnética existe somente quando  $J_2 > 0$  ( $J_1 > 0$  ou  $J_1 < 0$ , correspondente ao sistema anti-



ferromagnético-AF ou ferromagnético-F, respectivamente). Portanto, o parâmetro de frustração  $\alpha$  age no sistema como agente destruidor do estado AF (ou F) para induzir no estado colinear AF (CAF) ou F (CF), separados entre si pelo estado desordenado LS. Desvios deste modelo  $J_1 - J_2$  ideal na rede quadrada é esperado, uma vez que materiais frustrados não são ideais. Anteriormente comentamos a presença da anisotropia de *exchange* como sendo um fator para mudar o aspecto ideal do modelo  $J_1 - J_2$ , mas este parâmetro não é tão acessível experimentalmente. O composto magnético quase-2d (*CuCl*)  $LaNb_2O_7$  foi recentemente sintetizado [40] como um promissor sistema descrito pelo modelo  $J_1 - J_2$ , onde estudos indicam certa distorção da rede [49], que claramente muda o aspecto ideal e é importante na descrição física de suas propriedades magnéticas. Foi mostrado através de cálculo de estruturas de banda [51], analisando as interações de *exchange*, a modelagem teórica realística para os compostos de camadas de vanádios formados com fósforo, tipo  $AA'VO(PO_4)_2$  ( $AA' = Pb_2, SrZn$  e  $BaCd$ ), deve incluir interações de *exchange* inequivalentes sobre a rede quadrada, isto é,  $J_1, J'_1, J_2$  e  $J'_2$ . Por exemplo, para o composto  $SrZnVO(PO_4)_2$  foi estimado os valores  $\frac{J'_1}{J_1} \simeq 0.7$  e  $\frac{J'_2}{J_2} \simeq 0.4$ , enquanto para o composto  $BaCdVO(PO_4)_2$   $J'_1 \approx J_1$  e  $J'_2 \approx J_2$ . Motivado por estes cálculos de estrutura de banda, estudaremos neste trabalho a transição de fase quântica do modelo de Heisenberg quântico frustrado com ligação  $J_1$  inequivalente, e consideraremos  $J'_2 = J_2$ . Denotaremos este Hamiltoniano de modelo  $J_1 - J'_1 - J_2$  que é descrito por

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j + J'_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j. \quad (3.2)$$

Observando a Fig.(3.7) pode-se verificar que o primeiro termo da Eq.(3.2) indica a interação ao longo da direção horizontal (x), a segunda parcela representa as interações ao longo da direção vertical (y) e o último termo intruz as frustrações nas interações (antiferromagnéticas) entre segundos vizinhos .

O modelo  $J_1 - J'_1 - J_2$  numa rede quadrada foi primeiramente estudado por

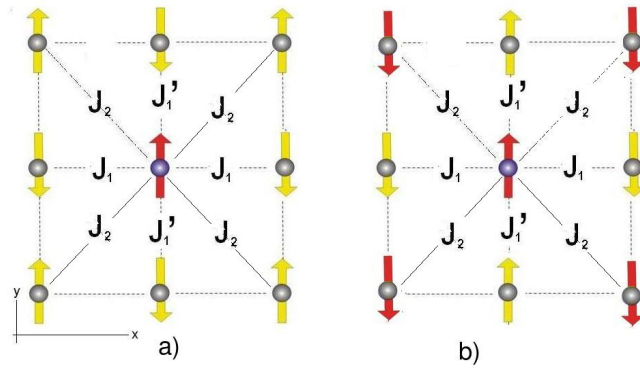


Figura 3.7: Modelagem do modelo  $J_1 - J_1' - J_2$ ; a) Fase antiferromagnética, b) colinear

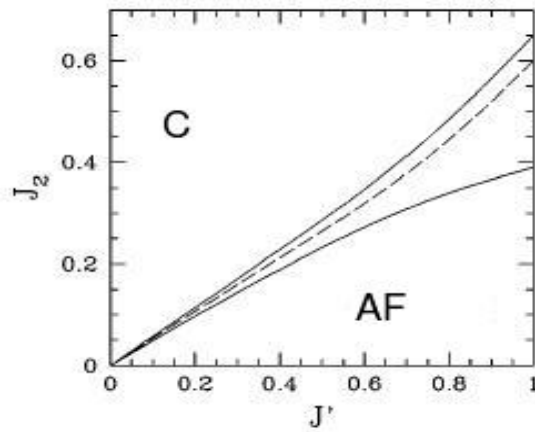


Figura 3.8: Diagrama de fase em  $T=0$  do modelo  $J_1 - J_1' - J_2$  na rede quadrada no plano  $J_2 - J_1'$  ( $J_1 \equiv 1$ ,  $J_1' = J'$ ) obtido por Sindzinger[53]

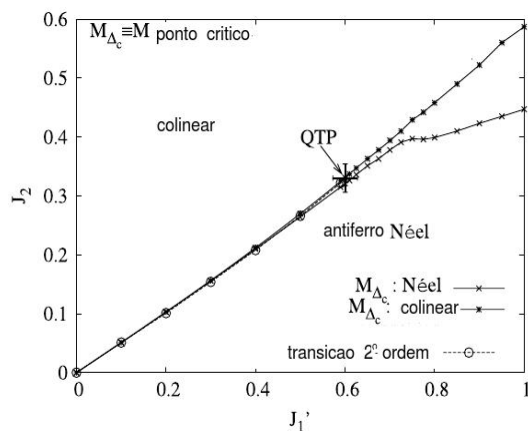


Figura 3.9: Diagrama de fase em  $T=0$  do modelo  $J_1 - J_1' - J_2$  numa rede quadrada no plano  $J_2 - J_1'$  ( $J_1 = 1$ ) obtido por Bishop e colaboradores

Nersesyam e Tsvelik [52], onde o diagrama de fase em  $T = 0$  no plano  $\alpha - \lambda$  ( $\lambda = \frac{J_1'}{J_1}$ ) é alvo de muito estudo e discussão na comunidade de Física da matria condensada. Usando a diagonalização exata para aglomerado de tamanho  $N \leq 36$  ( $6 \times 6$ ) spins, Sindzingre [53] obteve duas linhas críticas, uma entre a transição de fase CAF e LS  $\alpha_{1c} = \alpha_c + \frac{5\lambda^2}{8\pi^2}$  e a outra AF e LS  $\alpha_{2c} = \alpha_c + \frac{\lambda^2}{8\pi^2}$ , onde  $\alpha_c = \frac{\lambda}{2}$  corresponde ao ponto de transição clássica. No diagrama de fase da Fig.(3.9) observamos que estas duas linhas críticas emergem para o ponto  $(\alpha_t = 0, \lambda_t = 0)$ , mostrando que para qualquer valor de  $0 < \lambda \leq 1$  existe o estado intermediário LS. Durante alguns anos acreditava-se ser este diagrama de fase, do modelo  $J_1 - J_1' - J_2$ , correto [54,55]. Somente recentemente, Bishop e colaboradores[43] têm estudado este modelo usando a técnica do cluster acoplado [56]. Para o caso de spin-1/2 eles obtiveram um novo diagrama de fase no plano  $\alpha - \lambda$ , onde existe um ponto triplo quântico (PTQ) com coordenadas  $(\alpha_t = 0.33 \pm 0.02, \lambda_t = 0.60 \pm 0.03)$ , onde abaixo existe uma transição contínua entre as fases CAF e AF, enquanto que, acima estas duas fases ordenadas (CAF e AF) são separadas por uma fase intermediária, magneticamente desordenada (LS), semelhante ao caso ideal do modelo  $J_1 - J_2$  na rede quadrada. Desta análise preliminar, este grupo, também, associaram que entre as fases CAF e LS, e entre

as fases AF e LS, temos uma transição de fase contínua. Na Fig.(3.9) temos os resultados obtidos por Bishop e colaboradores [43].

Os resultados discutidos acima estão claramente em conflitos, haja vista que discordam sobre a existência de um ponto triplo quântico. Um estudo experimental poderia *a priori* responder quais resultados citados acima se aproximam da realidade. No entanto, do ponto de vista experimental ainda não existe um estudo do diagrama de fase quântico ( $T=0$ ), bem como do valor da magnetização na transição de fase, impossibilitando assim uma prova experimental que encerre a discussão.

Motivados por estes resultados conflitantes do diagrama de fase do modelo  $J_1 - J'_1 - J_2$ , a seguir desenvolveremos a técnica do operador diferencial em aglomerado com dois spins. No limite ideal ( $\lambda = 1$ ) esta técnica foi aplicada, apresentando resultados satisfatórios, portanto, espera-se que para o caso anisotrópico  $\lambda \neq 1$  ela apresente resultados complementares aos já obtidos anteriormente.

### 3.2.2 Técnica do Operador Diferencial

O Hamiltoniano (3.1), classicamente, tem dois estados fundamentais, o estado Néel (AF) e os estados CAF coluna (CAF1) e linha (CAF2), com as seguintes energias por spin:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{AF} &= -J_1 - J'_1 - 2J_2 \\ \varepsilon_{CAF1} &= -J_1 + J'_1 - 2J_2 \\ \varepsilon_{CAF2} &= J_1 - J'_1 - 2J_2\end{aligned}\tag{3.3}$$

Considerando  $J'_1 < J_1$ , o mínimo de energia do estado CAF corresponde a energia CAF1, portanto, teremos um ponto de transição de primeira ordem em  $\alpha_c = \frac{\lambda}{2}$ , onde para  $\alpha > \alpha_c$  e  $\alpha < \alpha_c$  temos os estados clássicos Néel (AF) e colinear coluna. Neste trabalho usaremos a notação CAF para representar o estado colinear coluna, que é caracterizado por spins ordenados ferromagneticamente em colunas alternadas em direções opostas ao longo da direção horizontal. Neste caso anisotrópico ( $\lambda \neq 1$ ),

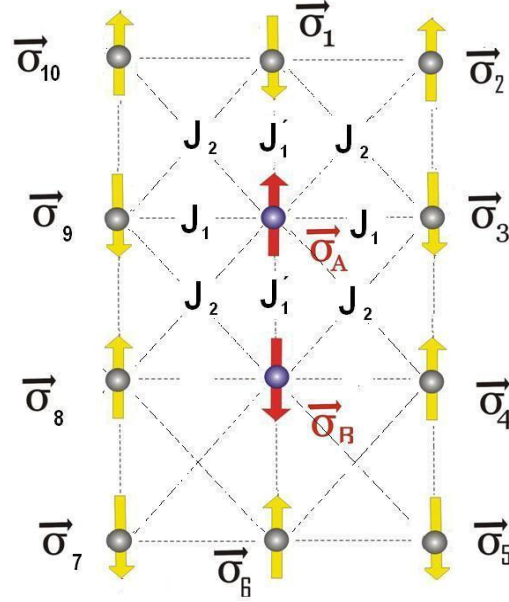


Figura 3.10: Condições de contorno da fase antiferromagnética

os dois estados colinear (CAF1 E CAF2) são energeticamente diferentes conforme mostra a Eq.(3.2). No limite ideal com  $\lambda = 1$  temos um estado duplamente degenerado, isto é, CAF1 e CAF2 apresentam mesma energia  $\varepsilon_{CAF} = -2J_2$ .

A seguir vamos aplicar a técnica do operador diferencial na teoria de campo efetivo em aglomerado com  $N = 2$  spins ( $\sigma_A$  e  $\sigma_B$ ).

### 3.2.3 Estado Antiferromagnético

Na Fig.(3.10) temos apresentado o aglomerado com dois spins na fase AF, o Hamiltoniano  $\mathcal{H}$  é então escrito na forma (aproximação axial):

$$\begin{aligned}
H &= J'_1 \vec{\sigma}_A \cdot \vec{\sigma}_B \\
&+ J'_1 \sigma_A^z \sigma_1^z + J_1 \sigma_A^z \sigma_9^z - + J_1 \sigma_A^z \sigma_3^z + J_2 \sigma_A^z \sigma_{10}^z \\
&+ J_2 \sigma_A^z \sigma_2^z + J_2 \sigma_A^z \sigma_8^z + J_2 \sigma_A^z \sigma_4^z \\
&+ J'_1 \sigma_B^z \sigma_6^z + J_1 \sigma_B^z \sigma_4^z + J_1 \sigma_B^z \sigma_8^z + J_2 \sigma_B^z \sigma_3^z \\
&+ J_2 \sigma_B^z \sigma_9^z + J_2 \sigma_B^z \sigma_5^z + J_2 \sigma_A^z \sigma_7^z
\end{aligned} \tag{3.4}$$

onde procurou-se destacar uma a uma as interações de troca entre os spins do aglomerado  $\Omega$  com a vizinhança, e o fato do par do spin  $\sigma_A$  e  $\sigma_B$  ser na vertical deve-se ao fato da mínima energia para  $J'_1 < J_1$  ( $\lambda < 1$ ).

Multiplicando ambos os lados de (3.4) pelo fator  $-\beta$ , podemos escrever,

$$-\beta\mathcal{H} = -K'_1\vec{\sigma}_A \cdot \vec{\sigma}_B - a\sigma_A^z - b\sigma_B^z, \quad (3.5)$$

onde  $a = K'_1\sigma_1^z + K_1(\sigma_9^z + \sigma_3^z) + K_2(\sigma_{10}^z + \sigma_2^z + \sigma_8^z + \sigma_4^z)$  (interações de  $\sigma_A^z$  com a sua vizinhança),  $b = K'_1\sigma_6^z + K_1(\sigma_4^z + \sigma_8^z) + K_2(\sigma_3^z + \sigma_9^z + \sigma_5^z + \sigma_7^z)$ , com  $K'_1 = \beta J'_1$ ,  $K_1 = \beta J_1$  (interações de  $\sigma_B^z$  com a vizinhança) e  $K_2 = \beta J_2$ .

A média da magnetização no sítio A é determinada pela Eq (2.8) ou (2.9) listadas abaixo:

$$\langle \sigma_A^z \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr}_A[\sigma_A^z e^{-\beta\mathcal{H}}]}{\text{Tr}_A[e^{-\beta\mathcal{H}}]} \right\rangle$$

ou

$$m_A = -\left\langle \frac{\partial \ln Z^{AF}}{\partial a} \right\rangle$$

onde  $Z^{AF}$  é a função de partição obtida através da diagonalização do Hamiltoniano (3.4). Note que o Hamiltoniano (3.4) é semelhante ao aspecto funcional do Hamiltoniano da Eq.(2.40), onde  $a_A$  está para  $a$ , assim como  $a_B$  está para  $b$  (a diferença está no desenvolvimento desses coeficientes, pois agora devemos levar em consideração os segundos vizinhos). Portanto, o Hamiltoniano (3.4) é semelhante (2.8), que mediante as devidas considerações são escritos na forma matricial

$$-\beta\mathcal{H} = \begin{bmatrix} -K'_1 - a - b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & K'_1 - a + b & -2K'_1 & 0 \\ 0 & -2K'_1 & K'_1 + a - b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -K'_1 + a + b \end{bmatrix}. \quad (3.6)$$

Esta matriz terá os mesmos auto valores (aspecto funcional) que a matriz (2.41). Sendo assim, o traço da sua forma diagonal dará origem a uma função de partição semelhante a (2.42), e dada por

$$Z^{AF} = e^{-K'_1} \cosh(a+b) + e^{K'_1} \cosh(W(a,b)), \quad (3.7)$$

onde  $W(a,b) = \sqrt{(a+b)^2 + 4K_1'^2}$ .

Substituindo  $Z_{AF}$  em (2.9) ficamos com a seguinte magnetização  $\langle \sigma_A \rangle = m_A$  na subrede A:

$$m_A = \left\langle \frac{\sinh(a+b) + \Gamma(a,b) \sinh(W(a,b))}{\cosh(a+b) + \Gamma(a,b) \cosh(W(a,b))} \right\rangle, \quad (3.8)$$

onde  $\Gamma(a,b) = e^{2K} \left( \frac{a-b}{W} \right)$ .

Utilizando a técnica do operador diferencial, Eq.(2.30), chegaremos a seguinte relação:

$$m_A = \langle e^{aD_x + bD_y} \rangle g(x,y)|_{x,y=0}, \quad (3.9)$$

onde  $g(x,y) = \frac{\sinh(x+y) + \Gamma(x,y) \sinh(W(x,y))}{\cosh(x+y) + \Gamma(x,y) \cosh(W(x,y))}$ .

Neste ponto devemos analisar melhor a média da exponencial acima, com o intuito de introduzir o parâmetro de frustração  $\alpha$  e o parâmetro de competição de cadeias lineares de spin  $\lambda$ . Para isso, vejamos que o termo exponencial pode ser tratado como:

$$\begin{aligned} m_A = & -\langle \exp [K'_1 \sigma_1^z + K_1(\sigma_9^z + \sigma_3^z) + K_2(\sigma_{10}^z + \sigma_2^z + \sigma_8^z + \sigma_4^z)] D_x \\ & \cdot \exp [K'_1 \sigma_6^z + K_1(\sigma_4^z + \sigma_8^z) + K_2(\sigma_3^z + \sigma_9^z + \sigma_5^z + \sigma_7^z)] D_y \rangle g(x,y)|_{x,y=0}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Observando a Fig.(3.6) notamos a presença de vizinhos em comum entre  $\sigma_A^z$  e  $\sigma_B^z$ , a saber, os vizinhos ( $\sigma_i^z$ )  $i = 8, 4, 9, 3$ . Os vizinhos comuns exigem um cuidado especial na hora de aplicar a identidade (2.17), ou seja,

$$m_A = -\langle \exp \left[ \frac{\lambda}{t} \sigma_1^z + \frac{\alpha}{t} (\sigma_{10}^z + \sigma_2^z) \right] D_x \exp \left[ \frac{\lambda}{t} \sigma_6^z + \frac{\alpha}{t} (\sigma_5^z + \sigma_7^z) \right] D_y \rangle \quad (3.11)$$

$$\cdot \exp \left[ \frac{(\lambda D_y + \alpha D_x)}{t} (\sigma_8^z + \sigma_4^z) \right] \exp \left[ \frac{(\lambda D_x + \alpha D_y)}{t} (\sigma_9^z + \sigma_3^z) \right] \rangle g(x, y)|_{x, y=0},$$

onde  $\lambda = \frac{J'_1}{J_1}$ ,  $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$  e  $t \equiv \frac{k_B T}{J_1}$ .

Aplicando a identidade  $e^{\pm \zeta \sigma_i^z} = \cosh(\zeta) \pm \sigma_i^z \sinh(\zeta)$  ficaremos

$$m_A = \left\langle \left( \cosh\left(\frac{\lambda D_x}{t}\right) + \sigma_1 \sinh\left(\frac{\lambda D_x}{t}\right) \right) \right. \quad (3.12)$$

$$\cdot \left( \cosh\left(\frac{\alpha D_x}{t}\right) + \sigma_{10}^z \sinh\left(\frac{\alpha D_x}{t}\right) \right)$$

$$\cdot \left( \cosh\left(\frac{\alpha D_x}{t}\right) + \sigma_2^z \sinh\left(\frac{\alpha D_x}{t}\right) \right)$$

$$\cdot \left( \cosh\left(\frac{\lambda D_y}{t}\right) + \sigma_6^z \sinh\left(\frac{\lambda D_y}{t}\right) \right)$$

$$\cdot \left( \cosh\left(\frac{\lambda D_y}{t}\right) - \sigma_5^z \sinh\left(\frac{\lambda D_y}{t}\right) \right)$$

$$\cdot \left( \cosh\left(\frac{\lambda D_y}{t}\right) - \sigma_7^z \sinh\left(\frac{\lambda D_y}{t}\right) \right) \quad (3.13)$$

$$\cdot \left( \cosh\left(\frac{(\lambda D_y + \alpha D_x)}{t}\right) + \sigma_8 \sinh\left(\frac{(\lambda D_y + \alpha D_x)}{t}\right) \right)$$

$$\cdot \left( \cosh\left(\frac{(\lambda D_y + \alpha D_x)}{t}\right) + \sigma_4^z \sinh\left(\frac{(\lambda D_y + \alpha D_x)}{t}\right) \right)$$

$$\cdot \left( \cosh\left(\frac{(\lambda D_x + \alpha D_y)}{t}\right) + \sigma_9^z \sinh\left(\frac{(\lambda D_x + \alpha D_y)}{t}\right) \right)$$

$$\cdot \left( \cosh\left(\frac{(\lambda D_x + \alpha D_y)}{t}\right) + \sigma_3^z \sinh\left(\frac{(\lambda D_x + \alpha D_y)}{t}\right) \right) \rangle g(x, y)|_{x, y=0}.$$

Considerando as condições de contorno da Fig.(3.6), a saber  $\langle \sigma_i \rangle = m_A = m$ ,  $i = 2, 4, 6, 8, 10$  e  $\langle \sigma_i \rangle = m_B = -m$ ,  $i = 1, 3, 5, 7, 9$ , e a aproximação RPA (2.20) ficaremos com a seguinte equação de estado para  $\langle m_A \rangle = m$ :

$$m = \left( \cosh\left(\frac{\lambda D_x}{t}\right) - m \sinh\left(\frac{\lambda D_x}{t}\right) \right) \quad (3.14)$$

$$\cdot \left( \cosh\left(\frac{\alpha D_x}{t}\right) + m \sinh\left(\frac{\alpha D_x}{t}\right) \right)^2$$



$$\begin{aligned}
& \cdot \left( \cosh\left(\frac{\lambda D_y}{t}\right) + m \operatorname{senh}\left(\frac{\lambda D_y}{t}\right) \right) \\
& \cdot \left( \cosh\left(\frac{\lambda D_y}{t}\right) - m \operatorname{senh}\left(\frac{\lambda D_y}{t}\right) \right)^2 \\
& \cdot \left( \cosh\left(\frac{(\lambda D_y + \alpha D_x)}{t}\right) + m \operatorname{senh}\left(\frac{(\lambda D_y + \alpha D_x)}{t}\right) \right)^2 \\
& \cdot \left( \cosh\left(\frac{(\lambda D_x + \alpha D_y)}{t}\right) - m \operatorname{senh}\left(\frac{(\lambda D_x + \alpha D_y)}{t}\right) \right)^2 g(x, y)|_{x,y=0}.
\end{aligned}$$

Por meio de auxílios computacionais(Maple) é possível escrever (3.14) na forma polinomial

$$m = A_1^{AF} m + A_3^{AF} m^3 A_5^{AF} m^5 + A_7^{AF} m^7 + A_9^{AF} m^9, \quad (3.15)$$

onde  $A_{r=1-9}^{AF}(\alpha, \lambda, t)$  são coeficientes dependentes dos parâmetros de frustração e competição entre cadeias de spin e da temperatura reduzida  $t$ . Temos obtido analiticamente estes coeficientes através de recurso do software MAPLE 11, e são demasiadamente grandes para serem expressos neste trabalho, são da ordem de  $10^3$  linhas

### Estado Colinear

Seguindo os mesmos procedimentos anteriores da fase AF, mais agora usando as condições de contorno:  $\langle \sigma_i \rangle = m_A = m_C$ ,  $i = 2, 3, 4, 5, 7, 8, 9, 10$  e  $\langle \sigma_i \rangle = -m_C$ ,  $i = 1, 6$ , a função de estado, para a subrede  $m_A$  será, portanto, dada por

$$m_C = A_1^C m_C + A_3^C m_C^3 + A_5^C m_C^5 + A_7^C m_C^7 + A_9^C m_C^9, \quad (3.16)$$

onde  $A_r^C(\alpha, \lambda, t)$  se refere aos coeficientes da fase colinear, que assim como os da fase AF, dependem dos parâmetros de frustração e competição entre cadeias de spin.

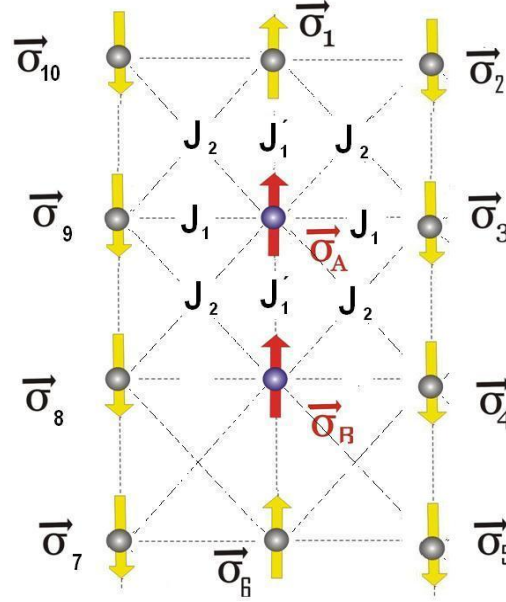


Figura 3.11: Condições de contorno da fase colinear

### 3.3 Funcional de Energia Livre

Termodinamicamente, a equação de estado Eq.(3.15) deve ser obtida a partir do processo de minimização de uma energia livre  $\Psi_{m\nu}$ , ou seja,

$$\frac{d\Psi}{dm} = 0. \quad (3.17)$$

A energia livre  $\Psi(m)$  é importante para uma análise mais precisa do tipo de transição de fase existente entre os estados AF e paramagnético (P)/colinear. A importância fica clara quando utilizamos a construção de Maxwell. Através da construção de Maxwell da Termodinâmica (igualdade entre as energias livres das fases envolvidas na transição de fase), podemos resolver, simultaneamente, a Eq.(3.15) com a expressão gerada pela imposição física sobre a linha de transição de fase.

$$\Psi^{AF}(m^{AF}) = \Psi^P(m^P = 0) \quad (3.18)$$

ou considerando a transição direta da fase AF para Coliner

$$\Psi^{AF}(m^{AF}) = \Psi^C(m^C) \quad (3.19)$$

Deste conjunto de duas equações poderemos obter a temperatura de transição como função do parâmetro de frustração  $\alpha$  e competição entre cadeias  $\lambda$ , ou seja,  $t_c(\alpha, \lambda)$ .

Se a transição de fase for de segunda ordem (contínua), o parâmetro de ordem magnética  $m$  se torna nulo quando a temperatura crítica  $T_c(\alpha, \lambda)$  for atingida. Por outro lado, caso  $m \neq 0$  teremos uma transição de fase de primeira ordem e o valor obtido  $m_c$  da solução numérica das Eqs.(3.15) e (3.18), corresponderá a descontinuidade da magnetização em  $T = T_c(\alpha, \lambda)$ .

Vamos propor então um funcional para a energia livre de tal forma que com base na equação de minimização (3.17) seja possível obter a equação de estado (3.15). Integrado a equação (3.17) obtemos:

$$\Psi(m_\nu, T, \alpha, \gamma) = \eta_1(\alpha, \lambda, T) + \eta_2(\alpha, \lambda, T) \left[ \frac{1}{2} m_\nu^2 - \sum_{p=0}^3 \frac{A_{2p+1}}{2p+2} m_\nu^{2p+2} \right], \quad (3.20)$$

onde  $\eta_{p=1,2}(\alpha, \lambda, T)$  é uma função arbitrária e irrelevante na análise da transição de fase, e  $m_\nu$  é a magnetização da fase em questão.

Igualando as energias livres das fases AF e P (construção de Maxwell), ficaremos com a seguinte expressão:

$$\sum_{p=0}^3 \frac{A_{2p+1}}{p+1} m^{2p} = 1. \quad (3.21)$$

Igualando as energias livres das fases AF e C (construção de Maxwell), ficaremos com a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} m_{AF}^2 - m_C^2 &= (A_1^{AF} m_{AF}^2 - A_1^C m_C^2) + \frac{1}{2} (A_3^{AF} m_{AF}^4 - A_3^C m_C^4) \\ &+ \frac{1}{3} (A_5^{AF} m_{AF}^6 - A_5^C m_C^6) + \frac{1}{4} (A_7^{AF} m_{AF}^8 - A_7^C m_C^8) \\ &+ \frac{1}{5} (A_9^{AF} m_{AF}^{10} - A_9^C m_C^{10}). \end{aligned} \quad (3.22)$$

As equações (3.21) e (3.22) devem ser resolvidas simultaneamente com a equações de estado (3.20) e (3.23) para determinamos os valores de  $T_c$ ,  $m_c$  sobre a linha de coexistência de fase.

### 3.3.1 Resultados

Com base nas equações de estados (3.20),(3.23) e nos funcionais de energia livre (3.28) (3.29), podemos resolver os seguintes sistemas de equações para a transição AF-Paramagnética e AF- colinear.

$$\begin{aligned} m^{AF} &= A_1^{AF} m_{AF} + A_3^{AF} m_{AF}^3 + A_5^{AF} m_{AF}^5 + A_7^{AF} m_{AF}^7 + A_9^{AF} m_{AF}^9 \quad (3.23) \\ 1 &= A_1^{AF} + A_3^{AF} \frac{m_{AF}^3}{2} + A_5^{AF} \frac{m_{AF}^4}{4} + A_7^{AF} \frac{m_{AF}^6}{6} + A_9^{AF} \frac{m_{AF}^8}{8} \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} m^{AF} &= A_1^{AF} m_{AF} + A_3^{AF} m_{AF}^3 + A_5^{AF} m_{AF}^5 + A_7^{AF} m_{AF}^7 + A_9^{AF} m_{AF}^9 \quad (3.24) \\ m^C &= A_1^C m_C + A_3^C m_C^3 + A_5^C m_C^5 + A_7^C m_C^7 + A_9^C m_C^9 \\ m_{AF}^2 - m_C^2 &= (A_1^{AF} m_{AF}^2 - A_1^C m_C^2) + \frac{1}{2}(A_3^{AF} m_{AF}^4 - A_3^C m_C^4) \\ &+ \frac{1}{3}(A_5^{AF} m_{AF}^6 - A_5^C m_C^6) + \frac{1}{4}(A_7^{AF} m_{AF}^8 - A_7^C m_C^8) \\ &+ \frac{1}{5}(A_9^{AF} m_{AF}^{10} - A_9^C m_C^{10}). \end{aligned}$$

Para resolver estes sistemas de equações, recorreremos a métodos numéricos para encontrar raízes (algoritmo de Newton-Rapson). O diagrama de fase é obtido em  $T = 0$ , portanto, por exemplo, no sistema de duas equações (3.30), terá 3 variáveis, a saber,  $\alpha$ ,  $\lambda$  e  $m_{AF}$ , enquanto para o sistema (3.31), além dessas, temos  $m_C$ . A metodologia empregada consistiu em variar o parâmetro  $\lambda$  no intervalo  $[0, 1]$ , e encontrar valores  $\alpha$ ,  $m_{AF}$  e  $m_C$  soluções dos sistemas. Os dois sistemas foram

resolvidos separadamente. Com os valores de  $\alpha$  e  $\lambda$  podemos montar o diagramas de fase.

O diagrama de fase apresentado a Fig.(3.12), a transição de fase entre os estados AF e PQ foi analisada através do comportamento do parâmetro de ordem  $m_{AF}$ . No limite  $m_{AF} \rightarrow 0$  encontramos uma linha crítica (segunda ordem) resolvendo a equação  $A_1^{AF} = 1$  em  $T = 0$ . Entre as fase AF-CAF e CAF-PQ as transições são de primeira ordem, caracterizada por uma descontinuidade no parâmetro de ordem. Todas as linhas emergem para um ponto triplo quântico (PTQ) com coordenadas  $(\alpha_t \simeq 0.31, \lambda_t \simeq 0.52)$ . Acima deste ponto temos o estado intermediário PQ, e abaixo este estado desordenado é destruído devido a redução da dimensionalidade (valor  $\lambda$ ) e o efeito de frustração (valor  $\alpha$ ), apresentando apenas uma transição direta (primeira ordem) entre as fases CAF e AF.

Por outro lado, analisando o sistema via construção de Maxwell temos observado uma transição de primeira ordem entre as fases AF e PQ, contraditório ao obtido na Fig.(3.12). Na Fig.(3.13) temos apresentado este novo resultado do diagrama de fase. Baseado no resultado na literatura no limite ideal  $\lambda = 1$ , onde a transição entre as fases AF e PQ é de segunda ordem, esperamos que o correto diagrama de fase encontrado por EFT-2 seja o apresentado na Fig.(3.12). Uma análise de estabilidade está impossibilitada através do funcional aqui proposto, por causa do não conhecimento dos parâmetros  $\eta_r$ . Um estudo preliminar em um aglomerado N=4 spins resolve esta ambiguidade de transição, mostrando ser realmente a transição de segunda ordem entre as fases AF e PQ.,

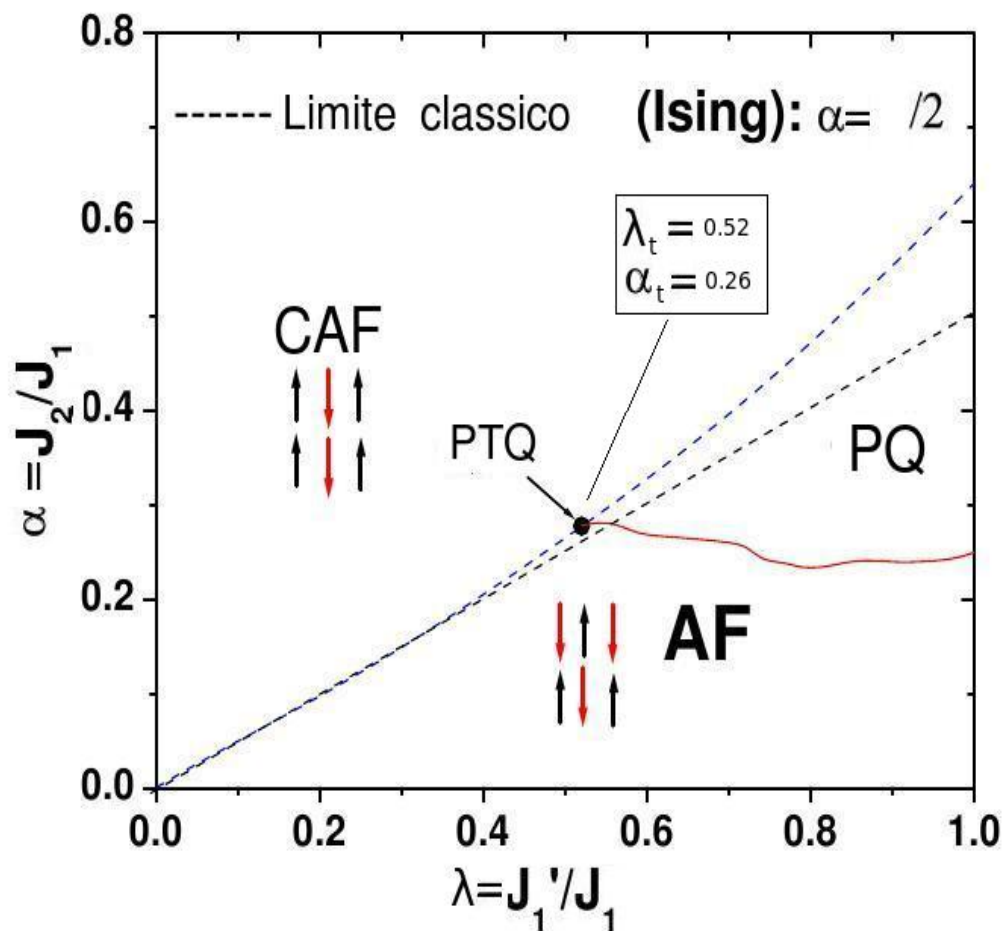


Figura 3.12: Diagrama de fase em  $T=0$  no plano  $\alpha - \lambda$  do modelo  $J_1 - J_1' - J_2$  na rede quadrada obtido por EFT-2 analisando a transição contínua entre as fases AF e PQ. As linhas tracejadas e contínua correspondem as transições de primeira a segunda ordem, respectivamente. As notações CAF, AF e PQ correspondem, respectivamente os estado colinear antiferromagnética coluna, antiferromagnética e paramagnética quântica, PTQ indica o ponto triplo quântico.

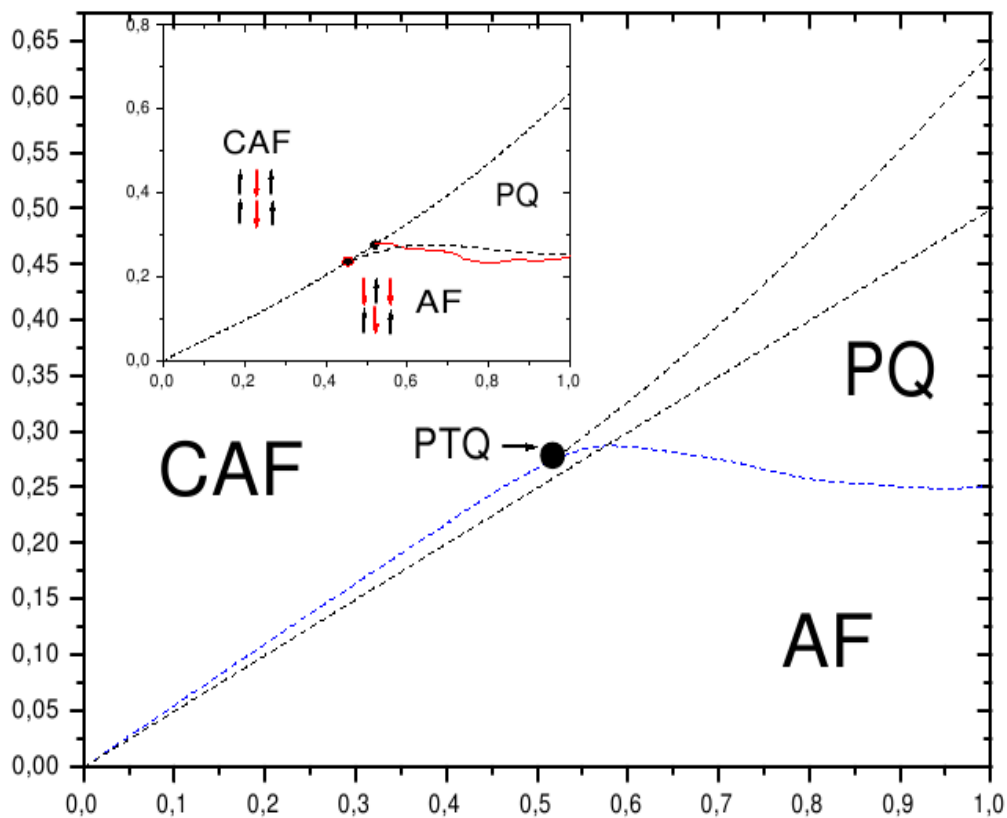


Figura 3.13: A figura do lado superior esquerdo corresponde a comparação da transição de fase entre AF-PQ obtida pelos dois métodos. As linhas tracejadas correspondem as transições de primeira ordem. As notações CAF, AF e PQ correspondem, respectivamente os estado colinear antiferromagnética coluna, antiferromagnética e paramagnética quântica, PTQ indica o ponto triplo quântico.

# Referências Bibliográficas

- [1] Thoulouse, G., *Commun. Phys.*, **2**, 115 (1977).
- [2] P. W. Anderson. The resonating valence bond state in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  and superconductivity. *Science*, 235, 11961198 (1987).
- [3] Enrique Eduardo Kaul, MAX-PLANCK INSTITUT FÜR CHEMISCHE PHYSIK FESTER STOFFE DRESDEN, 2005. Experimental Investigation of New Low-Dimensional Spin Systems in Vanadium Oxides
- [4] J. Robert Viana, Tese de Doutorado, DF-UFAM-2007. Transição de fase quântica e models de spins frustrados
- [5] P. Millet e C. Satto, *Mater. Res. Bull.*, **33**, 1339 (1998).
- [6] R. Melzi, P. Carreta, A. Lascialfar, M. Mambrini, M. Troyer, P. Millet e F. Mila, *Phys. Rev. Lett.*, 85, 1318 (2000).
- [7] P. Chandra e B Doucot, *Phys. Rev. B* **38**, 9335(1988)
- [8] L. P. Ioffe e A. I Larkin, *Mod. Phys. B* **2**, 203(1988)
- [9] J. Richter, N. B. Ivanov, e K. Retziaff, *Europhys. Lett.* **25**, 545(1994)
- [10] N. B. Ivanov e J. Richter, *J.Phys. Cond. Matter* **8**, 3785(1994)
- [11] R. R. P. Singh, Zheng Weihong, C. J. Hmer, e J. Oitmaa, *Phys Rev. B* **60**, 7278(1999)



- [12] L. Capriotti e S. Sorella, Phys. Rev. Lett. 84, 3173(2000)
- [13] L. Capriotti, A. Funbini, T. Roscilde, e V. Tognetti, Phys. Rev. Lett. **92**, 157202(2004)
- [14] C. Weber, F. Becca, e F. Mila, Phys. Rev. B **72**, 24449(2005)
- [15] L. Spanu e A. Parola, Phys. Rev. B **73**, 944427(2006)
- [16] R. Darradi, J. Richter e D. J. J. Farnell, Phys. Rev. **72**, 104425(2005)
- [17] J. Sirker, Zeng Weihong, O. O. Sushkov, e J. Oitmaa, Phys. Rev. B **73**, 184420(2006)
- [18] L. Isaev, G. Ortizi, e J. Dukelsky, Phys. Rev. B **79**, 024409 (2009)
- [19] J. Richter, Phys. Rev B **47**, 5794 (1993)
- [20] H. J. Schulz, T. A. L. Ziman, e D. Poilbane, J. Physique **1**, 6675 (1994)
- [21] R. F. Bishop, D. J. J. Farnell, e J. B. Parkinson, Phys. Rev B **58**, 6394 (1998)
- [22] R. Darradi, et al., Phys. Rev. B **78**, 214415(2008)
- [23] N. Read e S. Sachdev, Phys. Rev. Lett. **66**, 17773(1991)
- [24] J. I. Igarashi, J. Phys. Soc. Jpn. **62**, 4449(1993)
- [25] S. Moukouri, Phys. Let. A **352**, 256 (2006)
- [26] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **50**, 1153 (1983)
- [27] J.L. Morán-López, F. Aguilera-Granja, e UJ. M. Sanchez, Phys. Rev. B **48**, 3519(1993)
- [28] J. L. Moroe e S. Kim, Phys. Rev E **76**, 021123(2007)
- [29] A. Malakis, P. Kalozoumis, e N. Tyraskis, Eur. Phhys. J. B **50**, 63(2006)

- [30] A. Kalz, A. Honecker, S Fuchs, e T. Pruschker, J. Phys; conference series **145**, 012051(2009)
- [31] Rosana A. dos Anjos, J. Roberto Viana, e J. Ricardo de Sousa, Phys. Lett. A **372**, 1180(2008)
- [32] A. O. Hare, F. V. Kusmartsev, e K. I. Keigel, Phys. Rev. B **79**, 014439(2009)
- [33] U. Schollwock, J. Richter, D. J. J. Farnell, e R. F. Bishop, Quantum Magnetism, Lecture Notes in Physics, Vol 645 (Springer Berlin, 2004)
- [34] D. Schmalhub, J. Richter, e D. Ihle, Phys. Rev. B **70**, 184412(2004)
- [35] B. Canals e C. Lacroix, Pys. Rev. Lett. 80, 2933(1998)
- [36] J. Roberto Viana, J. Ricardo de Sousa, e M. A. Continentino, Phys. Rev. B **77**, 172412(2008). Os resultados do diagrama de fase são semelhantes ao caso do limite Ising (clássico) obtido pela mesma metodologia do operador diferencial por Rosana A. dos Anjos, J. Roberto Viana, J. Ricardo de Sousa, e J. A. Plascak, Phys. Rev. E **76**, 022103(2007)
- [37] R. Schmidt, J. Schulenberg, J. Richter, e D. D. Betts, Phys. Rev. B **66**, 224406
- [38] J. Otimaa e Zeng Weihong, Phys. B 69, 064416 (2002)
- [39] J. Roberto Viana e J. Ricardo de Sousa, Phys. Rev. B **75**, 052403(2007)
- [40] T. Roscilde, A. Feiguin, A l. Chernyshev, S. Liu, e S. Haas, Phys. Rev. Lett. **93**, 017203(2004)
- [41] R. Darradi, et al. Phys. Rev. B 78, 214415(2008)
- [42] D. J. J. Farnell, et al. J. Stat. Phys. **135**, 175 (2009)
- [43] R. F. Bishop, P.H.Y. Li, R. Darradi, J, chulenburg, e J. R. Richter, Phys. Rev. B **78**, 054412 (2008)

- [44] R. Darradi, et al. J Phys. Conferece Series **145**, 012049(2009)
- [45] D. Schmalfub, R Darradi, J. Richter, J. Schulenberg e D. Ihle, Phys. Rev. Lett. **97**, 15720(2006)
- [46] Wagner Nunes, J. Roberto viana, J. Ricardo de Sousa, e J. Richter, Phys. Rev. B (2009)-submetido.
- [47] R. Melzi, et al Phys. Rev. Lett. **85**, 1318(2000)
- [48] E. Pavarini, et al. Phys. Rev. B **77**, 014425(2008)
- [49] H. Kageyama, et al. J Phys. Soc. Jpn. **76**, 104703(2005)
- [50] M. Yoshida, et al., J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 104703(2007)
- [51] Alexande A. Tsirlin e Helge Rosner, Phys. Rev. B **79**, 214417(2009)
- [52] A.A. Nersesyanyan e A.M. Tsvelik, Phys. Rev. B **67**, 024422 (2003).
- [53] P. Sindzingre, Phys. Rev. B, 69, 094418 (2004)
- [54] O.A. Starykh e L. Balents, Phys. Rev. Lett. **93**, 127202 (2004).
- [55] R. Richter, J. Schulenburg, e A. Homecker, in Quantum Magnetism (Springer Kecture Notes inPhysics, 2004), vol.645, editado por U. Schollwock, J. Richter, D. J. J. Farnell, e R. F. Bisho (Berlin, Springer, 2004).
- [56] R. F. Bishop, Theor. Chim. Acta **80**, 95 (1991), ver também in Microscopic Quantum Many-Body Theories and Their Applications, editado por J. Navaro e A. Polls, Springer Lecture Notes in Physics, vol.510 (Berlin, Springer, 1998).

# Capítulo 4

## Considerações finais e Perspectivas Futuras

Nesta dissertação de mestrado desenvolvemos a técnica do operador diferencial via teoria de campo efetivo em aglomerado com  $N = 2$  spins para estudar a transição de fase quântica do modelo  $J_1 - J'_1 - J_2$  de spin  $1/2$  numa rede quadrada. Em  $T=0$ , o diagrama de fase foi obtido no plano  $\alpha - \lambda$ , onde  $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$ ,  $\lambda = \frac{J'_1}{J_1}$ ,  $J_1(J'_1)$  é a interação dos primeiros vizinhos na direção horizontal (vertical) e  $J_2$  é a interação dos segundos vizinhos. Escolhendo a região  $0 \leq \lambda \leq 1$ , duas fase ordenadas foram identificadas, nomeadas como antiferromagnética (AF) e colinear (CAF). Uma fase paramagnética quântica (PQ) foi também prevista no diagrama de fase, como um possível candidato ao estado líquido de spin (LS) que é caracterizado pela presença de estados singletos (dímeros, plaquetas,...) distribuídos aleatoriamente sobre a rede quadrada. Um possível parâmetro de ordem para o estado LS seria as funções de correlações entre os dímeros (ou plaquetas) no limite  $n \rightarrow \infty$ . As equações foram resolvidas numericamente (Algoritmo Newton-Rapson) via fortran, e resultaram num conjunto de soluções para os parâmetros de frustração e competição entre cadeias de spins.

No diagrama de fase ( $T = 0$ ) para o plano  $\alpha - \lambda$  temos três fases: AF, PQ e

CAF. Através da construção de Maxwell (igualdade entre as energias livre nas fases) e com as equações de estados identificamos as linhas de transições entre as fases AF-PQ (primeira ordem), AF-CAF (primeira ordem) e CAF-PQ (primeira ordem). Baseado no resultado de  $\lambda = 1$ , no qual a transição de fase AF-PQ é de segunda ordem, analisamos a equação de estado da fase AF e com o limite  $m_{AF \rightarrow 0}$  obtemos uma linha crítica resolvendo numericamente a equação não linear  $A_1^{AF}(\alpha, \lambda) = 1$ . As duas metodologias apresentam diferentes linhas entre as fases AF-PQ, mais o limite  $\lambda = 1$  (isotrópico) obtém o mesmo valor  $\alpha_{1c} \simeq 0.25$ . As linha de transição emergem para um triplo quântico (PTQ), no qual abaixo dele temos uma transição de primeira ordem entre as fases CAF e AF, e acima existe um estado desordenado intermediário (PQ). Nossos resultados discordam dos obtidos via diagonalização exata de rede  $N \leq 36$  ( $6 \times 6$ ), onde o estado PQ foi previsto para todo intervalo de  $\lambda \in [0, 1]$ . No caso da existência do PTQ, nossos resultados estão de acordo com o obtido recentemente através do método de cluster acoplado, sendo que este método prevê linhas de segunda ordem em todo o diagrama de fase, enquanto que neste presente trabalho temos observado linhas de primeira ordem entre as fases CAF-AF e CAF-PQ, que a priori é o resultado esperado se analisarmos o limite  $\lambda = 1$ .

A análise da estabilidade das transições de fase não é possível através do funcional da energia livre, uma vez que existem dois parâmetros desconhecidos, que impossibilita tal investigação. Resultados preliminares em aglomnerado com  $N=4$  spins tem eliminado esta ambiguidade em  $\lambda = 1$  no tipo de transição de fase entre CAF-PQ, mostrando claramente uma única transição contínua. Portanto, acreditamos que o resultado obtido neste trabalho para a linha de transição entre as fases AF e PQ, como sendo de segunda ordem, é a solução correta (mínima energia).

Como perspectivas futuras, e que estão em andamento de pesquisa no grupo liderado por de Sousa na UFAM, citamos:

1. Introduzir impurezas a fim de investigar a influência sobre o estado PQ;
2. Fazer uma análise de tamanho finito, para eliminar a ambiguidade de resulta-

dos na ordem da transição entre as fases AF e PQ;

3. Estudar este modelo  $J_1 - J'_1 - J_2$  com spin  $s = 1$  e investigar a possível existência de um ponto tricrítico no diagrama de fase, bem como a ausência do estado intermediário PQ, que foi recentemente analisado através dos métodos de cluster acoplado e grupo de renormalização (DMRG);
4. Analisar a influência da anisotropia de exchange.