SOBRE A TEORIA DAS
ONDAS DE SPIN

por

Antonio Augusto Souza Brito

Trabalho elaborado no Instituto de Física da Universidade de São Paulo, sob a orientação do Professor Walter Felipe Wreszinski. O financiamento coube à Universidade Federal da Paraíba e complementado pela CAPES/MEC. Apresentado como Tese de Doutorado ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Ciências.

São Paulo, 1984.

530.15

B 862 s

D

2x

FICHA CATALOGRÁFICA

Preparada pela Biblioteca do
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Brito, Antonio Augusto Souza
Sobre a teoria das ondas de spin. São
Paulo, 1984.

Tese (Doutoramento) - Universidade de
São Paulo. Instituto de Física. Departamen-
to de Física Matemática.

Orientador: Walter Felipe Wreszinsk

Área de concentração: Física das partícu-
las elementares.

Unitermos: 1. Ondas de spin. 2. Interação
dinâmica. 3. Interação cinemática. 4. Trans-
formação de Dyson. 5. Transformação de Hols-
tein-Primakoff.

USD/IE - R70/84

' Eu sustento que a única finalidade da Ciência está
em aliviar a miséria da existência humana.'

Berthold Brecht.

ã memória de
meu pai Orlando
e à luta de
minha mãe Ruth.

ao carinho e atenção
de Alba e Matra.

AGRADECIMENTOS

Ao Professor Walter Felipe Wreszinski pela orientação e dedicação fornecida, além da paciência demonstrada ao longo deste trabalho.

Aos colegas e amigos do Departamento de Física de Campina Grande da Universidade Federal da Paraíba, em particular aos Professores Joaquim de Oliveira Figueiredo e Menandro Silva Nascimento.

Aos colegas e amigos no Instituto de Física da Universidade de São Paulo, ou com passagem por ele, dentre os quais, em particular, Cesar Augusto Bonato, Radu Serban Jasinski e Nelson Fiedler Ferrari Júnior.

A Universidade Federal da Paraíba e à Coordenação de Aperfeiçoamento do Pessoal Docente do Ensino Superior do Ministério da Educação e Cultura CAPES/MEC, pelo apoio financeiro.

R E S U M O

O formalismo matemático da teoria das ondas de spin é analisado. A equivalência entre as transformações de Dyson-Maleev e Holstein-Primakoff é demonstrada. Os problemas envolvendo a interação cinemática são discutidos em detalhe. Uma nova divisão do Hamiltoniano de Heisenberg, desenvolvida no espaço de configuração, é usada para estudar a interação dinâmica entre as ondas de spin a baixa temperatura e para grandes valores do número quântico de spin S . Assumindo que a restrição cinemática pode ser negligenciada, a expansão da energia livre é desenvolvida em potências da temperatura e os resultados estão em acordo com os de Dyson. A relevância da aproximação diagonal de Mattis é demonstrada. Usando o método da positividade por reflexão, limites superiores e inferiores para a contribuição da energia livre são encontrados. Dentro de certa aproximação, estes limites significam que a interação dinâmica pode ser negligenciada caso o inverso da temperatura ($\beta = 1/KT$), e o número quântico de spin S , forem grandes o suficiente, porém com β dependente de S nestas estimativas. Este fato, que não ocorre no limite clássico, é uma característica na região das ondas de spin.

A B S T R A C T

The mathematical formalism of the spin wave theory is analysed. The thermodynamical equivalence between the Dyson-Maleev and Holstein-Primakoff transformations is proved. The problems involving the kinematical interaction are also discussed in detail. A new splitting of the Heisenberg Hamiltonian, performed in configuration space, is used to study the spin wave dynamical interaction at low temperature and for large values of the spin quantum number S . Assuming that the kinematical restriction may be lifted, a low temperature expansion of the free energy is developed with results in agreement with Dyson's. The relevance of the Mattis diagonal approximation for the dynamical interaction is demonstrated. Using the method of reflection positivity, upper and lower bounds to the contribution of the dynamical interaction to the free energy are provided. In a certain approximation, these bounds mean that the dynamical interaction may be dropped if the inverse temperature ($\beta = 1/KT$) and the spin quantum number S are large enough but β depends on S in the estimates, a novel feature which does not occur in the classical limit but is characteristic of the spin-wave limit.

Índice

Capítulo

1.	Introdução	1
2.	Formalismo Matemático das ondas de Spin	8
2.1.	O Modelo de Heisen <u>berg</u>	8
2.2.	O Espaço de Hilbert associado ao Hamil <u>toniano</u> de Heisenberg.....	9
2.3.	Mapeamento Bosônico.....	10
2.4.	Equivalência entre as transformações de Dy <u>son</u> e Holstein-Primakoff.....	17
3.	Descrição Bosônica do Hamil <u>toniano</u> de Heisenberg.....	20
3.1.	O estado fundamental do modelo de Heisenberg fer <u>romagnético</u>	20
3.2.	A estimativa de Dyson da Interação Cinemática.....	23
4.	Uma Divisão Natural do Hamil <u>toniano</u> de Heisenberg.....	28
5.	A Expansão em Cluster Quântica de Mayer para um sistema de magnons interagentes	34
5.1.	A Expansão em Cluster Quânti <u>ca</u> de Mayer	34
5.2.	Estimativa do coeficiente de virial para um sistema de magnons lívres	37

5.3. Cálculo do Segundo Coeficiente de Virial	39
6. A contribuição da interação dinâmica à energia livre	43
6.1. A energia livre	44
6.2. Um limitante superior para $ \bar{A} ^{-1} \langle H_{\lambda}^0 \rangle_{H_{\lambda}^k}$	47
6.3. Um limitante superior para $\langle P_i^+ P_j^- \rangle$ e $\langle P_i^{<4} \rangle$	50
6.4. Um limitante superior para $\langle P_{\lambda} \rangle_{H_{\lambda}^k}^{1/ \lambda }$ e $\langle P_{\lambda}^{<4} \rangle_{H_{\lambda}^k}^{1/ \lambda }$	53
7. Conclusão e Discussão	60
Apêndices	
A. Revisão Bibliográfica	64
B. Operadores de Spin	69
C. Cálculo de $\langle \kappa, \kappa' V \kappa, \kappa' \rangle$	72
D. Comentário a respeito do Teorema da Localização exponencial	75
E. Estimativa de d_1 e d_2	78
Referências	85

I. INTRODUÇÃO E RESUMO

" Passei o verão de 1955 tentando compor uma descrição exata das ondas de spin. É simples descrever um imã como um conjunto de átomos interagentes. É simples verificar suas propriedades a través de um conjunto de ondas de spin. O difícil é juntar es sas figuras parciais em um es quema coerente. "

F.J. Dyson.

O modelo de Heisenberg de sistemas ferromagnéticos foi, ao longo do tempo, não só um poderoso meio de interpretação das propriedades experimentais de diversos cristais ferromagnéticos isolantes como uma rica fonte de estudos e problemas da física teórica. Mesmo uma classe limitada de proprieda-

des do modelo, a saber as excitações do seu estado fundamental ou as ondas de spin, constitui um instrumento teórico importante na descrição do modelo à baixa temperatura, além de prever os resultados experimentais da magnetização espontânea, $M(T)$.

É surpreendente observar como a análise teórica das ondas de spin, tal como desenvolvida por Bloch (1930) na década de 30, em um modelo simples como a cadeia linear de spin $1/2$ e na aproximação de pequenos momentos, pôde prever uma expressão para a magnetização espontânea: $M(T)/M(0) = 1 - aT^{3/2}$, com $a > 0$, próxima dos resultados experimentais para uma larga faixa de temperatura ($0 \leq T \leq 0.5T_c$), ver por exemplo Miedema, Wierlinga e Huiskamp (1965).

A princípio os resultados observados experimentalmente em amostras de Fe e Ni não eram conclusivos, ver por exemplo Fallot (1936). Contudo a partir da década de 50, com o avanço das técnicas experimentais, a concordância entre a denominada lei $T^{3/2}$ da magnetização espontânea e os resultados experimentais é um acúmulo de sucessos, como bem atesta a excelente revisão de Keffer (1966).

Desta constatação emerge uma questão natural, que estará subjacente ao longo deste trabalho: Como uma teoria aproximada, como a de Bloch (1930), consegue prever resultados experimentais tão precisamente? Esta atraente questão instigou um grande número de físicos teóricos a deterem-se no assunto que é um desafio até os dias de hoje.

O método de Bloch (1930) foi generalizado para modelos de spin qualquer por Møller (1933), pouco acrescentando porém à compreensão teórica do problema. Holstein e Primakoff em 1940 foram os primeiros a construir um formalismo matemático coerente, relacionando os operadores quânticos de spin e os operadores bosônicos. A contribuição advinda da interação dipolar entre os spins foi por eles analisada dentro de uma aproximação de amplo uso até hoje, denominada transformação de Holstein-Primakoff "linearizada".

Em meados da década de 50 existia uma série de resultados discrepantes a respeito da ordem da contribuição na expan

são da magnetização espontânea em potências da temperatura devido a interação entre as ondas de spin. Kramers (1936) e Opechowski (1937) estimavam uma contribuição da ordem de T^2 . Entretanto Schafroth (1954) usando o formalismo de Holstein-Primakoff encontrava um termo da ordem de $T^{7/4}$ com uma correção positiva, ao passo que Van Kranendonk (1955) usando um outro método obteve um termo de mesma ordem porém com um coeficiente diverso. A existência destas contradições foi o ponto de partida para o trabalho de Dyson (1956a) e (1956b)[§] que se tornou um paradigma para futuras pesquisas.

O trabalho de Dyson I e II, é um marco na teoria de ondas de spin e todos os trabalhos posteriores o têm como referência principal. É forçoso notar que esta transcendental contribuição não foi objeto, no seu todo, de uma análise cuidadosa até então, quer em trabalhos de revisão, quer em livros sobre o assunto, com a exceção de Akhiezer e col. (1968) que refaz os passos de Dyson "ipsis literis" e de Wortis (1965). Todas as contribuições posteriores, por nós conhecidas, referem-se à Dyson I, II - como um método "matematicamente rigoroso" sem adentrar-se nos meandros do seu desenvolvimento. Este trabalho será, em parte, destinado a preencher na medida do possível esta lacuna.

Dyson I, II considera a transformação de Holstein-Primakoff (1940) inadequada para um tratamento rigoroso das ondas de spin, em contraposição, constroi uma outra transformação conhecida como transformação de Dyson-Maleev, devido ao desenvolvimento, independente de Dyson, feito por Maleev (1957). Esta transformação evita o incômodo da não linearidade do mapeamento de Holstein-Primakoff, contudo tem o inconveniente de não preservar a Hermiticidade do Hamiltoniano. Dyson I, II analisa o efeito de duas interações distintas entre as ondas de spin: (i) a interação dinâmica e (ii) interação cinemática. A primeira seria resultante de termos quárticos que se sobrepõem ao Hamiltoniano de ondas de spin (ou magnons) livres e pode ser interpretada como uma interação do tipo espalhamento entre magnons, ao passo que a segunda é intrínseca ao formalismo matemático e advém da limitação do número de excitações por sítio da rede por 2S na formulação de operadores de spin, ao passo que é ilimita-

[§] Daqui para frente designaremos Dyson (1956a) e (1956b) por Dyson I e II respectivamente.

do na descrição bosônica.

O resultado obtido por Dyson I e II, pode ser melhor compreendido a partir das respostas a duas questões:

- a) O Hamiltoniano de Heisenberg pode ser descrito de modo aproximado como um sistema de bosons interagentes?
- b) Em caso afirmativo, qual seria a contribuição a ser acrescentada às propriedades de magnons livres devido a interação entre eles?

A interação cinemática esta associada à primeira questão e Dyson I conclui que seu efeito é exponencialmente pequeno à baixa temperatura. A interação dinâmica está associada à segunda questão e sua contribuição à correção da magnetização espontânea do sistema de magnons livres é da ordem de T^4 na temperatura, S^{-1} na magnitude de spin e negativa, dirimindo as contradições existentes até então.

Os trabalhos posteriores à Dyson I,II, podem ser classificados quanto aos objetivos em: (i) refazer os passos de Dyson, Keffer (1966) e Akhiezer e col. (1968); (ii) discutir as deficiências existentes em Dyson, Szanielski (1962) e (1963), Dembinski (1964), Hepp (1972), Oguchi (1960), Wortis (1965) e Loly (1970); (iii) estender o método de Dyson a outros modelos, Greenberg (1963), Kenan (1967), Škrinjar e col. (1981) e Brito (1982) e (iv) analisar outros aspectos da interação entre magnons Fernando Perez (1973) e Wortis (1963). Seria por demasiado extenso descrever, nesta introdução, mesmo de modo resumido, os resultados destes trabalhos. Por outro lado muito seria perdido caso fossem omitidas estas contribuições. A solução encontrada foi destinar o Apêndice A para resumir os resultados posteriores ao trabalho de Dyson I,II.

Este trabalho procura esclarecer a estrutura matemática do formalismo de Dyson I,II dentro de um quadro o mais amplo possível. No Capítulo 2, mostramos um ponto importante: as funções de partição correspondentes aos Hamiltoniano de Dyson e de Holstein-Primakoff são iguais, ou seja, as duas transformações (de Dyson e Holstein-Primakoff) são termodinamicamente equivalentes. Este fato justifica o uso do Hamiltoniano de Dy-

son, mais conveniente em cálculos explícitos, nos Capítulos 4 e 5.

O conhecimento do estado fundamental, e o uso do Hamiltoniano físico, isto é, positivo (após a subtração da energia do estado fundamental) é essencial para a construção da teoria das ondas de spin. Na Secção 3.1 analisamos os estados fundamentais de uma classe de Hamiltonianos ferromagnéticos quânticos num domínio limitado, e mostramos que há apenas dois estados fundamentais com condições de contorno livre ou periódicas, como corolário de uma desigualdade ("de dominação clássica"). Mostramos também como entender este resultado apesar da simetria rotacional no caso isotrópico, bem como analisamos as diversas maneiras (campo magnético externo, anisotropia, condição de contorno (+)) de elevar a degenerescência.

As limitações envolvidas na descrição bosônica do Hamiltoniano de Heisenberg são então discutidas. Na Secção 3.2, mostramos que o argumento utilizado por Dyson para negligenciar a interação cinemática é incorreto.

O desenvolvimento de Dyson I, II, possui dois inconvenientes dispensáveis. O uso do espaço dos momentos para a maioria das considerações, o que torna ambígua a própria distinção entre interação cinemática e dinâmica, como apontaram Wortis (1965) e Walker (1963). O outro é a introdução de uma interação extra que, como observa Wortis (1965), introduz dificuldades maiores que as existentes a princípio. O Capítulo 4 contorna estas dificuldades ao realizar o mesmo desenvolvimento inteiramente no espaço de configuração além de sugerir uma nova divisão do Hamiltoniano de Heisenberg, particularmente apropriada à descrição das ondas de spin.

Supondo a omissão da restrição cinemática, é possível tratar o modelo de magnons interagentes através da usual expansão quântica de Mayer tal como está desenvolvido no Capítulo 5. O resultado principal deste Capítulo reside na estimativa do segundo coeficiente de virial na Secção 5.3. Com isto a contribuição da interação dinâmica pode ser avaliada diretamente e está, em essência, de acordo com o resultado original de Dyson. O Capítulo 4 e o Capítulo 5 detalham os resultados a-

presentados no trabalho Brito, Wreszinski (1984).

Um resultado inesperado obtido na Secção 5.3, mas não menos importante, foi justificar a aproximação de Mattis (1981) para a descrição da interação dinâmica.

Como a restrição cinemática é um problema insolúvel e intrínseco à descrição do Hamiltoniano de Heisenberg através de operadores bosônicos, uma importante questão da teoria das ondas de spin não encontra uma resposta satisfatória: Para que valores de temperatura e magnitude de spin a interação dinâmica é desprezível? Alguns resultados parciais pertinentes a esta questão são apresentados no Capítulo 6, onde uma divisão do Hamiltoniano em partes cinemática e dinâmica diferente da utilizada nos Capítulos 4 e 5 é introduzida. Mostramos, com esta divisão, que a contribuição da interação dinâmica à energia livre é desprezível no limite de baixas temperaturas e valores elevados do número quântico de spin S . Em contraste com o limite clássico, Stanley (1974), em que os operadores de spin são divididos por S e não $S^{1/2}$, não se obtém uma estimativa uniforme em S , (Teorema 6.1) mas o limite superior para o valor esperado (positivo) da interação dinâmica tende a zero quando a temperatura inversa β ($1/kT$) e S tendem ao infinito, mas com β dependente de S . Este é o fato novo interessante, que parece indicar que a expansão a baixas temperaturas para a energia livre é uma série assintótica (não convergente) em um parâmetro que é uma função de β e S , cuja forma é sugerida pelo Teorema 6.1.

Duas dificuldades existem nas demonstrações acima referidas: O fator de anisotropia α é considerado estritamente menor que 1 ($\alpha < 1$) ao passo que o interesse principal reside em procurar estimativas no limite $\alpha = 1$. Esta dificuldade está relacionada aos problemas discutidos na Secção 3.2. Em segundo, mesmo com esta hipótese, há uma suposição técnica a ser discutida no Capítulo 6. Embora aceitável para modelos com magnitude de spin grande ($S \gg 1$), tal suposição é de demonstração rigorosa difícil e permanece como um desafio em aberto, como será discutida no Capítulo 6.

Os métodos matemáticos utilizados no Capítulo 6 foram

desenvolvidos por Fröhlich e Lieb (1978) e se baseiam na positividade por reflexão e na localização exponencial que serão vistos no mesmo Capítulo e no Apêndice D. Os resultados principais deste Capítulo encontram-se no trabalho: Van Hemmen, Brito e Wreszinski (1983).

2. FORMALISMO MATEMÁTICO DAS ONDAS DE SPIN

A idéia central do formalismo das ondas de spin consiste em descrever as propriedades do modelo de Heisenberg ferromagnético a baixas temperaturas através de excitações bosônicas denominadas ondas de spin ou magnons.

O Hamiltoniano de Heisenberg é uma função de operadores de momento angular ($\vec{S}$), no espaço de Hilbert $\mathcal{H} = \bigotimes_{i \in \Lambda} \mathbb{C}_i^{(2S+1)}$. Por outro lado, as ondas de spin são descritas como função de operadores bosônicos de criação ($a^\dagger$) e aniquilação (a) no espaço de Fock construído através da segunda quantização. Como descrever o Hamiltoniano de Heisenberg na representação bosônica? Este Capítulo restringir-se-á a analisar como um operador descrito como função de operadores de momento angular pode vir a ser representado no espaço bosônico.

Na Secção 2.1 será definido o modelo de Heisenberg - ferromagnético. Usando as propriedades dos operadores de momento angular será definido na Secção 2.2 o espaço de Hilbert do Hamiltoniano de Heisenberg.

Como uma função de operadores de momento angular pode ser transformado em uma nova função de operadores bosônicos? - Veremos na Secção 2.3 que existem três tipos de transformações distintas. Estas transformações foram analisadas primeiramente por Dembinski (1964), ao passo que a notação aqui utilizada foi introduzida por Herbert (1969). Verifica-se que estas transformações estão relacionadas entre si através de uma transformação de semelhança e isto será usado na demonstração da equivalência entre elas, do ponto de vista termodinâmico, na Secção 2.4.

2.1 O Modelo de Heisenberg

Considere Λ um domínio finito na rede hipercúbica $\mathbb{R}^v$,

$\sim$: dimensão espacial, em cada sítio está associada uma variável de spin $\vec{S}$ (vetor), cuja interação será descrita pelo Hamiltoniano: (ver Keffer (1966) para uma discussão detalhada sobre o modelo):

$$H = - \frac{1}{2S} \sum_{i,j \in \Lambda} \left[J_{ij}^{\parallel} (S_i^z S_j^z - S^2) + J_{ij}^{\perp} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) \right] + h \sum_{i \in \Lambda} (S + S_i^z). \quad (2.1)$$

onde $\vec{S}_i$ e $\vec{S}_j$, representam as variáveis de Spin nos sítios i, j ,

e a constante de troca (exchange) é definida como:

$$J_{ij}^{\#} = J_{ji}^{\#} > 0 \quad \text{para } i, j \text{ vizinhos mais próximos.}$$

$$J_{ij} = 0 \quad \text{de outro modo} \quad (2.2)$$

e as variáveis de spin obedecem as regras usuais de comutação:

$$\left[S_i^z, S_j^{\pm} \right] = \pm \delta_{ij} S_i^{\pm} \quad \text{e} \quad \left[S_i^{\pm}, S_j^{\mp} \right] = \delta_{ij} 2 S_i^z \quad (2.3)$$

onde $S_i^{\pm} = S_i^x \pm i S_i^y$ e h é um termo proporcional ao campo magnético externo na direção do eixo z .

O Hamiltoniano (2.1) representa um modelo com isotropia de espaço (o acoplamento de exchange independe das posições relativas de i e j no espaço) embora possua uma anisotropia na interação de spin, com $J^{\parallel}$ (acoplamento da componente z de $\vec{S}$) e $J^{\perp}$ (acoplamento das componentes no plano XY) distintos.

2.2 O Espaço de Hilbert Associado ao Hamiltoniano de Heisenberg.

O espaço de Hilbert associado a H (2.1) é o produto tensorial:

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{i \in \Lambda} \mathbb{C}_i^{(2S+1)} \quad (2.4)$$

Este espaço pode ser gerado pela ação de S_i^+ no estado de vácuo $|0\rangle$ e:

$$|n\rangle \equiv \prod_{i \in \Lambda} (S_i^+)^{m_i} |0\rangle, \quad S_i^- |0\rangle = 0, \quad i \in \Lambda \text{ qualquer} \quad (2.5)$$

com $m_i = 0, 1, \dots, 2S$. e $N \equiv \sum_{i \in \Lambda} m_i \leq 2S|\Lambda|$. Os estados constituem uma base ortogonal. Para um único sítio i , seja:

$$|n_i\rangle = (2S n_i!)^{-1/2} (S_i^+)^{n_i} |0_i\rangle \quad (2.6)$$

o estado com n_i desvios de spin do estado fundamental no sítio i .

Os vetores $|n_i\rangle$ de (2.6) formam uma base no espaço de Hilbert (2.4) através do produto tensorial porém eles não são ortogonais, pois, do Apêndice B, verifica-se que:

$$\langle n_i | m_j \rangle = F(n_i) \cdot \delta_{ij} \cdot \delta_{n_i m_i} \quad (2.7)$$

onde

$$F(n) = \prod_{k=1}^{n-1} f(k) \quad f(k) = 1 - k/(2S) \quad (2.8)$$

Uma propriedade importante do Hamiltoniano de Heisenberg é o fato de que o operador número

$$N = \sum_i n_i, \quad n_i = S_i^z + S \quad (2.9)$$

comuta com o Hamiltoniano de Heisenberg $[N, H] = 0$.. (ver demonstração no Apêndice B) e o espaço de Hilbert a ele associado pode ser separado em setores ortogonais de n - magnons:

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_n \quad N \mathcal{H}_n = n \mathcal{H}_n \quad (2.10)$$

e a análise espectral de H pode ser realizada em cada setor separadamente, como será visto no Capítulo 5.

2.3 Mapeamento Bosônico

Vamos verificar como o espaço de Hilbert (2.4) pode ser mapeado no espaço de Fock na rede (ver por exemplo Reed e Simon (1980), pg.302),

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} S_n \mathcal{H}_n \quad \text{com} \quad \mathcal{H}_n = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_n \quad (2.11)$$

onde S_n é o subspaço das funções invariantes pela comutação. Para fixar idéias podemos considerar $\mathcal{H} = L^2(R)$ e $\mathcal{H}_n = L^2(R^n)$. Os operadores de criação e aniquilação (a_i^+ e a_i) podem ser definidos em cada ponto da rede i e obedecem às regras usuais de comutação bosônica, com um estado de vácuo bem definido, (para maiores detalhes ver por exemplo Messiah (1960), Cap. XII, Sec. I):

$$\begin{aligned} [a_i^+, a_j^+] = [a_i, a_j] = 0, \quad \forall i, j \text{ e } [a_i, a_j^+] = \delta_{ij} \\ n_i = a_i^+ \cdot a_i \geq 0 \quad (o_i | o_i) = 1 \text{ e } a_i | o_i = 0 \end{aligned} \quad (2.12)$$

e $(n_i | m_j) = \delta_{ij} \cdot \delta_{n_i m_i}$ com $|n_i\rangle = (n_i!)^{-1/2} \cdot (a_i^\dagger)^{n_i} |0_i\rangle$
 Seguindo o exemplo de Dyson I, reservamos a notação $|\cdot\rangle$ para descrever os estados relacionados ao formalismo de spin e $|\cdot\rangle$ para descrever os estados relacionados ao formalismo de bosons.

O mapeamento do espaço de Hilbert dos spins no espaço de Hilbert dos bosons deve levar em conta que:

(i) Os operadores de spin são limitados, portanto

$$n_i = S_i^z + S \leq 2S$$

(ii) Os estados que geram o espaço de Hilbert dos operadores de spin (2.4) não são ortonormais (2.7).

Podemos definir o operador métrico F no espaço bosônico de modo a satisfazer estas duas exigências que restringe o espaço de Fock à um subespaço $\mathcal{F}_S$, cujos elementos de matriz são:

$$(n_i | F_{n_i} | m_j) = \begin{cases} F(n_i) \cdot \delta_{ij} & \text{se } 0 \leq n_i \leq 2S. \\ 0 & \text{de outro modo} \end{cases}$$

(2.13)

e o operador F é Hermitiano, pois:

$$\begin{aligned} \langle n_i | n_i \rangle &\equiv (n_i | F_{n_i} | n_i) \\ (n_i | F_{n_i}^\dagger | n_j) &= \overline{(n_i | F_{n_i} | n_i)} = \langle n_i | n_i \rangle = \langle n_i | n_i \rangle = (n_i | F_{n_i} | n_j) \end{aligned}$$

(2.14)

e
$$F_{n_i}^\dagger = F_{n_j}$$

(2.15)

O operador métrico (2.13) define completamente o mapeamento entre as duas representações, uma vez que estabelece uma métrica no novo espaço de Hilbert restrito.

Uma vez estabelecida a métrica, os operadores no espaço de spin podem ser mapeados no espaço bosônico de modo que os elementos de matriz sejam equivalentes nas duas representações. O operador $\hat{O}$ como função de variáveis de spin corresponderá ao operador $\hat{O}$ como função de operadores de bosons através da trans-

$$\text{formação}^{\S}: \mathcal{O}(s^x, s^y, s^z) \xrightarrow{F} \hat{\mathcal{O}}(a^+, a) \quad (2.16)$$

Esta transformação não é única, pois existem três diferentes representações equivalentes, Dembinski (1964):

i. Transformação de Dyson

$$\langle n | \mathcal{O} | m \rangle = \langle n | F_n; \hat{\mathcal{O}}^D | m \rangle \quad (2.17a)$$

ii. Transformação de Dyson conjugada

$$\langle n | \mathcal{O} | m \rangle = \langle n | \hat{\mathcal{O}}^{DC} F_n | m \rangle \quad (2.17b)$$

iii. Transformação de Holstein-Primakoff

$$\langle n | \mathcal{O} | m \rangle = \langle n | F_n^{1/2} \hat{\mathcal{O}}^{HP} F_n^{1/2} | m \rangle \quad (2.17c)$$

De (2.17), vemos que existem três representações distintas de $\hat{\mathcal{O}}^D(a^+, a)$ cuja ação é equivalente à um mesmo operador $\mathcal{O}(s)$ nas variáveis de spin (fornecem o mesmo elemento de matriz).

Um dos inconvenientes da Transformação de Dyson, ou de Dyson conjugada, é que um operador Hermitiano $\mathcal{O}(s^x, s^y, s^z)$ pode ser transformado em um operador não Hermitiano $\hat{\mathcal{O}}^D(a^+, a)$. Por exemplo, considere $\mathcal{O} = \mathcal{O}^+$ Hermitiano e,

$$\langle n | F \hat{\mathcal{O}}^D | n \rangle = \langle n | \mathcal{O} | n \rangle = \langle n | \mathcal{O}^+ | n \rangle = \langle n | (F \hat{\mathcal{O}}^D)^+ | n \rangle \quad (2.18)$$

portanto

$$F \hat{\mathcal{O}}^D = (\hat{\mathcal{O}}^D)^+ F \quad \text{e} \quad \hat{\mathcal{O}}^D = (\hat{\mathcal{O}}^D)^+ \iff [\hat{\mathcal{O}}^D, F] = 0 \quad (2.19)$$

deste modo, mesmo que $\mathcal{O}$ seja Hermitiano, $\hat{\mathcal{O}}$ não o será, necessariamente, à menos que (2.19) seja satisfeita.

A transformação de Holstein-Primakoff preserva a Hermiticidade, pois:

$$F^+ = F \geq 0 \quad (2.20)$$

e $F^{1/2}$ está definido e é Hermitiano, usando $(A.B)^+ = B^+.A^+$ de Messiah (1960), têm-se:

$$\langle n | \mathcal{O} | n \rangle = \langle n | \mathcal{O}^+ | n \rangle = \langle n | F^{1/2} \hat{\mathcal{O}}^{HP} F^{1/2} | n \rangle = \langle n | (F_n^{1/2} \hat{\mathcal{O}}^{HP} F_n^{1/2})^+ | n \rangle$$

$$\text{e} \quad \mathcal{O} = \mathcal{O}^+ \iff \hat{\mathcal{O}}^{HP} = (\hat{\mathcal{O}}^{HP})^+ \quad (2.21)$$

O operador número de desvio descrito em (2.9) têm um correspondente bosônico simples:

$$n = S^z + S \longrightarrow \hat{n}_S \quad (2.22)$$

o índice s serve para indicar que $\hat{n}_s$ não é o operador número u-

[§] Todos os operadores estão relacionados a um único sítio i, cujo índice será omitido de modo a não sobrecarregar a notação.

sua (2.12) pois:

$$\tilde{n}_S |n\rangle = \begin{cases} n |n\rangle & 0 \leq n \leq 2S \\ 0 & n > 2S \end{cases} \quad (2.23)$$

O estado de vácuo está bem definido nas duas representações:

$$(S + S^z) |0\rangle = 0 \quad \tilde{n}_S |0\rangle = 0 \quad (2.24)$$

e além disto temos que: $[F, \hat{n}] = 0$ (2.25)
pois:

$$(n_i | [F, \tilde{n}_S] | m_j) = m_j \delta_{n_i, n_j} \delta_{ij} F(n_i) - n_i \delta_{n_i, n_j} \delta_{ij} F(m_j) = 0 \quad (2.26)$$

A propriedade (2.35) mostra que não só $\tilde{n}_S$ é Hermitiano, haja visto (2.19), bem como que o operador número de desvio tem uma representação única, qualquer que seja a transformação utilizada., pois usando (2.25), verifica-se que:

$$(n | F \tilde{n}_S | m) = (n | \tilde{n}_S F | m) = (n | F^{1/2} \tilde{n}_S F^{1/2} | m) \quad (2.27)$$

A propriedade (2.25) simplifica em muito a representação da componente S^z e qualquer função exclusiva desta variável. Por outro lado, é evidente que $[a^\dagger, F] \neq 0$ logo é necessário analisar separadamente como S^+ e S^- são transformados em operadores bosônicos em cada uma das transformações.

Das propriedades dos operadores de momento angular, verifica-se que (ver apêndice B):

$$\frac{S^+}{\sqrt{2S}} |n\rangle = f_s^{1/2} (n) \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (2.28)$$

e

$$\frac{S^-}{\sqrt{2S}} |n\rangle = f_s^{1/2} (n) \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (2.29)$$

com

$$f_S(n) = \begin{cases} 1 - n/2S & \text{caso } n=0, 1, \dots, 2S. \\ 0 & \text{caso } n \geq 2S + 1. \end{cases} \quad (2.30)$$

Os operadores bosônicos de criação e aniquilação atuando num estado $|n\rangle$, são (ver Messiah (1960):

$$a^+ |n\rangle = (n+1)^{1/2} |n+1\rangle \quad (2.31)$$

e

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (2.32)$$

As propriedades (2.28) - (2.32) e as transformações - (2.17) permite-nos traçar um mapeamento entre $S^\#$ e $a^\#$ da seguinte forma:

i. Transformação Dyson:

$$|n\rangle \longrightarrow |n\rangle \quad \text{e} \quad \langle n| \longrightarrow \langle n| F \quad (2.33a)$$

$$s^+/\sqrt{2S} \longrightarrow a_s^+ \quad (2.34a)$$

$$s^-/\sqrt{2S} \longrightarrow f(n_s) a_s \quad (2.35a)$$

$$s^z \longrightarrow -S + n_s \quad (2.36a)$$

ii. Transformação Dyson-conjugada:

$$|n\rangle \longrightarrow |F|n\rangle \quad \text{e} \quad \langle n| \longrightarrow \langle n| \quad (2.33b)$$

$$s^+/\sqrt{2S} \longrightarrow a_s^+ f(n_s) \quad (2.34b)$$

$$s^-/\sqrt{2S} \longrightarrow a_s \quad (2.35b)$$

$$s^z \longrightarrow -S + n_s \quad (2.36b)$$

iii. Transformação Holstein-Primakoff.

$$|n\rangle \longrightarrow |F|^{1/2} |n\rangle \quad \text{e} \quad \langle n| \longrightarrow \langle n| |F|^{1/2} \quad (2.33c)$$

$$s^+/\sqrt{2S} \longrightarrow f^{1/2}(n_s) a_s^+ \quad (2.34c)$$

$$s^-/\sqrt{2S} \longrightarrow a_s \cdot f^{1/2}(n_s) \quad (2.35c)$$

$$s^z \longrightarrow -S + n_s \quad (2.36c)$$

O índice s indica que o operador a_s está definido no espaço de Fock restrito, $\mathcal{F}_s$, e

$$a_s^\# = P_s a_s P_s \quad (2.37)$$

onde P_s é o operador projetor restrito ao subespaço físico, também conhecido como estados próprios, Dyson I.

$$P_s |n\rangle = \begin{cases} |n\rangle & \text{caso } n \leq 2S \\ 0 & \text{caso } n > 2S. \end{cases} \quad (2.38)$$

É interessante notar o papel desempenhado pelo fator de normalização $1/\sqrt{2S}$ em (2.34) e (2.35). Este fator é necessário para que as regras de comutação (2.3) e (2.12) sejam obedecidas - no limite quando $S \rightarrow \infty$. Das relações de comutação de spin (2.3) temos:

$$\left[\frac{s^+}{\sqrt{2S}}, \frac{s^-}{\sqrt{2S}} \right] = \frac{s^z}{S} \quad (2.39)$$

No limite $S \rightarrow \infty$, $s^z/S \approx 1$ e as relações de comutação de spin são formalmente equivalentes à relação de comutação bosônica e neste limite, formalmente, $s^+ \rightarrow a^+$ e $s^- \rightarrow a$. A normalização pelo fator $1/\sqrt{2S}$, preserva os aspectos quânticos do modelo de Heisenberg original. Por outro lado, no modelo clássico a normalização é feita pelo fator S^{-1} e

$$\left[\frac{s^+}{2S}, \frac{s^-}{S} \right] = \frac{2s^z}{S^2} \quad (2.40)$$

e no limite $S \rightarrow \infty$, $[s^+, s^-] \rightarrow 0$ e os operadores de spin comportam-se como se fossem componentes clássicas de momento angular.

As relações de comutação entre o operador projeção e os operadores bosônicos serão úteis na análise, a ser desenvolvida no próximo capítulo, do Hamiltoniano de Heisenberg. Analisando o operador projeção nos estados $|2S\rangle$ e $|2S+1\rangle$, temos:

$$[P_S, f_S(n)] = [P_S, f_S(n) a] = 0 \quad (2.41)$$

$$[P_S, a] \neq 0 \quad \text{e} \quad [a^+, P_S] \neq 0 \quad (2.42)$$

Como só nos interessa a análise de operadores que sejam observáveis físicas, a transformação de Holstein-Primakoff é, à primeira vista, mais interessante uma vez que preserva a Hermiticidade. Por outro lado esta transformação traz consigo o inconveniente do termo sob raiz quadrada em (2.34c) e (2.35c) e isto limita sua utilização. Usualmente considera-se a transformação de Holstein-Primakoff com o termo $f_S(n) \approx 1$ tomado como aproximadamente 1, e este tipo de "transformação" é também conhecida como transformação de Holstein-Primakoff "linearizada", a saber:

$$S^+/\sqrt{2S} \longrightarrow a_s^+ \quad (2.34c)$$

$$S^-/\sqrt{2S} \longrightarrow a_s \quad (2.35c)$$

$$S^z \longrightarrow -S + \hat{n}_s \quad (2.36c)$$

Na verdade não se trata de uma transformação, mas sim de uma aproximação, dado que as relações de comutação (2.3) e (2.12) não são obedecidas. No trabalho original de Holstein - Primakoff (1940) esta aproximação é feita na análise do modelo ferromagnético de Heisenberg levando em conta a interação dipolar e sua aplicação a outros modelos deve levar em conta a existência de uma aproximação e seus efeitos devem ser estudados separadamente para cada modelo em consideração.

É possível estabelecer uma relação entre as diversas transformações de modo que o óbice da não Hermiticidade da transformação de Dyson possa ser resolvida de modo satisfatório.

Para tanto, basta verificar que:

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{O}|m\rangle &= \langle n|\hat{F}^{1/2} \hat{O}^{HP} \hat{F}^{1/2}|m\rangle = \langle n|\hat{F}(\hat{F}^{-1/2} \hat{O}^{HP} \hat{F}^{1/2})|m\rangle = \\ &= \langle n|\hat{F} \hat{O}^D |m\rangle \end{aligned} \quad (2.43)$$

ou seja

$$\hat{O}^D = \hat{F}^{-1/2} \hat{O}^{HP} \hat{F}^{1/2} \quad (2.44)$$

Como vemos de (2.44), o operador $\hat{O}^D$, é uma transformação de semelhança (ver por exemplo Bellman (1960), pg.106) do operador $\hat{O}^{HP}$. Esta propriedade será de grande utilidade na análise do espectro dos operadores obtidos através da transformação de Dyson, como será visto na próxima secção.

Até aqui limitamo-nos a analisar um único ponto da rede. Como o espaço de Hilbert da rede é o produto direto de espaços de Hilbert mutuamente ortogonais dos pontos da rede, as considerações desenvolvidas acima podem ser facilmente generalizadas para toda a rede.

2.4 Equivalência entre as Transformações de Dyson e Holstein-Primakoff.

Utilizando o mapeamento entre os operadores de momento angular e operadores bosônicos (2.40) - (2.42) é possível reescrever o Hamiltoniano de Heisenberg (2.1) em função dos operadores bosônicos. Não levamos em consideração a transformação do tipo Dyson-conjugada, uma vez que para todos os efeitos ela é equivalente à uma transformação do tipo Dyson. As propriedades aqui demonstradas valem para qualquer Hamiltoniano descrito por uma função dos operadores de spin, contudo o Hamiltoniano de Heisenberg será considerado à título de ilustração.

Introduzindo as transformações do tipo (a) e (c) diretamente em (2.1) temos:

$$P_s \hat{H}_{HP} P_s = P_s \left\{ -\frac{1}{2S} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^{\parallel} \left[(n_i - S) \cdot (n_j - S) - S^2 \right] + \frac{1}{2S} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^{\perp} f_s^{1/2}(n_i) \cdot a_i^+ \cdot a_j \cdot f_s^{1/2}(n_j) \right\} P_s \quad (2.45a)$$

$$P_s \hat{H}_D P_s = P_s \left\{ -\frac{1}{2S} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^{\parallel} \left[(n_i - S) \cdot (n_j - S) - S^2 \right] + \frac{1}{2S} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^{\perp} \cdot a_i^+ \cdot f_s(n_j) \cdot a_j \right\} P_s \quad (2.45b)$$

O projetor P_s indica que o novo Hamiltoniano está definido somente no espaço próprio (2.38). Estamos interessados nas propriedades termodinâmicas de (2.1) por isto queremos calcular a função de partição:

$$Z_{HP} = \text{Tr} \exp(-\beta P_s \hat{H}_{HP} P_s) \quad \text{ou} \quad \text{Tr} \exp(-\beta P_s \hat{H}_D P_s) = Z_D \quad (2.46)$$

Devido às propriedades de comutação de P_s (2.37), (3.1) pode ser reescrito como: (ver Akhiezer (1968))

$$Z_{HP} = \text{Tr} \left[P \cdot \exp(-\beta \hat{H}_{HP} \cdot P) \right] \quad \text{ou} \quad Z_D = \text{Tr} \left[P \cdot \exp(-\beta \hat{H}_D P) \right] \quad (2.47)$$

Dyson afirma que o Hamiltoniano derivado por Holstein Primakoff $\hat{H}_{HP}$ (2.45a) é de difícil manuseio devido ao termo sob raiz quadrada, por isto considera $\hat{H}_D$ (2.45b) mais adequado. Em contraposição $\hat{H}_D$ em (3.1b) é não Hermitiano, basta deter-nos na

análise do segundo termo da expressão (2.45b). Deste modo a não Hermiticidade de $\hat{H}^D$ levanta restrições quanto à descrição do observável à ele associada. (ver por exemplo Messiah (1960), pg.159).

Apesar de não Hermitiano o espectro de $\hat{H}^D$ é real, mais que isto, vale a Proposição:

Proposição 2.1: O Hamiltoniano de Heisenberg na representação de Holstein-Primakoff e na representação de Dyson possuem o mesmo espectro.

Através de (2.44),

$$\hat{H}^D = F^{-1/2} \hat{H}^{HP} F^{1/2} \quad (2.48)$$

o que mostra que a relação existente entre $\hat{H}^D$ e $\hat{H}^{HP}$ é uma transformação de semelhança, diferente portanto das transformações unitárias, usuais na Mecânica Quântica.

O espectro de $\hat{H}^D$ é o conjunto de auto-valores solução da equação secular (ver por exemplo Messiah (1960), Cap VII Sec.20), e para Λ fixo, $\hat{H}^D$ é uma matriz finita, e:

$$|P \hat{H}^D P - \lambda \mathbb{1}| = 0 \quad (2.49)$$

da teoria da Álgebra Linear elementar (ver por exemplo Mostow e Sampson (1972), Prop.5.4, pg.168), têm-se:

$$|A - \lambda \mathbb{1}| = |SA\tilde{S}^{-1} - \lambda \mathbb{1}| \quad (2.50)$$

portanto o conjunto de soluções $\{\lambda_i\}$ de (2.49) também será solução de

$$|P \hat{H}^{HP} P - \lambda \mathbb{1}| = 0 \quad (2.51)$$

e a Proposição se verifica. $\square$

Além disto temos a Proposição:

Proposição 2.2: A função de partição associada à $PA_D P$ (Z_D) é igual à função de partição associada à $P\hat{H}^{HP}P$ (Z_{HP}).

Devido às relações de comutação (2.41) e (2.42),

$$Z_D \equiv \text{Tr} \exp(-\beta PH^D P) = \text{Tr} P \cdot \exp(-\beta H^D) \cdot P = \text{Tr} \exp(-\beta H^{HP}) \quad (2.52)$$

$$Z_{HP} = \text{Tr} \exp(-\beta P \cdot H^{HP} \cdot P) = \text{Tr} \exp(-\beta H^{HP}) P = \text{Tr}' \exp(-\beta H^{HP}) \quad (2.53)$$

onde Tr' significa o Traço restrito ao subspaço próprio. A matriz exponencial A pode ser representada pela série infinita: (ver por exemplo Bellman (1960), pg.165)

$$\exp A = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{A^n}{n!} \quad (2.54)$$

usando (2.50) e a propriedade cíclica do Traço,

$$\text{Tr} \cdot \exp(SAS^{-1}) = \text{Tr} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(SAS^{-1})^n}{n!} \right] = \text{Tr} [S \cdot \exp(A) \cdot S^{-1}] = \text{Tr} \exp(A) \quad (2.55)$$

Unindo os resultados de (2.52), (2.53), (2.54) e (2.55) segue a Proposição.

§§ .

Poder-se-ia objetar quanto à singularidade de $\mathbb{F}$, pois de (2.8) têm-se $f_s(2S) = 0$. Isto é contornável através da modificação da função $f_s(n)$. Seja $f_s(2S) = \epsilon > 0$. Os operadores H^{HP} e H^D são redefinidos por H_ϵ^{HP} e H_ϵ^D , e

$$\text{Tr}' \exp(-\beta H_\epsilon^{HP}) = \text{Tr}' \exp(-\beta H_\epsilon^D) \quad (2.56)$$

No limite $\epsilon \rightarrow 0^+$, segue-se a Proposição 2.2.

O resultado descrito nas Proposições 2.1 e 2.2, são aplicáveis à qualquer modelo, e o Hamiltoniano de Heisenberg é utilizado somente a título de referência. Estas Proposições eliminam as reticências, até então existente, quanto ao uso da representação de Dyson, pois fica estabelecido a equivalência entre ambas transformações.

Alguns autores, (por exemplo Rastelli e Lindgård (1979)) supõem erroneamente que o uso de transformações distintas leva a resultados diversos. Os resultados discrepantes devem-se mais às aproximações posteriores que ao uso de representações diferentes. Por exemplo, na representação de Holstein-Primakoff é generalizado o uso descuidado da aproximação

$$f_s^{1/2}(n) = (1 - n/2S)^{1/2} \approx 1 \quad (2.57)$$

sem a devida justificativa. Por outro lado, no esquema de Dyson a função de partição só pode ser estimada caso os operadores de projeção P_s (2.38) sejam omitidos no interior de (3.8) como será discutido no próximo Capítulo.

3. DESCRIÇÃO BOSÔNICA DO HAMILTONIANO DE HEISENBERG

Neste Capítulo vamos analisar algumas propriedades do estado fundamental dos modelos associados ao ferromagneto de Heisenberg e a aproximação envolvida na hipótese de se negligenciar a interação cinemática.

3.1 O Estado Fundamental do Modelo de Heisenberg Ferromagnético

Uma das principais propriedades do modelo de Heisenberg ferromagnético é a existência de um estado fundamental bem definido. Quando $J_{ij}^H = J_{ij}^{\perp}$ e $h=0$, o modelo definido em (2.1) possui simetria contínua de rotação. Esta simetria pode ser quebrada pela introdução de um campo magnético externo $h > 0$ na direção por ele definida, em geral associada à componente z , ou com a introdução de uma anisotropia no acoplamento entre os spins, por exemplo com:

$$J_{ij}^H > |J_{ij}^{\perp}| \quad \text{ou} \quad \epsilon = J_{ij}^H - J_{ij}^{\perp} > 0 \quad (3.1)$$

Van Hemmen, Brito e Wreszinski (1983) mostraram que - (2.1) com a condição (3.1) possui um estado fundamental bem definido e vale a Proposição:

Proposição 3.1: O Hamiltoniano de Heisenberg (2.1) possui um estado fundamental bem definido.

A prova reside em demonstrar que:

$$S^2 - S_i^z S_j^z \geq \pm [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y] \quad (3.2)$$

consideremos primeiramente a desigualdade com sinal positivo ou

$$S^2 \geq \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (3.3)$$

pode-se combinar o spin do sítio i , $\vec{S}_i$ e do sítio j , $\vec{S}_j$, construindo o spin total $\vec{S}_t = \vec{S}_i + \vec{S}_j$, cujo número quântico total varia de 0 à $2S$. (ver por exemplo Messiah (1960), Cap.30) e:

$$\vec{S}_t \cdot \vec{S}_t = (\vec{S}_i + \vec{S}_j)^2 \leq 2S \cdot (2S + 1) \hbar^2 \quad (3.4)$$

logo,

$$2S.(S+1) + 2\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \leq 2S.(2S+1) \quad (3.5)$$

e (3.3) se verifica pois:

$$S^2 - S_i^z S_j^z \geq [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y] \quad (3.6)$$

Para verificar a desigualdade com sinal negativo basta considerar uma rotação de ângulo π ao redor do eixo z, no sítio i

$$S_i^x \longrightarrow -S_i^x, \quad S_i^y \longrightarrow -S_i^y, \quad S_i^z \longrightarrow S_i^z \quad (3.7)$$

este novo momento angular é equivalente fisicamente ao anterior e os mesmos passos da demonstração de (3.6) são válidos e:

$$S^2 - S_i^z S_j^z \geq -[S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y] \quad (3.8)$$

usando (2.5) e (2.4) temos:

$$H_\Lambda \geq \sum_{\langle ij \rangle \in \Lambda} (J_{ij}^{\parallel} - |J_{ij}^{\perp}|) (S^2 - S_i^z S_j^z) \geq 0 \quad (3.9)$$

e Ω_Λ tal que $S_i^+ |\Omega_\Lambda\rangle = 0 \quad \forall i \in \Lambda$

$$\langle \Omega_\Lambda | H_\Lambda | \Omega_\Lambda \rangle = 0 \quad (3.10)$$

é um estado que minimiza em (3.9).

§§.

Desta Proposição segue-se os corolários.

Corolário 3.1.1:- O Hamiltoniano H_Λ (2.1) com condições periódicas de contorno, ou livres, possui 2 estados fundamentais.

Basta verificar que os estados com todos os spins alinhados na direção z (oposta a z) Ω^+ (Ω^-) tal que $S_i^+ |\Omega^+\rangle = 0$ ($S_i^- |\Omega^-\rangle = 0 \quad \forall i \in \Lambda$) são estados que minimizam H_Λ em (3.9). §

Corolário 3.1.2:- Com condições de contorno definidas, por exemplo, todos os spins do contorno alinhados na direção z (ou no sentido oposto) o Hamiltoniano H_Λ (2.1), possui um único estado fundamental Ω_Λ^+ (ou Ω_Λ^-).

Prova: Neste caso é necessário verificar o que se passa na região de contorno. Escolhamos, para fixar ideia, um contorno de Λ , $\partial\Lambda$, com todos os spins alinhados na direção z . Neste caso somente o estado Ω_Λ^+ , minimiza H_Λ em (3.9). O estado Ω_Λ^- , fornece uma contribuição de superfície de modo que:

$$\langle \Omega_\Lambda^- | H_\Lambda | \Omega_\Lambda^- \rangle > 0 \quad \text{onde } \bar{\Lambda} = \Lambda \cup \partial\Lambda \quad (3.11)$$

É simples verificar que a introdução de um campo magnético externo, $h > 0$, (na direção z , por exemplo) a simetria global de rotação de H_Λ é quebrada e o estado fundamental seria bem definido, no caso Ω_Λ^- .

O Corolário 3.1.2 encerra uma aparente contradição. O Hamiltoniano H_Λ é expresso por um produto escalar, exibindo simetria de rotação em torno de qualquer eixo.

Como então justificar a existência de uma direção preferencial para o alinhamento dos spins? Sob este ponto de vista deveria existir um conjunto não enumerável de estados fundamentais, contrariando o Corolário 3.1.2.

Esta contradição só pode ser elucidada a partir de uma análise do comportamento dos auto estados (Ω_Λ^+ e Ω_Λ^-) no limite termodinâmico ($|\Lambda| \rightarrow \infty$). Uma abordagem rigorosa do problema foi desenvolvida por Streater (1967) o que torna desnecessário a discussão dos detalhes formais neste trabalho.

Consideremos, para simplificar o raciocínio, o caso mais simples $S = 1/2$, ou $\vec{S} = \vec{\sigma}$ ($\vec{\sigma}$: matrizes de Pauli).

Para fixar as idéias, considere-se o estado Ω_Λ^+ , e uma rotação θ em torno de um eixo definido pelo vetor $\vec{\sigma}$ e

$$U_\theta = \prod_{i \in \Delta} e^{i \frac{\theta}{2} \vec{\sigma}_i}$$

, Para facilitar o raciocínio, considere-se $\vec{\sigma} = \sigma_x$, fixando o eixo de rotação na direção x. O estado

$$\Omega_\Lambda^\theta = U_\theta \Omega_\Lambda^{(+)} = e^{i \frac{\theta}{2} \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i^x} \cdot \Omega_\Lambda^+ \quad (3.12)$$

possui a mesma energia que Ω_Λ^+ , ou seja:

$$\langle \Omega_\Lambda^\theta | H_\Lambda \Omega_\Lambda^\theta \rangle = \langle \Omega_\Lambda^+ | H_\Lambda \Omega_\Lambda^+ \rangle = 0 \quad (3.13)$$

contudo Ω_Λ^θ e Ω_Λ^+ não são necessariamente ortogonais pois:

$$\langle \Omega_\Lambda^+ | \Omega_\Lambda^\theta \rangle = (\cos \frac{\theta}{2})^{|\Lambda|} \neq 0 \quad \theta \neq 0 \quad (3.14)$$

é evidente que $\theta = \pi$ representa o estado Ω_Λ^- , é ortogonal a Ω_Λ^+ e ambos são os únicos auto-estados disjuntos, de acordo portanto com o Corolário 3.1.2.

A situação é diversa no limite termodinâmico, pois como $|\cos \theta| < 1$,

$$\lim_{|\Lambda| \rightarrow \infty} \langle \Omega_\Lambda^+ | \Omega_\Lambda^\theta \rangle = \langle \Omega^+ | \Omega^\theta \rangle = 0 \quad (3.15)$$

e os estados Ω^+ , Ω^θ são ortogonais. Neste caso eles produzem representações unitárias inequivalentes das relações de comutação de SU(2) (ver Streater (1967)) ($[S_x^i, S_y^j] = i \delta_{ij} S_z^i$, $x, y \in \mathbb{Z}^d$) $\mathbb{Z}$ inteiros, e existe uma "barreira energética infinita" entre os estados Ω^θ correspondentes à rotações θ diferentes.

3.2 A Estimativa de Dyson da Interação Cinemática

A vantagem do uso dos operadores bosônicos reside na facilidade do cálculo do Traço no espaço de Fock (2.11). A restrição introduzida pelo projetor P_S não só é inevitável, uma vez que estamos fazendo a correspondência entre operadores limitados $\tilde{S}$ e não limitados $\hat{S}$, como é causa de sério embaraço. O mapeamento no espaço bosônico só será útil caso esta restrição possa ser eliminada de alguma forma.

Dyson I denominou esta restrição de Interação Cinemática, pois ela é intrínseca ao formalismo matemático e não depende da dinâmica estabelecida pelo Hamiltoniano de Heisenberg.

Calcular a função de partição incluindo a restrição cinemática é tão complexo quanto estimar a função de partição associada ao Hamiltoniano de Heisenberg no espaço dos spins (2.14). Em que limites de temperatura e magnitude de spin S , esta interação pode vir a ser desprezada? Dyson II, Sec.3, dedica uma atenção especial a este problema e, a nosso ver, não logrou obter uma solução satisfatória.

Nesta Secção faremos uma releitura do desenvolvimento de Dyson II, com o intuito de mostrar a insuficiências dos seus argumentos bem como simplificar o complexo arrazoado por ele engendrado.

Caso a restrição P_S não seja levada em consideração o Hamiltoniano (2.45b) não será limitado inferiormente, uma vez que o operador número $\hat{n}$ não será limitado e $(1 - n/2S) \rightarrow -\infty$ quando $n \rightarrow \infty$. Para evitar esta dificuldade, que torna impossível o cálculo da função de partição (2.47), Dyson I (equação 26) introduz uma nova definição para $f_S(n)$,

$$f_S(n) = \begin{cases} 1 - n/2S & n = 0, 1, \dots, 2S. \\ 0 & n \geq 2S + 1 \end{cases} \quad (3.16)$$

sob o argumento de que esta nova interação adiciona ao Hamiltoniano um operador que tem elemento de matriz nulo em todos os estados impróprios além de não modificar em nada o Hamiltoniano original nos estados próprios.

Com esta nova definição $f_S(n)$, a função de partição está bem definida e:

$$\begin{aligned} Z_D &\equiv \text{Tr} \exp(-\beta P H^D P) = \text{Tr} P \exp(-\beta H^D) = \text{Tr} (1 - \hat{P}) \exp(-\beta H^D) = \\ &= \text{Tr} \exp(-\beta H^D) - \text{Tr} \hat{P} \exp(-\beta H^D) \end{aligned} \quad (3.17)$$

onde P definido em (2.38), $P + \hat{P} = 1$ e $Z_D = Z_T - Z_I$, usando (2.42).

Para Dyson II Z_I pode ser desprezado caso for proporcional à $\exp(-\beta \Delta)$, com $\Delta > 0$, pois no limite de baixas temperaturas, quando $\beta \gg 1$, a correção introduzida por Z_I seria exponencialmente pequena. O ponto central reside em demonstrar a existência de uma lacuna no espectro de $\hat{H}_D$ (3.1b) entre os estados impróprios de energia mais baixa e os estados próprios.

Para melhor compreender este argumento reescreveremos os passos essenciais do desenvolvimento da Sec.3 de Dyson II e verificar-se-á que tal lacuna inexistente.

Como o Hamiltoniano $\hat{H}_D$ é, para todos os efeitos fisicamente relevantes, equivalente ao Hamiltoniano $\hat{H}_{HP}$ (Proposição - 2.1) vamos utilizar a representação de Holstein-Primakoff que simplifica em muito as operações. O Hamiltoniano de Heisenberg com um campo magnético externo na representação de Holstein-Primakoff pode ser reescrito como:

$$H^{HP} = \sum_{ij} J_{ij}^{\perp} f_s^{1/2}(n_j) \cdot a_i \cdot a_j^{\perp} \cdot f_s^{1/2}(n_j) + \sum_{ij} J_{ij}^{\parallel} f_s(n_i) n_j + h \sum_i n_i \quad (3.18)$$

Segundo Dyson II, seja $\mathcal{S}$ um conjunto consistindo de um número finito de pontos da rede ($j \in \mathcal{S}$) e M um conjunto de inteiros M_j correspondendo a todo j em $\mathcal{I}$, satisfazendo:

$$M_j \geq 2S + 1 \quad j \in \mathcal{I}$$

Seja Q_M o espaço composto de combinações lineares destes estados do modelo (atuando em todo o espaço de Fock na rede) para o qual:

$$n_j = M_j \quad j \in \mathcal{I} \quad \text{e} \quad n_j \leq 2S \quad j \in \mathcal{S} \quad (3.19).$$

Seja P_M o operador projeção sobre o espaço Q_M . Em particular, quando $\mathcal{I} = \{\emptyset\}$, Q_M é o espaço todo e P_M é o operador projeção P_S definido em (2.38). Quando $\mathcal{I}$ é não vazio, Q_M é o espaço de estados impróprios com respeito a um conjunto de pontos da rede $\mathcal{I} = \{i \mid n_i = M_i \geq 2S\}$. A função de partição no espaço de Fock (Z_T em (3.12)) compreende a soma sobre todos os setores definidos por M :

$$Z_T = \sum_M \text{Tr} \exp(-P_M H^{HP} P_M) \quad (3.20)$$

Com a redefinição de $f_s(n_i)$ (3.11) a única contribuição não trivial à função de partição Z_T (3.15) em cada setor Q_M , advém somente de parte do Hamiltoniano (3.13), a saber:

$$H^{HP} = \sum_{ij \in \mathcal{S}} J_{ij} [a_j^{\perp} \cdot f_s(n_i) \cdot (a_j - a_i)] + h \sum_i n_i + J \sum_{i \in \mathcal{S}} M_j \cdot f_s(n_i) \\ \text{com } J_{ij}^{\parallel} = J_{ij}^{\perp} = J \text{ e } M_j > 2S. \quad (3.21)$$

e obtêm-se assim o mesmo resultado de Dyson (eq.33 em Dyson II).

O primeiro termo de (3.16) pode ser reescrito como função dos operadores de spin através da representação de Holstein-Primakoff inversa e:

$$H = \frac{J}{2S} \cdot \sum_{i,j \in \mathcal{Q}} (S^2 - \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) + h \sum_{i \in \mathcal{Q}} (S - S_i^z) + \frac{J}{2S} \cdot \sum_{i \in \mathcal{Q}} \sum_{j \in \mathcal{I}} M_j (S - S_i^z) + h \sum_{j \in \mathcal{I}} M_j \quad (3.22)$$

onde $M_j > 2S$, e (3.22) é precisamente a eq.36 em Dyson II.

Qual é precisamente a alteração produzida com a omissão de P_S ? O Hamiltoniano (3.22) responde a esta questão desde que $f_S(n)$ seja redefinido por (3.16). Permitir a inclusão dos estados impróprios equivale acrescentar ao Hamiltoniano original, escrito como função de operadores de momento angular, um termo positivo que depende somente da componente S^z , além de excitações impróprias associadas ao campo magnético externo h , como era de se prever "a priori". A tese central de Dyson II, Sect.3, é provar que (3.22) é estritamente positivo, ou:

$$\tilde{H} > 0 \quad \text{ou} \quad \epsilon = \langle m | \tilde{H} | m \rangle > 0 \quad |m\rangle \text{ estado qualquer} \quad (3.23)$$

Deste modo existiria uma lacuna no espectro de energia entre os estados impróprios de energia mais baixa e os estados próprios. Dyson II introduz um análogo, constituído por uma rede infinita de resistores elétricos, para provar que $\epsilon > 0$. Contudo é simples exibir um contra-exemplo onde o valor esperado de $\tilde{H}$ deixa de ser estritamente positivo. Considere-se por exemplo o estado:

$$|P\ 1\rangle = (S_i^+)^{2S} \cdot (S_j^+)^{M_j} |0\rangle \quad (3.24)$$

i, j vizinhos mais próximos e $M_j > 2S$. Basta verificar que

$$\langle P\ 1 | \tilde{H} | P\ 1 \rangle = 0. \quad (3.25)$$

contrariando (3.24) e tornando inválido os argumentos de Dyson com respeito a construção do Hamiltoniano positivo (3.23) com $h=0$.

Caso $h > 0$, é trivial constatar a existência de uma lacuna, pois mesmo que $S_i^z |S\rangle = +S |S\rangle$, os 3 primeiros termos de (3.22) são nulos, $h \sum_j M_j > 0$ e $\epsilon > 0$. O formalismo de ondas de spin busca descrever a magnetização espontânea, ou seja no limite onde o campo magnético externo é nulo, $h \rightarrow 0$. Deste

modo uma prova dependente do campo magnético externo não é satisfatória.

Mesmo que o argumento a respeito da existência de u ma lacuna no espectro entre os estados impróprios e os estados próprios fosse válido restaria ainda provar que a baixas temperaturas e no limite termodinâmico a contribuição da função de partição total é muito maior que a contribuição devido aos estados impróprios, ou seja: $Z_I \ll Z_T$. Wortis (1965) demonstrou - em detalhes que, devido a interação (3.1), o argumento desenvolvido por Dyson II carece de consistência interna. Como será visto no próximo Capítulo, esta dificuldade extra pode ser contornada através de uma separação natural do Hamiltoniano de Heisenberg com vistas a descrição das ondas de spin.

4. UMA DIVISÃO NATURAL DO HAMILTONIANO DE HEISENBERG.

Vamos reescrever de um modo apropriado o Hamiltoniano de Heisenberg evitando assim a introdução da interação extra (3.10) e as dificuldades daí decorrentes.

O Hamiltoniano de Heisenberg (2.1) pode ser reescrito como:

$$H = - \frac{1}{2S} \cdot \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ J_{ij}^{\parallel} (S_i^z \cdot S_j^z - S^2) + J_{ij}^{\perp} S_i^+ \cdot S_j^- \right\} \quad (4.1)$$

com $J_{ij}^{\perp} = \alpha J_{ij}^{\parallel}$ $0 < \alpha \leq 1$.

onde cada ponto da rede i percorre uma cúbica simples (Λ_N) de espaçamento unitário, dimensão ν e lado L ($L = N$), com condições periódicas de contorno. Nestas condições:

$$\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^{\parallel} \cdot S_i \cdot (S_i^z - S_j^z) = 0 \quad (4.2)$$

O operador S_i^z é limitado no espaço de Hilbert (2.14) e

$$1 \leq \|S + 1 - S_i^z\|_{\mathcal{H}} \leq 2S + 1. \quad (4.3)$$

de modo que o operador $(S+1-S_i^z)^{-1}$ está definido em todo o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ (2.4).

Inserindo (4.2) e (4.3) em (4.1), temos:

$$H = - \frac{1}{2S} \cdot \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ J_{ij}^{\parallel} \left[S_i^z \cdot S_j^z - S^2 + S(S_i^z - S_j^z) \right] + J_{ij}^{\perp} \cdot S_i^+ \cdot S_j^- \cdot (S+1-S_j^z)^{-1} \cdot (S+1-S_i^z)^{-1} \right\} \quad (4.4)$$

após algumas manipulações algébricas, (4.4) pode ser reescrito como:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ \left[-J_{ij}^{\parallel} (S+S_i^z) + J_{ij}^{\perp} S_i^+ \cdot S_j^- \cdot (S+1-S_j^z)^{-1} \right] \cdot \left(\frac{S+S_j^z}{2S} \right) + J_{ij}^{\perp} \frac{S_i^+ \cdot S_j^-}{2S} \cdot (S+1-S_j^z)^{-1} \right\} \quad (4.5)$$

§ A notação $\langle i,j \rangle$ significa i,j , vizinhos mais próximos e i,j .

ERRATA

pg. 9 linha 25 Os estados constituem ...

pg.9 linha 27 $|n_i\rangle = (n_i!)^{-1/2} \cdot (S_i^+ / 2S)^{n_i} |0\rangle$ (2.6)

pg. 13 linha 11 A propriedade (2.25)

pg. 13 (2.40) $\left[\frac{S^+}{S}, \frac{S^-}{S} \right] = 2S^z / S^2$

pg. 17 linha 4 (2.33) - (2.36) em vez de (2.40)-(2.42)

pg. 17 linha 23 (2.41) e (2.46) em vez (2.37), (3.1).

pg. 17 linha 29 (2.45b) em vez de (3.1b)

pg. 19 linha 29 (2.47) em vez de (3.8)

pg. 24 linha 28 (2.45b) em vez de (3.1b)

pg. 25 linha 24 (3.17) em vez de (3.12)

pg. 25 linha 27 (3.16) em vez de (3.11)

pg. 25 linha 28 (3.17) em vez de (3.15)

pg. 25 linha 29 (3.18) em vez de (3.13)

pg. 28 linha 5 (3.16) em vez de (3.10)

pg. 28 (4.4) $-\frac{1}{2S} \sum_{ij} \left[J_{ij}^{\perp} \cdot S_i^+ \cdot S_j^- \cdot (S+1-S_j^z)^{-1} \cdot (S+1-S_j^z)^{+1} \right]$

pg. 28 (4.5) $-\frac{1}{2S} \sum_{ij} \left[J_{ij}^{\perp} \cdot (S+S_i^z) + J_{ij} \cdot S_i^+ \cdot S_j^- \cdot (S+1-S_j^z)^{-1} \right] (S+S_i^z) +$
 $+ J_{ij}^{\perp} \cdot S_i^+ \cdot S_j^- / (2S) \cdot (S+1-S_j^z)^{-1}$

pg. 30 linha 15 (2.33) e (2.36a) em vez de (2.40a) e (2.42a)

pg. 31 (4.11) $-\frac{1}{2S} \cdot \sum_{ij} J_{ij} \cdot n_j \cdot (n_i - \alpha a_i^+ \cdot a_j)$

pg. 31 (4.12) $a_r^+ = N^{-1/2} \sum_k \exp(-ikr) a^+(k)$

pg. 32 (4.20) $\Phi(k_1, k_2, k_3, k_4) = J(k_1) + J(k_2) - J(k_3 - k_1) - J(k_4 - k_2)$

pg. 36 (5.11) $Q_n = \sum_{\{m_l\}} \prod_{l=1}^n \frac{1}{m_l!} (Nb_l)^{m_l} l$

pg. 48 (6.27) $J/(4S) \cdot \sum_j \left\{ (S - \delta)^2 + 2 \cdot (S + \delta) \cdot (3S - \delta) \right\} \langle P_i^+ \cdot P_j \rangle_H^k +$
 $8S \delta \langle P_i^{\delta} \rangle_H^k$

ou seu equivalente:

$$H = H_0 + \frac{V}{2S} \quad (4.6)$$

onde

$$H_0 = \sum_{i,j} \left\{ J_{ij}'' (S + S_i^z) - J_{ij}^\perp S_i^+ \cdot S_j^- (S+1-S_j^z)^{-1} \right\} \quad (4.7)$$

e

$$V = - \sum_{i,j} \left\{ J_{ij}'' (S + S_i^z) - J_{ij}^\perp S_i^+ \cdot S_j^- (S+1-S_j^z)^{-1} \right\} (S+S_j^z) + \\ + \sum_{i,j} J_{ij}^\perp S_i^+ \cdot S_j^- (S+1-S_j^z)^{-1} \quad (4.8)$$

O Hamiltoniano de Heisenberg assim reescrito, embora possa parecer estranho à primeira vista quanto à forma, tem uma expressão simples quando descrito em termos de operadores bosônicos, e a naturalidade da divisão proposta fica evidenciada.

Como já vimos na Secção 3.1, a representação de Dyson e Holstein-Primakoff são equivalentes no espaço de Fock restrito, por isto pode-se usar a transformação de Dyson de modo a evitar a inconveniência de operadores sob raiz quadrada. Usando a transformação de Dyson (2.40a)-(2.42a), (4.6) fica na forma:

$$H = P_S H_0 P_S + P_S V P_S \quad (4.9)$$

onde

$$H_0 = \sum_{i,j} \left\{ J_{ij}'' \cdot n_i - J_{ij}^\perp (2S) a_i^+ \cdot (1-n_j/2S) \cdot a_j \cdot (2S-n_j+1)^{-1} \right\} \\ = \sum_{i,j} \left\{ J_{ij}'' \cdot n_i - J_{ij}^\perp \cdot a_i^+ \cdot a_j \cdot (2S-n_j+1) \cdot (2S-n_j+1)^{-1} \right\} \\ = \sum_{i,j} (J_{ij}'' a_i^+ a_i - J_{ij}^\perp a_i^+ \cdot a_j) \\ = \sum_{i,j} J_{ij}'' \cdot (n_i - \propto a_i^+ \cdot a_j) \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0 &= - \frac{1}{2S} \cdot \sum_{i,j} \left\{ J_{ij}'' \cdot n_i n_j - \right. \\
&\quad \left. - J_{ij}^{\perp} (2S) a_i^+ \cdot (1-n_j/2S) a_j (2S+1-n_j)^{-1} (n_j-1) \right\} \\
&= - \frac{1}{2S} \cdot \sum_{i,j} \left[J_{ij}'' \cdot n_i n_j - J_{ij}^{\perp} \cdot a_i^+ \cdot n_j \cdot a_j \right] \\
&= - \frac{1}{2S} \cdot \sum_{i,j} \left[J_{ij} \cdot n_j \cdot (n_i - a_i^+ \cdot a_j) \right] \quad (4.11)
\end{aligned}$$

onde $\hat{H}_0$ em (4.10) é um sistema de magnons livres e $\hat{H}_0 \geq 0$. Isto é evidenciado através de uma transformação de Fourier na rede,

$$a_r^+ = \frac{1}{N^{3/2}} \sum_k \exp(-ikr) a^+(k) \quad (4.12)$$

$$e \quad a_r = \frac{1}{N^{3/2}} \sum_k \exp(ikr) a(k) \quad (4.13)$$

onde $k=(k_i)_{i=1}$ representa um vetor e $k_i \in \{2\pi n_i/L\}$ onde para L par, $n_i = -L/2 - 1, \dots, 0, \dots, L/2$; e para L ímpar $n_i = -(L-1)/2, \dots, 0, \dots, (L-1)/2$. A partir das relações de comutação (2.23) e da propriedade

$$N^{-1/2} \cdot \sum_{r=1}^N \exp(i(k-k') \cdot r) = \delta_{kk'} \quad (4.14)$$

temos as relações de comutação:

$$[a(k), a^+(k')] = \delta_{kk'}, \text{ e } [a(k), a(k')] = [a^+(k), a^+(k')] = 0 \quad (4.15)$$

Introduzindo (4.12) e (4.13) em (4.10),

$$\hat{H}_0 = \sum_k \epsilon_k a^+(k) \cdot a(k) \quad (4.16)$$

onde

$$\epsilon_k(k) = J(0) - J(k) = 2J \vee (1 - \cos k) \quad (4.17)$$

e

$$J(k) = \sum_r J_{rt} \cdot \exp(ik(r-t)) \quad (4.18)$$

portanto para $\vee \leq 1$, $\epsilon_k(k) \geq 0$ e (4.16) é diagonal com auto-valores positivos, logo $\hat{H}_0$ é positivo definido e como consequência do teorema de Bochner (ver por exemplo Reed e Simon (1980) pg.330) $\hat{H}_0$ de (4.10) também o será.

Introduzindo (4.12) e (4.13) em (4.11), têm-se:

$$\hat{V} = - \frac{1}{2S} \cdot \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ k_3, k_4}} a^+(k_1) \cdot a^+(k_2) \cdot a(k_3) \cdot a(k_4) \hat{\Phi}(k_1, k_2, k_3, k_4) \Delta_{12,34} \quad (4.19)$$

$$\text{onde } \hat{\Phi}(k_1, k_2, k_3, k_4) = J(k_1) + J(k_2) + J(k_3) + J(k_4) \quad (4.20)$$

$$\text{e } \Delta_{12,34} = \Delta(k_1 + k_2 - k_3 - k_4) \text{ com } \Delta(k) = 1 \text{ se } k=0 \text{ e } \Delta(k)=0 \text{ se } k \neq 0$$

O parâmetro de anisotropia modifica fortemente o caráter das ondas de spin. Em primeiro lugar ele afeta o Hamiltoniano de magnons livres, $\hat{H}_0$, pois é a parte XY do Hamiltoniano de Heisenberg ($\hat{S}_i^+ \cdot \hat{S}_j^-$) que permite a descrição da propagação das ondas de spin, ao diminuir o número de excitações num ponto da rede j e aumentar o número de excitação em um outro ponto da rede i . Deste modo é justificável que no limite de $\alpha=0$, o modelo de Ising, as ondas de spin não existam, Brito(1982), e magnetização espontânea decai exponencialmente próximo de $T=0$, muito mais rápido do que qualquer série de potências da temperatura. Como veremos no próximo Capítulo, o mesmo se passa no caso anisotrópico $0 < \alpha < 1$, pois este parâmetro de anisotropia introduz uma lacuna ("gap") no espectro de magnons ao redor do momento $k=0$,

$$E_\alpha(k) = J(0) - \alpha J(k) \sim 2J\sqrt{1-\alpha} + O(k^2) \quad (4.21)$$

$$\text{e para } \alpha < 1, \quad \lim_{k \rightarrow 0} E_\alpha(k) > 0.$$

Este resultado não contraria o Teorema de Goldstone, - (ver, por ex. Landau, Fernando Perez e Wreszinski(1981) e refs. ali citadas), pois embora o Hamiltoniano (4.1) seja um modelo com simetria contínua de rotação em torno do eixo z , seu estado fundamental é invariante sob esta simetria de rotação, devido a Proposição 3.1, e excitações com energia necessariamente maiores que um certo valor positivo: $\delta = 2J\sqrt{1-\alpha} > 0$, são possíveis.

O Hamiltoniano (4.16), positivo definido, representa um sistema de magnons livres com relação espectral definida por (4.17). Porém o Hamiltoniano relacionado ao modelo ferromagnético é: $P_s \hat{H}_0 P_s$ (4.9). Em que limite a restrição introduzida pelo operador projeção P_s pode ser desprezada no cálculo da função

de partição $\text{Tr exp}(-\beta P_S H_0 P_S)$? É difícil fornecer uma resposta satisfatória a esta questão. Para sistemas de grande magnitude de spin, têm-se: $\lim_{S \rightarrow \infty} P_S = 1$, o operador projeção torna-se me

nos restritivo. Espera-se que a baixas temperaturas ($\beta \gg 1$), os estados próximos do estado fundamental representam a contribuição principal a função de partição.

Apesar disto, uma prova rigorosa de que:

$$Z_1 = \text{Tr exp}(-\beta H_0) - \text{Tr exp}(-\beta P_S H_0 P_S) = O(S^{-1}, \beta^{-1}) \quad (4.22)$$

não exista até o presente. Contudo é uma hipótese razoável supor que, a baixa temperatura e para sistemas com grande magnitude de spin associado, a restrição cinemática pode ser negligenciada.

A omissão do operador projeção P_S não acarreta maiores cuidados em H_0 , porém o mesmo não é verdade para V_0 , uma vez que existem estados impróprios acessíveis, onde $\langle 1 | V_0 | 1 \rangle = -\infty$, logo V_0 não é limitado inferiormente. Por outro lado, V_0 representa um efeito de segunda ordem na interação entre magnons e têm uma constante de acoplamento proporcional a $1/S$. No limite de S grande, existe dois efeitos: (a) diminui a importância da interação $P_S V_0 P_S$ de (4.9) e (b) diminui o efeito da restrição cinemática: $P_S \rightarrow 1$.

Com a divisão do Hamiltoniano de Heisenberg (4.6) a divisão entre interação cinemática e dinâmica perde a ambiguidade existente no tratamento de Dyson II, como foi previamente observado por Walker (1963) e Wortis (1965). Como vimos a interação cinemática é representada exclusivamente pela existência do operador projeção P_S , cuja omissão é aceitável para o Hamiltoniano de magnons livres a baixa temperatura, H_0 . Por sua vez a interação dinâmica deve ser entendida como uma perturbação (4.11) ao Hamiltoniano livre H_0 e com a constante de acoplamento proporcional a $1/S$.

Com estas observações em pauta, podemos propor o seguinte programa: Desprezando a restrição cinemática, considerando o sistema de magnons livres na rede, pergunta-se: Qual é a influência da interação dinâmica? O próximo Capítulo é uma resposta a esta questão.

5. A EXPANSÃO EM CLUSTER QUÂNTICA DE MAYER PARA UM SISTEMA DE MAGNONS NA REDE FRACAMENTE INTERAGENTE.

O método da expansão de cluster para sistemas quânticos desenvolvidos por Kahn e Uhlenbeck (1938) foi aperfeiçoado por Lee e Yang (1959), que teve por mérito dissociar os efeitos puramente quânticos oriundos da simetrização da função de onda dos efeitos dinâmicos da interação. Este método é bastante útil na descrição de um gás de Bose com interação tipo esfera dura, ("hard core"), como visto em Lee e Yang (1959) e Pathria e Kawatra (1962).

Wortis (1965) utilizou-se do método de Lee e Yang para analisar um sistema de magnons na rede, baseando-se na analogia existente entre um sistema de magnons a baixa temperatura e um gás com baixa densidade. Resumiremos as propriedades principais da expansão em série de cluster seguindo o texto padrão de Huang (1968). O tratamento rigoroso de uma expansão em série de potências da atividade z , pressupõe um conjunto de restrições ao potencial de interação de difícil verificação. (ver por exemplo Ruelle (1969)). Na Secção 5.1 mostramos algumas dificuldades matemáticas envolvidas, mais com o intuito de explicitá-las que resolvê-las. Na Secção 5.2 obtemos os coeficientes de virial para um sistema de magnons livres e na Secção 5.3 o segundo coeficiente de virial devido a interação entre os magnons, que é o resultado principal deste Capítulo, será estimado.

5.1 - A Expansão em Cluster Quântica de Mayer.

Como o operador número $\hat{N}(2,20)$ comuta com o Hamiltoniano, (ver apêndice B), a função de partição canônica pode ser escrita como:

$$Z(N,T,h) = \text{Tr} \exp(-\beta H_N) = \sum_{n=0}^{25N} z^n Q_n \quad (5.1)$$

onde

$$Q_n(N,T) = \text{Tr}_n \exp(-\beta H_N) \quad e \quad z = \exp(-\beta h), \quad h > 0. \quad (5.2)$$

Tr_n significa o traço restrito ao setor de n -magnons correspondente ao auto-valor n de $\hat{N}$, dado por (2.21) e $N=|\Lambda|$.

Para cada operador (observável) A , o valor esperado de Gibbs é definido como usualmente por:

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr}(\exp(-\beta H_N) \cdot A)}{Z(N,T,h)} \quad (5.3)$$

e a energia livre associada definida por:

$$f(N,T,h) = -(\beta N)^{-1} \cdot \ln Z(N,T,h) \quad (5.4)$$

e a magnetização por

$$m(N,T,h) = - \frac{\partial f(N,T,h)}{\partial h} \quad (5.5)$$

As quantidades de interesse principal são a energia livre e a magnetização espontânea no limite termodinâmico definido por:

$$f(T,h) = \lim_{N \rightarrow \infty} f(N,T,h) \quad (5.6)$$

e

$$M(T) = \lim_{h \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} m(N,T,h) \quad (5.7)$$

O campo magnético externo $h > 0$ desempenha aqui um papel análogo ao potencial químico (μ) do gas de Bose. Esta observação é que nos motiva expandir a energia livre $f(N,T,h)$ em série de potência da atividade:

$$f(N,T,h) = -\beta^{-1} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} z^n \cdot b_n(N,T) \quad (5.8)$$

O n -ésimo coeficiente de virial b_n contém todas as informações termodinâmicas relevantes com respeito a mecânica do desvio de n -spin. Assumindo a existência do limite termodinâmico,

$$\underline{b}_n(T) = \lim_{N \rightarrow \infty} b_n(N,T) < \infty \quad (5.9)$$

a magnetização espontânea correspondente será dada por:

$$m(T)/M(0) = 1 - \frac{1}{S} \cdot \sum_{n=1}^{\infty} n \underline{b}_n(T) \quad (5.10)$$

De (3.10) vemos que se $b_n(T)$ for conhecida a correção da magnetização espontânea em $T=0^\circ K$ é obtida diretamente em série de potências de S e T .

Seguindo Huang (1968), Sect.14.2, pode-se escrever Q_n em termos de b_n :

$$Q_n = \sum_{\{m_l\}} \sum_{l=1}^n \frac{1}{n_l!} (Nb_l)^{m_l} \quad (5.11)$$

onde §

$$n = \sum_{l=1}^n l \cdot m_l \quad (5.12)$$

e m_l é um inteiro não negativo, a soma (5.11) é extensiva sobre todas as partições possíveis $\{m_l\}$ satisfazendo (5.12). O coeficiente b_n é a integral de cluster:

$$b_n(N,T) = \frac{1}{Nn!} \int U_n(r_1, \dots, r_n) \prod_{i=1}^n d^3 r_i \quad (5.13)$$

onde $U_n(r_1, r_2, \dots, r_n)$ são funções de cluster construídas a partir da função simétrica:

$$W_n(r_1, \dots, r_n) = \text{Tr}_n \exp(-\beta H_N) \quad (5.14)$$

e

$$\begin{aligned} U_1(r_1) &= W_1(r_1) \\ U_2(r_1, r_2) &= W_2(r_1, r_2) - W_1(r_1) \cdot W_1(r_2) \\ &\vdots \\ &\vdots \end{aligned} \quad (5.15)$$

A convergência da expansão (5.1) no limite termodinâmico da energia livre (5.6) é uma questão não trivial em aberto para o modelo em consideração. A primeira vista poderíamos argumentar que a baixas temperaturas, $\beta \gg 1$, existe uma região de atividade pequena, $z \ll 1$, dado que $z = \exp(-\beta h)$, e z delimita o raio de convergência da série na vizinhança de $z=0$. Por outro lado queremos investigar a magnetização espontânea e necessitamos de informação a respeito da convergência da série na vizinhança de $z=1$ (quando $h=0$) de (5.7). Para isto será necessário calcular todos os coeficientes b_n da série. Wortis (1965) sugere tomar $Q_n=0$ para $n > 2NS$, dado que a restrição cinemática limita o número total de magnons no sistema. Deste modo, a exem-

§ Este desenvolvimento é análogo a Huang (1968), Sect.14.2 com ligeiras modificações na notação, em particular tomando N por V e n por N .

plo de uma interação do tipo esfera dura, a soma (5.1) seria finita e não existiria raízes reais positivas de $Z(N,T,h) = 0$ para qualquer N fixo, no polinômio potência de z e $f(N,T,h)$ seria uma função analítica em z . Este argumento entretanto é insatisfatório no limite termodinâmico, quando $N \rightarrow \infty$.

Os teoremas gerais que garantem a convergência da série (5.10) impõem drásticas restrições ao potencial de interação Ruelle (1969). De fato, somente um número limitado de potenciais físicos de interesse, como o do tipo esfera dura ("hard-core"), satisfazem estas condições. Constitui um desafio provar que o potencial de interação entre magnons obedece a estas restrições. Contudo é a semelhança existente entre a restrição cinemática e um potencial do tipo esfera-dura, onde todas as condições estão satisfeitas, inclusive a de estabilidade Ruelle (1969), que justifica o procedimento da expansão em série de cluster.

É evidente que caso conhecessemos todos os coeficientes série $b_n(N,T)$ e estimado o limite termodinâmico $b_n(T)$ poderíamos investigar diretamente a convergência de $f(T,h)$ em (5.8). Porém só é possível conhecer exatamente o segundo termo da série $b_2(T)$ pois na prática calcular um termo n qualquer equivale a resolver um problema quântico de n corpos, que só é factível para um sistema de partículas livres. (ver por exemplo Huang (1960)).

5.2 - Estimativa do Coeficiente de Virial para um Sistema de Magnons Livres.

Lee e Yang (1959) desenvolveram um método de grande utilidade para a expansão em cluster de sistemas quânticos, onde os efeitos de simetrização da função de onda devem ser levados em consideração.

O coeficiente de virial para um sistema de Bose livre, são: § (ver Pathria (1972), Sect.9.8 para maiores detalhes)

$$b_1^0 = \text{Tr} (U_1)^1 / N.1 \quad (5.16)$$

§ O índice 0 será usado para realçar que se trata do coeficiente de virial associado a um sistema de magnons livres.

Para calcular o traço, podemos usar a representação de momentos que diagonaliza a função de cluster U_1 , usando (5.15), temos:

$$\langle k' | U_1 | k \rangle = \langle k' | W_1 | k \rangle = \delta_{kk'} \cdot \exp(-\beta \epsilon_\alpha(k)) \quad (5.17)$$

onde δ é o delta de Kroenecker tri-dimensional e $\epsilon_\alpha(k)$ é dado por (4.17), logo (5.16) pode ser reescrito como:

$$b_n^0(N, T) = \frac{1}{N} \sum_k \exp(-n \beta \epsilon_\alpha(k)) \quad (5.18)$$

para a dimensão $\nu=3$, e no limite termodinâmico,

$$\underline{b}_n^0(T) = \lim_{N \rightarrow \infty} b_n^0(N, T) = \frac{1}{n \cdot (2\pi)^3} \left[\int_{|B|} \exp(\beta \epsilon_\alpha(k)) dk \right] \quad (5.19)$$

onde $|B| \equiv [-\pi, \pi]^3$ denota a primeira zona de Brillouin.

O modelo anisotrópico ($\alpha < 1$) introduz uma lacuna (4.21) no espectro do momento em $k=0$. Esta anisotropia terá como efeito o aparecimento de um decaimento exponencial na temperatura do tipo $\exp(-\beta 2J\nu(1-\alpha))$ e b_n não será uma série de potencia da temperatura, dado que a exponencial decai mais rápido que qualquer polinômio, e $M(T) / M(0) \sim 1 - \exp(-\beta c)$ para $\beta \gg 1$ e $c > 0$. Como observamos, Brito(1982) este tipo de decaimento da magnetização espontânea é o mesmo que esperaríamos no modelo de Ising, quando $\alpha=0$.

No caso isotrópico, b_n será uma série de potências de T , e

$$\underline{b}_n^0 = \frac{e^{-2Jn\beta}}{n} \left[\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{2Jn\beta \cos k} \right]^3 = e^{-6Jn\beta} \cdot [I_0(2Jn\beta)]^3 \quad (5.20)$$

onde $I_0(x)$ é a função de Bessel de argumento imaginário e tem uma expansão assintótica para grandes argumentos (ver por exemplo fórmula 814.1 de Dwight (1961)):

$$\underline{b}_n^0 = \frac{1}{4\pi J\beta} \left[\frac{1}{n^{5/2}} + \frac{3}{8(2J\beta)n^{7/2}} + \frac{33}{128(2J\beta)^2 n^{9/2}} \right] + o(\beta^{-11/2}) \quad (5.21)$$

Introduzindo $\underline{b}_n^0$ em (5.10), temos a magnetização espontânea em série de potências da temperatura:

$$M(T)/M(0) = 1 - \frac{1}{2}(3/2) \theta^{3/2} - \frac{9}{4} \frac{1}{2}(5/2) \theta^{5/2} - 9\pi^2 \frac{1}{2}(9/2) \theta^{5/2} + \dots + o(\theta^{9/2}). \quad (5.22)$$

onde $\Theta = kT/2\pi JSz$, k é a constante de Boltzmann, z o número de vizinhos mais próximos, $\zeta(x)$ é a função Zeta de Riemann: $\zeta(x) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-x}$.

5.3 - Cálculo do Segundo Coeficiente de Virial

O 2º coeficiente de virial é obtido através de $U_2(r_1, r_2)$ de (5.13) e a correção ao termo livre b_2^0 será:

$$\delta b_2 = \frac{1}{2N} \cdot \text{Tr}_2 \left\{ \exp[-\beta(H_0 + V/2S)] - \exp(-\beta H_0) \right\} \quad (5.23)$$

onde H_0 é o Hamiltoniano de magnons livres restrito a 2 partículas, $n=2$. Para sistemas de spin grande $S \gg 1$, o potencial de $V/2S$ pode ser entendido como uma perturbação fraca ao sistema de magnons livres.

Para operadores A e B qualquer, vale a propriedade:

$$C = A + B, \quad \exp(-\beta C) - \exp(-\beta A) = \int_0^\beta d\beta' \exp(-\beta' C) \cdot B \cdot \exp((\beta' - \beta)A). \quad (5.24)$$

aplicando (5.24) sucessivamente em (5.23), temos:

$$\begin{aligned} \text{Tr}_2 \exp[-\beta(H_0 + V/2S)] &= \text{Tr}_2 \exp(-\beta H_0) + \text{Tr}_2 \left\{ -\frac{1}{2S} \int_0^\beta d\beta' e^{-\beta' H_0} V e^{-(\beta - \beta') H_0} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{(2S)^2} \int_0^\beta d\beta' \int_0^{\beta'} d\beta'' e^{-\beta'' H_0} V \cdot e^{(\beta' - \beta'') H_0} \cdot V \cdot e^{(\beta'' - \beta) H_0} \right\} + \\ &\quad + O(S^{-3}) \end{aligned} \quad (5.25)$$

Esta expansão pode ser pictoricamente representada através de uma série de gráfico (ver Yang e Lee (1959)), de modo a realçar as interações relevantes e

$$\text{Tr}_2 e^{-\beta(H_0 + V/2S)} = \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} 1' & 2' & \beta \\ | & | & \\ 1 & 2 & 0 \end{array} \\ + \begin{array}{ccc} 1' & 2' & \beta \\ | & | & \\ 1 & 2 & 0 \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \beta' \end{array} \\ + \begin{array}{ccc} 1' & 2' & \beta \\ | & | & \\ 1 & 2 & 0 \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \beta' \\ \text{---} \beta'' \end{array} \\ + \dots \end{array} \quad (5.26)$$

a linha vertical representa a evolução livre da partícula no intervalo de tempo determinado por β , o primeiro gráfico é a evolução livre e o segundo representa uma única interação no instante β' , interação esta representada pelo segmento horizontal e os demais termos representam contribuições envolvendo um número maior de interações. Não existem critérios gerais a respeito da convergência da série (ver por exemplo Lee e Yang (1959)), porém o nosso parâmetro de expansão é S^{-1} .

Para conhecer b_2 exatamente é necessário resolver o problema envolvendo a interação de 2 magnons, como em Lee e Yang (1959) e Pathria e Kawatra (1962). Wortis estuda em detalhe o espectro de um sistema de 2 magnons em 3 dimensões, em particular a respeito da existência ou não de estados ligados, porém uma solução explícita para as funções de onda inexiste.

Calcularemos a contribuição do 1º termo da série e uma estimativa do 2º termo será desenvolvida no Apêndice C. A estimativa de outros termos de ordem superior envolve uma crescente complexidade de cálculo e são de menor interesse, haja visto que são proporcionais a S^{-n} , $n > 2$ e estamos considerando $S \gg 1$.

Expandindo (5.23) em potências de S até ordem S^{-1} ,

$$N \delta b_2 = -\beta S^{-1} \cdot \text{Tr}_2 (V \cdot e^{-\beta H_0}) + O(S^{-2}) \quad (5.27)$$

Com esta aproximação o problema se reduz a computar o Tr_2 (traço restrito ao setor de 2-magnons) e isto pode ser feito no espaço dos momentos:

$$N \delta b_2 \sim \sum_{k_i, k_j} \langle k_i, k_j | V(k_1, k_2, k_3, k_4) \cdot \exp(-\beta \sum_k \epsilon_k a_k^+ \cdot a_k) | k_i, k_j \rangle \lambda_{ij}^2 \quad (5.28)$$

onde λ_{ij} é um fator de normalização: $\lambda_{ii} = \sqrt{2}$ e $\lambda_{ij} = 1$ se $i \neq j$ e $V(k_1, k_2, k_3, k_4)$ é dado por (4.19), onde usamos a notação de ϵ_k para $\epsilon_*(k)$.

Usando o fato de que $a_k |0\rangle = 0$ e as relações de comutação (4.19) temos:

$$N \delta b_2 \sim \sum_{k, k'} \exp[-\beta (\epsilon_k + \epsilon_{k'}) \langle k k' | V | k k' \rangle] \lambda_{k k'} \quad (5.29)$$

o valor esperado de $\langle k, k' | V | k, k' \rangle$ esta calculado no Apêndice C., e:

$$\langle k, k' | V | k, k' \rangle = \frac{1}{N} \cdot \sum_{\substack{k, k' \\ k \neq k'}} [J(k) + J(k') - J(0) - J(k-k')] + \frac{1}{N} \cdot \sum_K [J(k) - J(0)] \quad (5.30)$$

No limite termodinâmico o 2º termo de (5.30) é nulo, pois

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N^2} \sum_K \exp(-2\beta\epsilon_K) \cdot [J(k) - J(0)] = 0 \quad (5.31)$$

O primeiro termo de (5.30), responsável pela contribuição principal, é justamente o Hamiltoniano diagonal proposto por Mattis (1980), eq.5.117, para descrição aproximada da interação dinâmica. Nosso desenvolvimento não só justifica esta aproximação, como propõe um esquema para avaliar as demais correções através da expansão (5.25), sem a necessidade do uso da teoria de perturbação tal como desenvolvido por Mattis (1981).

No limite termodinâmico, a única contribuição relevante advém do Hamiltoniano diagonal de Mattis:

$$\delta b_2 \sim \beta S^{-1} \cdot \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N^2} \cdot \sum_{\substack{k, k' \\ k \neq k'}} \left\{ [J(k) + J(k') - J(0) - J(k-k')] \times \exp(-\beta(\epsilon_k + \epsilon_{k'})) \right\} \quad (5.32)$$

Esta soma só pode ser realizada através de computação numérica. Na expansão da magnetização em série de potências da temperatura o ponto de interesse reside na avaliação da ordem mais baixa de potência de T , introduzida pela correção devido a interação dinâmica. Com vista a estimar esta correção, basta estimar a contribuição advinda da região de baixos momentos, $k \approx 0$, como usualmente é feito em Dyson II, Akhiezer (1968), Kefffer (1966), e nesta aproximação:

$$[J(k) + J(k') - J(0) - J(k-k')] \approx -J(0) \cdot \left[-k \cdot k' + \frac{1}{2} |k|^2 |k'|^2 \right] + O(k^3) \quad (5.33)$$

os termos de ordem superior fornecem uma contribuição de ordem igual e superior a T^5 na série.

O primeiro termo de (5.33) fornece uma contribuição nula, pois é um produto escalar e corresponde à integração de

uma função ímpar no intervalo da primeira zona de Brillouin.

No limite termodinâmico a soma (5.32) pode ser transformada em uma integral,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \cdot \sum_k f(k) \Rightarrow \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\text{IB}} f(k) d^d k \quad (5.34)$$

A soma (5.32) após (5.34) transforma-se em:

$$\delta b_2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \delta b_2 = - \frac{\beta J}{2S(2\pi)^d} \left[\int_{-\pi}^{\pi} e^{-\beta \epsilon_k} \cdot |k|^2 d^d k \right]^2 \quad (5.35)$$

A integral (5.35) só pode ser computada numericamente. Apesar disto ela pode ser aproximada por uma integral gaussiana permitindo que a integração na variável de momento seja estendida ao infinito. O erro cometido nesta aproximação é exponencialmente pequeno para baixas temperaturas ($\beta \gg 1$) dado que $\epsilon_k \sim k^2$ para baixos momentos (ver Keffer (1966) para uma discussão detalhada deste procedimento).

A integral (5.35) pode ser aproximada por:

$$\begin{aligned} b_2 &= - \frac{\beta J}{2S(2\pi)^d} \cdot \left[2\pi \int_0^\infty \exp(-\beta J k^2) \cdot k^4 dk \right]^2 \\ &= - \frac{\beta J}{2S(2\pi)^4} \cdot \left[\frac{\Gamma(5/2)}{2 \cdot (\beta J)^{5/2}} \right]^2 \\ &= - \frac{3}{16\pi^3 (2S) \cdot (2\beta J)^4} \cdot \frac{3}{4} \end{aligned} \quad (5.36)$$

Este resultado concorda com Wortis (1965) em primeira ordem de S^{-1} , à menos de um fator 3/4 no coeficiente. A expansão de Wortis (1965) é distinta da nossa uma vez que se baseia no método das funções de Green e de informação do espectro de energia do sistema de 2 magnons, Wortis (1963).

A correção proposta por (5.36) está de acordo com Dyson II, eq.131, naquilo que ela encerra de essencial: (a) É uma correção negativa e (b) é proporcional à T^4 . Esta correção vem elucidar uma série de resultados discrepantes anteriores a Dyson, como já discutimos na Introdução. Embora o coeficiente do termo de correção (5.36) esteja de acordo com Wortis (1965) e no essencial com Dyson II, difere deles somente quanto a valores numéricos.

6. A CONTRIBUIÇÃO DA INTERAÇÃO DINÂMICA À ENERGIA LIVRE

Nos Capítulos anteriores vimos como um sistema de bósons é uma caricatura bastante útil à análise do comportamento do modelo de Heisenberg ferromagnético a baixas temperaturas e para sistemas de magnitude de spin grande. A limitação do número de desvios de spin em cada sítio, necessariamente, introduz uma interação extra, a restrição cinemática. Como vimos no Capítulo 3, esta interação é de difícil manuseio e inibe a busca de resultados rigorosos.

Este obstáculo força-nos a retomar o Hamiltoniano de Heisenberg na descrição de operadores de momento angular e pesquisar diretamente suas propriedades nesta representação. Diferente do formalismo de Dyson, que inclui na interação dinâmica termos quárticos oriundos da parte XY do Hamiltoniano de Heisenberg, neste Capítulo o Hamiltoniano será dividido de modo que a interação dinâmica seja restrita à parte Ising mais um termo quadrático. Esta divisão, diversa da desenvolvida no Cap.4, reflete a diversidade de objetivos. Nos Capítulos precedentes buscava-se estimar os efeitos da interação dinâmica na série de potências da magnetização em função da temperatura, através dos métodos usuais da teoria de perturbação, ao passo que neste Capítulo buscar-se-á estabelecer de modo criterioso os limites de temperatura e magnitude de spin em que a interação dinâmica deixa de ser relevante, do ponto de vista termodinâmico.

Os objetivos deste Capítulo podem ser resumidos através da resposta a seguinte questão: Em que limites de temperatura e magnitude de spin a interação dinâmica pode ser desprezada? A resposta será estabelecida através do Teorema 6.7, na página 57, e é o resultado principal deste Capítulo.

Usaremos o método desenvolvido por Fröhlich e Lieb (1978) (FL) (neste Capítulo, daqui para frente, vamos notar es-

ta referência, simplesmente por (FL)).

Na Secção 6.1 o modelo será definido e um limitante para a diferença da energia livre para os modelos com e sem interação dinâmica será obtido. Na Secção 6.2 será obtido um limitante superior para o valor esperado da interação dinâmica em função de operadores projetores especialmente construídos. Na Secção 6.3 é introduzida a técnica da positividade por reflexão de modo a estabelecer um limitante para uma média de observáveis locais em termos de uma média de observáveis globais através da estimativa do tabuleiro de xadrez (Chessboard Theorem). O passo mais delicado do programa encontra-se na Secção 6.4, onde parte do desenvolvimento de FL será utilizado, com vistas a demonstrar o Teorema 6.7. Como estas estimativas envolvem uma série de cálculos específicos, parte deles será apresentada nos Apêndices D e E.

6.1 - A ENERGIA LIVRE

Considere-se o modelo de Heisenberg descrito em (2.1)

$$H = - \frac{1}{2s} \cdot \sum_{\langle ij \rangle} \left\{ J_{ij}'' (S_i^z S_j^z - s^2) + J_{ij}^\perp (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) \right\} + h \sum_{i \in \Lambda} (S_i + S_i^z) \quad (6.1)$$

onde $\langle ij \rangle$ são vizinhos mais próximos, Λ é um domínio finito na rede hipercúbica $\mathbb{R}^v$, e $i, j \in \Lambda$, a constante de exchange obedece:

$$J_{ij}^\perp = \alpha J_{ij} \quad 0 \leq \alpha < 1. \quad (6.2)$$

onde

$$J_{ij}'' = J_{ij}''(|i-j|) = \begin{cases} J & \text{se } |i-j| = 1 \\ 0 & \text{de outro modo.} \end{cases} \quad (6.3)$$

pode-se reescrever a interação Ising $S_i^z \cdot S_j^z$ como:

$$-S_i^z \cdot S_j^z = \frac{(S_i^z - S_j^z)^2}{2} - \frac{(S_i^z)^2 + (S_j^z)^2}{2} \quad (6.4)$$

introduzindo (6.4) em (6.1),

$$H = \frac{J}{2s} \cdot \sum_{\langle ij \rangle \in \Lambda} \left\{ \frac{(S_i^z - S_j^z)^2}{2} - (S_i^z)^2 \right\} - \alpha \sum_{i \in \Lambda} S_i^+ \cdot S_j^- \left\} + h \sum_{i \in \Lambda} (S_i + S_i^z) \quad (6.5)$$

onde usamos (6.3) e a propriedade de simetria por translação.

Os operadores de spin obedecem a propriedade: (ver Apêndice B, (B.29)).

$$(S_i^z)^2 = S(S+1) - S_i^+ S_i^- + S_i^z \quad (6.6)$$

introduzindo (6.6) em (6.5),

$$H_\Lambda = \frac{J}{2S} \sum_{\langle ij \rangle} [(S_i^z - S_j^z)^2/2 + z S_i^+ S_i^- - (S_i^z + S)] - \alpha S_i^+ S_j^- + h \sum_{i \in \Lambda} (S + S_i^z) \quad (6.7)$$

onde z é o número de vizinhos mais próximos, e:

$$H_\Lambda = (J/4S) \cdot \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^z - S_j^z)^2 + (J/(2S)) \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^+ S_i^- \cdot z - \alpha S_i^+ S_j^-) + (h - J/(2S)) \sum_{i \in \Lambda} (S_i^z + S) \quad (6.8)$$

de um modo compacto,

$$H_\Lambda = H_\Lambda^k + H_\Lambda^D, \quad H_\Lambda^k = H_\Lambda^O + H_\Lambda^d \quad (6.9)$$

onde:

$$H_\Lambda^D = J/(4S) \cdot \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^z - S_j^z)^2 \geq 0 \quad (6.10)$$

e

$$H_\Lambda^d = -Jz/(2S) \cdot \sum_{i \in \Lambda} (S_i^z + S) \quad (6.11)$$

e

$$H_\Lambda^O = 1/(2S) \cdot \sum_{\langle ij \rangle} S_i^+ \cdot D_\alpha(i, j) S_j^- \quad (6.12)$$

onde

$$D_\alpha(i, j) = Jz \delta_{ij} - \alpha J_{ij} \quad (6.13)$$

e δ_{ij} é o delta de Kroenecker usual.

Como o fator de anisotropia α desempenha um papel análogo ao do campo magnético externo, considerar-se-á $h=0$.

À título de comparação com o modelo bosônico anterior, e tão somente isto, façamos a transformação de Holstein-Primakoff (2.40c) - (2.42c), e:

$$H^D = P_s \cdot \left\{ 1/(4S) \cdot \sum_{\langle ij \rangle} J (n_i - n_j)^2 \right\} \cdot P_s \quad (6.14)$$

$$H^d = P_s \left\{ (-Jz/(2S)) \cdot \sum_{i \in \Lambda} n_i \right\} P_s \quad (6.15)$$

$$H^0 = P_s \left\{ \sum_{\langle i,j \rangle} f^{1/2}(n_i) a_i \cdot D_{\alpha}(i,j) \cdot a_j^+ \cdot f^{1/2}(n_j) \right\} P_s \quad (6.16)$$

Vê-se que a interação dinâmica, H_{Λ}^D , tal como será entendida neste Capítulo, está associada aos termos quadráticos. No limite de magnitude de spin grande, $S \gg 1$, e $f_s(n) \approx 1$, o Hamiltoniano H_{Λ}^0 converge para o Hamiltoniano livre de ondas de spin H_0^0 (4.10). Percebe-se que H_{Λ}^0 , contém as características principais das ondas de spin livre, além de estar associado à parte XY do modelo de Heisenberg. O termo diagonal (6.15) é proporcional à S^{-1} e fornece uma contribuição pequena, próximo do estado fundamental, quando $n_i \approx 0$. Nesta análise, o termo (6.15) será incorporado à H_{Λ}^0 .

Para o Hamiltoniano H_{Λ} , a energia livre a ele associada é definida por

$$f_H(|\Lambda|, \beta, S) = (-\beta |\Lambda|)^{-1} \cdot \text{Ln Tr exp}(-\beta H(S))$$

Simplificando a notação, a energia livre associada à H_{Λ} (H_{Λ}^k) será denotada por $f(H_{\Lambda})$ ou $f(H_{\Lambda}^k)$, respectivamente e a dependência de β e de S será omitida. Para o Hamiltoniano H_{Λ} , o valor esperado de um observável $\mathcal{O}$ será definido por:

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{H_{\Lambda}} = \text{Tr} (e^{-\beta H_{\Lambda}} \mathcal{O}) / \text{Tr} e^{-\beta H_{\Lambda}}$$

Queremos demonstrar que a diferença $|f(H_{\Lambda}) - f(H_{\Lambda}^k)|$ é pequena para β e S convenientemente grande. Esta expectativa fundamenta-se numa evidência física. A baixa temperatura, quase todos os spins estão alinhados, para baixo ou para cima, próximo do estado fundamental do ferromagneto. (ver por exemplo Sec. 3.1), logo esperamos que a influência de H_{Λ}^D é pequena. Embora a intuição física seja esclarecedora, precisar estas idéias não é tão simples. Vamos abordar o problema através de uma série de Lemas.

Lema 6.1 - $0 \leq f(H_{\Lambda}) - f(H_{\Lambda}^k) \leq \frac{1}{|\Lambda|} \cdot \langle H^D \rangle_{H_{\Lambda}^k}$ (6.17)

Prova: usando a desigualdade de Peierls-Bogoliubov (ver por exemplo Bogoliubov (1970), ou Bonato (1983)),

$$\text{Ln} \frac{\text{Tr exp} (A + B)}{\text{Tr exp} (A)} \geq \frac{\text{Tr}(\text{exp}(A) B)}{\text{Tr exp} A} \quad (6.18)$$

e das definições acima, têm-se:

$$f(H_A^k) - f(H_A) \leq \frac{1}{|\Lambda|} \cdot \langle H_A^D \rangle_{H_A} \quad (6.19)$$

e,

$$f(H_A) - f(H_A^k) \leq \frac{1}{|\Lambda|} \cdot \langle H^D \rangle_{H^k} \quad (6.20)$$

como H_A^D é um operador positivo definido, (6.10),

$$\langle H_A^D \rangle_{H_A^k} \geq 0 \quad (6.21)$$

reunindo as desigualdades (6.21), (6.20) e (6.19), segue (6.17) §§

A parte restante deste Capítulo limita-se a estimar o valor de $|\Lambda|^{-1} \langle H_A^D \rangle_{H_A^k}$. Para isto será usado os métodos desenvolvidos em FL. Naquele trabalho analisa-se a existência de correlação de longo alcance (LRO) para uma série de modelos, calculando $|\Lambda|^{-1} \langle S_i^z \cdot S_j^z \rangle_{H_A}$ diretamente. Na próxima Secção, baseado no desenvolvimento de FL, $|\Lambda|^{-1} \cdot \langle H_A^D \rangle_{H_A^k}$ será reescrito em termos de operadores projetores especialmente contruídos.

6.2 - Um Limitante Superior para $|\Lambda|^{-1} \cdot \langle H_A^D \rangle_{H_A^k}$.

Considere um estado $|\sigma_i\rangle$, como um auto-estado de S_i^z com auto-valores σ_i , $-S \leq \sigma_i \leq S$. Define-se os operadores projeção no sitio i , de modo que:

$$P_i^{+\delta} = \begin{cases} 1 & \text{se } \sigma_i \geq \delta \\ 0 & \text{de outro modo} \end{cases} \quad (6.22)$$

$$P_i^{-\delta} = \begin{cases} 1 & \text{se } \sigma_i \leq -\delta \\ 0 & \text{de outro modo} \end{cases} \quad (6.23)$$

$$P_i^{<\delta} = \begin{cases} 1 & \text{se } |\sigma_i| < \delta \\ 0 & \text{de outro modo} \end{cases} \quad (6.24)$$

com $0 \leq \delta \leq S$. Das definições (6.22), (6.23) e (6.24) têm-se:

$$\mathbb{1} = P_i^{+\delta} + P_i^{-\delta} + P_i^{<\delta}. \quad (6.25)$$

Os projetores podem ser esquematizados no intervalo de reta co-

mo: $[-S, S]$.

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{ccccccc}
 & \xleftarrow{P^{-\delta}} & & \xleftarrow{P^{<\delta}} & & \xleftarrow{P^{+\delta}} & \\
 -S & & -\delta & 0 & +\delta & & S
 \end{array} \\
 \text{para o caso particular } \delta = 0, \\
 P_i^{\pm\delta} = P_i^{\pm} \quad (\delta = 0)
 \end{array}
 \quad (6.26)$$

Usando os operadores de projeção, tem-se a Proposição

Proposição 6.1- Seja i um ponto arbitrário da rede e $0 < \delta < S$,

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{|\Lambda|} \langle H_{\Lambda}^D \rangle_{H_{\Lambda}^k} &\leq J/(4S) \cdot \sum_j (S-\delta)^2 + 2(S+\delta) \cdot (3S-\delta) \cdot \langle P_i^+ \cdot P_j^- \rangle_{H^k} + \\
 &\quad + 8S\delta \langle P_i^{<\delta} \rangle_{H^k}
 \end{aligned}
 \quad (6.27)$$

onde a soma $\sum_j$ é restrita aos pontos j , vizinhos mais próximos de i .

Prova: O índice inferior de H_{Λ}^k em $\langle \cdot \rangle_{H_{\Lambda}^k}$ será omitido. Devido a invariância por translação, tem-se:

$$\frac{1}{|\Lambda|} \langle H_{\Lambda}^D \rangle = \frac{J}{4S} \cdot \sum_j \langle (s_i^z - s_j^z)^2 \rangle
 \quad (6.28)$$

para qualquer par ij de vizinhos mais próximos e usando (6.25) tem-se:

$$\langle (s_i^z - s_j^z)^2 \rangle = \langle (P_i^{<\delta} + P_i^{-\delta} + P_i^{+\delta}) (P_j^{\delta} + P_j^{-\delta} + P_j^{<\delta}) (s_i^z - s_j^z)^2 \rangle
 \quad (6.29)$$

então,

$$\langle P_i^{<\delta} \cdot P_j^{<\delta} (s_i^z - s_j^z)^2 \rangle \leq 4\delta^2 \langle P_i^{<\delta} \cdot P_j^{<\delta} \rangle
 \quad (6.30)$$

$$\langle P_i^{\pm\delta} \cdot P_j^{\pm\delta} (s_i^z - s_j^z)^2 \rangle \leq (S-\delta)^2 \cdot \langle P_i^{\pm\delta} \cdot P_j^{\pm\delta} \rangle
 \quad (6.31)$$

$$\langle P_i^{-\delta} \cdot P_j^{+\delta} (s_i^z - s_j^z)^2 \rangle \leq 4S^2 \cdot \langle P_i^{-\delta} \cdot P_j^{+\delta} \rangle
 \quad (6.32)$$

$$\langle (P_i^{+\delta} + P_i^{-\delta}) \cdot P_j^{<\delta} \cdot (s_i^z - s_j^z)^2 \rangle \leq (S+\delta)^2 \cdot \langle ((1-P_i^{<\delta}) \cdot P_j^{<\delta}) \rangle
 \quad (6.33)$$

Introduzindo as desigualdades (6.30)-(6.33) em (6.29), usando a invariância na permutação entre os índices i e j , tem-se

$$\begin{aligned}
 \langle (s_i^z - s_j^z)^2 \rangle &\leq 4\delta^2 \langle P_i^{<\delta} \cdot P_j^{<\delta} \rangle + 8S^2 \langle P_i^{-\delta} \cdot P_j^{+\delta} \rangle + \\
 &\quad + (S-\delta)^2 \langle P_i^{\delta} \cdot P_j^{\delta} + P_i^{-\delta} \cdot P_j^{-\delta} \rangle + \\
 &\quad + 2(S+\delta)^2 \cdot \langle (1 - P_i^{<\delta}) \cdot P_j^{<\delta} \rangle
 \end{aligned}
 \quad (6.34)$$

e,

$$\begin{aligned}
 \langle P_i^{+\delta} \cdot P_j^{+\delta} + P_i^{-\delta} \cdot P_j^{-\delta} \rangle &= \langle (P_i^{+\delta} + P_i^{-\delta}) \cdot (P_j^{+\delta} + P_j^{-\delta}) - 2P_i^{+\delta} \cdot P_j^{-\delta} \rangle \\
 &= \langle (1 - P_i^{<\delta}) \cdot (1 - P_j^{<\delta}) - 2P_i^{+\delta} \cdot P_j^{-\delta} \rangle \\
 &= 1 - \langle P_i^{<\delta} \rangle - \langle (1 - P_i^{<\delta}) \cdot P_j^{<\delta} \rangle - \\
 &\quad - 2 \langle P_i^{+\delta} \cdot P_j^{-\delta} \rangle
 \end{aligned}
 \tag{6.35}$$

substituindo (6.35) no segundo termo de (6.34), tem-se:

$$\begin{aligned}
 \langle (s_i^z - s_j^z)^2 \rangle &\leq (s - \delta)^2 + 2(s + \delta) \cdot (3s - \delta) \cdot \langle P_i^{+\delta} \cdot P_j^{-\delta} \rangle + \\
 &\quad + 8s \langle P_i^{<\delta} \rangle + (3\delta^2 - 6s\delta - s^2) \langle P_i^{<\delta} \cdot P_j^{<\delta} \rangle
 \end{aligned}
 \tag{6.36}$$

melhorando a desigualdade, o último termo de (6.36) pode ser negligenciado, uma vez que

$$3\delta^2 - 6s\delta - s^2 < 0 \text{ para } 0 \leq \delta \leq s \tag{6.37}$$

e somando sobre os vizinhos mais próximos,

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{|\Lambda|} \cdot \sum_{\langle ij \rangle} (s_i^z - s_j^z)^2 &\leq \frac{J}{4s} \sum_j \left\{ (s - \delta)^2 + \right. \\
 &\quad \left. + 2(s + \delta) \cdot (3s - \delta) \langle P_i^{+\delta} \cdot P_j^{-\delta} \rangle + \right. \\
 &\quad \left. + 8s \langle P_i^{<\delta} \rangle \right\}
 \end{aligned}
 \tag{6.38}$$

observando-se que

$$\langle P_i^{+\delta} \cdot P_j^{-\delta} \rangle \ll \langle P_i^{+} \cdot P_j^{-} \rangle \tag{6.39}$$

introduzindo (6.39) em (6.38), segue (6.27).

§§

A Proposição 6.1 tem um significado físico simples. Como δ é arbitrário, $(s - \delta)^2$ pode ser escolhido apropriadamente pequeno. Na região de baixa temperatura, quase todos os spins estão alinhados, ou para cima ou para baixo, e nesta região é de se esperar que $\langle P_i^{+} \cdot P_j^{-} \rangle$ seja pequeno, e o mesmo pode-se dizer de $\langle P_i^{<\delta} \rangle$. Para demonstrar este fato de modo rigoroso é necessário transformar o valor esperado de observáveis locais, como a existente em (6.27), em termos do valor esperado de observáveis globais. Isto será feito através das propriedades de Positividade por Reflexão e da estimativa do Tabuleiro de Xadrez.

6.3 - Um Limite Superior Para $\langle P_i^+ . P_j^- \rangle$ e $\langle P_i^{<4} \rangle$

A Proposição 6.1 estabelece um limite superior para o valor esperado global $|\Lambda|^{-1} . \langle H^D \rangle$ em termos do valor esperado de observáveis locais, $\langle P_i^+ . P_j^- \rangle$ ou $\langle P_i^{<4} \rangle$. Através da estimativa do tabuleiro de xadres (Chessboard Theorem), realizaremos a operação inversa, ou seja será obtido um limite superior de $\langle P_i^+ . P_j^- \rangle$ um observável local em termos de observáveis globais. Isto será particularmente útil na estimativa da energia livre. Uma condição para que um funcional obedeça o teorema tabuleiro de xadrez é satisfazer a propriedade da positividade por reflexão (RP), (ver por exemplo Simon (1978), Fröhlich, Israel e Lieb (1978); Dyson, Lieb e Simon (1978). Esta Secção resumirá algumas propriedades e definições existentes nas referências acima para fins de completude.

Seja Π um plano entre os sítios da rede dividindo Λ em duas partes disjuntas congruentes Λ_+ e Λ_- , ($\Lambda_+ \cap \Lambda_- = \emptyset$ e $\Lambda = \Lambda_+ \cup \Lambda_-$). Seja $\mathcal{A}_i$ a álgebra de todas as funções limitadas de spin: $\{(s_i^x, s_i^y, s_i^z)\}$ e, $\mathcal{A}_{\pm} = \bigotimes_{i \in \Lambda_{\pm}} \mathcal{A}_i$ $\mathcal{A} = \mathcal{A}_+ \otimes \mathcal{A}_-$

dado $B \in \mathcal{A}$, define-se θB por:

$$(\theta B)(\{(s_i^x, s_i^y, s_i^z), i \in \Lambda\}) = B(\{(\theta s_i^x, \theta s_i^y, \theta s_i^z), i \in \Lambda\})$$

onde

$$\theta s_i^k = s^k(\theta i) \quad k=x, y, z.$$

e θi é uma reflexão do ponto i por Π .

Definição 6.1:- Um Hamiltoniano H_{Λ} diz-se que satisfaz a propriedade da positividade por reflexão (RP) se:

$$\langle F(\overline{\theta F}) \rangle_{H_{\Lambda}} \geq 0 \quad (6.40)$$

para qualquer função F , limitada, de $(s_i^z, i \in \Lambda)$ pertencente a $\mathcal{A}_+$. A barra em (6.40) indica a operação de conjugação complexa.

Para que um Hamiltoniano obedeça ao critério da positividade por reflexão, é suficiente que seja possível decompor-lo na forma: (ver por exemplo FL)

$$H = A + \theta(\overline{A}) - \sum_k c_k \theta(\overline{c}_k) \quad (6.41)$$

onde $A, c_1, \dots, c_k$ estão em $\mathcal{Q}_+$.

Com estas definições, verifica-se a Proposição:

Proposição 6.2:- H_λ^k satisfaz a propriedade da positividade por reflexão.

Prova: De (6.9), (6.10), (6.11) e (6.12), tem-se:

$$\begin{aligned} H_\lambda^k &= \frac{Jz}{2S} \cdot \sum_i s_i^+ \cdot s_i^- - \frac{\alpha Jz}{2S} \sum_{\langle ij \rangle} s_i^+ \cdot s_j^- - \\ &\quad - \frac{Jz}{2S} \sum_i (s_i^z + s) \\ &= \frac{J}{2S} \left\{ z \sum_i (s_i^+ \cdot s_i^- - s_i^z + s) - \alpha \sum_{ij} (s_i^x \cdot s_j^x + s_i^y \cdot s_j^y) \right\} \end{aligned} \quad (6.42)$$

usando a propriedade (B.29)

$$H_\lambda^k = \frac{Jz}{2S} \cdot \sum_i (s^2 - (s_i^z)^2) - \frac{\alpha J}{2S} \cdot \sum_{ij} (s_i^x \cdot s_j^x + s_i^y \cdot s_j^y) \quad (6.43)$$

Fazendo uma rotação, no sentido anti-horário, de 180° ao redor do eixo x em cada sítio de modo que

$$s_i^x \rightarrow s_i^x, \quad s_i^y \rightarrow s_i^z, \quad s_i^z \rightarrow -s_i^y \quad (6.44)$$

e (6.43) torna-se equivalente ao Hamiltoniano:

$$-H_\lambda = \frac{Jz}{2S} \cdot \sum_i (-s^2 + (s_i^y)^2) + \frac{\alpha J}{2S} \sum_{\langle ij \rangle} (s_i^x \cdot s_j^x + s_i^z \cdot s_j^z) \quad (6.45)$$

na representação matricial usual, verifica-se que s^z e s^x são matrizes reais. Através da decomposição nos setores da rede demonstra-se que H^{xz} obedece a propriedade da positividade por reflexão (ver por exemplo FL). Por outro lado o 1º termo de (6.45) envolve somente variáveis locais e positivas, possui uma representação matricial real, e pode ser decomposto na forma $A + \theta A$, onde

$$A = \frac{Jz}{2S} \sum_{i \in \Lambda_+} ((s_i^y)^2 - s^2) \quad (6.46)$$

e H_Λ^k pode ser escrito na forma (6.41), logo obedece a propriedade da positividade por reflexão.

§§

Consideremos a dimensão $V=3$, $M=N/4$, com $N^3 = |\Lambda|$. Seguindo FL, definamos a "projeção universal"

$$P_\Lambda = \prod_{m=0}^{M-1} \prod_{k=0}^{N-1} \prod_{n=0}^{N-1} \left[P_{(4m,n,k)}^+ \cdot P_{(4m+1,n,k)}^- \cdot P_{(4m+2,n,k)}^- \cdot P_{(4m+3,n,k)}^+ \right] \quad (6.47)$$

Esta projeção pode ser ilustrada através da figura 6.1, onde a projeção que reproduz para cada corte do plano ortogonal ao eixo z , definido pelos sítios de coordenada $z=k$, $k=1,2,\dots,N$.

Y

+	-	+	+	-	-	+
+	-	-	+	+	-	+
+	-	-	+	+	-	+
+	-	-	+	+	-	+
+	-	-	+	+	-	+
+	-	-	+	+	-	+
+	-	-	+	+	-	+
+	-	-	+	+	-	+

X

Figure 6.1: Representa uma configuração desenvolvida por P_Λ (6.47), através de um corte ortogonal ao eixo z , com $N=8$, e $M=2$.

A Proposição 6.2 conclui as hipóteses necessárias para a validade da aplicação do teorema tabuleiro de xadrez, (Theorem 2.2 de FL), disto decorre o Lema:

Lema 6.2 :-

$$\langle P_i^+ \cdot P_j^- \rangle_{H_\Lambda^k} \leq \langle P_\Lambda \rangle_{H^k}^{1/|\Lambda|} \quad (6.48)$$

Prova: Todas as hipóteses do teorema do tabuleiro de xadrez, (Theorem 2.2 de FL) estão satisfeitas, daí decorre a desigualdade.

§§.

Através do Lema 6.2 obteve-se um limite superior para o valor esperado de $\langle P_i^+ P_j^- \rangle_{H_A^k}$ em termos do valor esperado de uma variável global $\langle P_A \rangle_{H^k}$, porém com uma potencia inversa do volume, $|\Lambda|^{-1}$.

De modo análogo pode-se encontrar um limitante superior global para $\langle P_i^{\delta} \rangle_{H_A^k}$. Considere o projetor:

$$P_A^{\delta} = \bigotimes_{i \in \Lambda} P_i^{\delta} \quad (6.49)$$

e temos o Lema:

Lema 6.3:-

$$\langle P_i^{\delta} \rangle_{H_A^k} \leq \langle P_A^{\delta} \rangle_{H^k}^{1/|\Lambda|} \quad (6.50)$$

Prova: idêntica ao Lema anterior. $\square$

Queremos provar que $\langle H_A^D \rangle_{H^k}$ é pequeno para β e S apropriados. Revendo os passos da Secção 6.2 e os Lemas 6.2 e 6.3, basta mostrar que o lado direito de (6.48) e (6.50) são pequenos sob estas condições.

$$6.4 - \text{Um Limitante Superior Para } \langle P_A \rangle_{H_A^k}^{1/|\Lambda|} \text{ e } \langle P_A^{\delta} \rangle_{H^k}^{1/|\Lambda|}$$

A intuição física que nos guia é clara. A baixa temperatura os spins devem estar numa configuração próxima da do estado fundamental, todos os spins para baixo, e este estado é muito distinto de um estado na imagem do projetor P_A definido em (6.47), ou representado na Figura 6.1. Por isto esperamos que $\langle P_A \rangle_{H_A^k}$ seja pequeno para β grande o suficiente. O mesmo raciocínio vale para $\langle P_A^{\delta} \rangle_{H_A^k}$, pois a baixa temperatura as configurações onde $|S_i^z| < \delta$ são igualmente pouco prováveis. Contudo a prova formal destas observações encontra uma série de obstáculos, um dos quais é a natureza quântica dos operadores. Para contorná-la, será utilizado o Teorema da Localização Exponencial., tal como desenvolvido por FL (Theorem 3.1)

De (6.9) verifica-se que H_A^k é uma soma de H_A^0 e H_A^d . Por ora vamos negligenciar a contribuição de H_A^d e reservar para o final desta Secção um comentário a respeito deste procedimento. Nesta aproximação,

$$H_{\Lambda}^k \sim H_{\Lambda}^0 = A_{\Lambda} + B_{\Lambda} \quad (6.51)$$

onde,

$$A_{\Lambda} = \frac{Jz}{2S} \sum_{i \in \Lambda} S_i^+ \cdot S_i^- = \frac{Jz}{2S} \sum_{i \in \Lambda} (S(S+1) - S_i^z(S_i^z - 1)) \quad (6.52)$$

e A_{Λ} é positivo definido, pois $(\Psi, S_i^z \Psi) \leq S$, e A_{Λ} é representado por uma matriz diagonal.

$$B_{\Lambda} = - \frac{\alpha J}{2S} \sum_{\langle ij \rangle \in \Lambda} S_i^+ \cdot S_j^- \quad (6.53)$$

denote-se por $|0\rangle = \bigotimes_{i \in \Lambda} |\sigma_i\rangle$, tal que $\sigma_i = -S$, o estado com todos os spins alinhados para baixo.

Lema 6.4: - $|0\rangle$ é o estado fundamental de A_{Λ} e de H_{Λ}^k , com autovalor de energia zero, e B_{Λ} é "dominado" por A_{Λ} , ou seja

$$\pm \frac{1}{\alpha} B_{\Lambda} \leq A_{\Lambda} \quad (6.54)$$

Prova: -

Verifica-se diretamente que:

$$\langle 0 | H_{\Lambda}^k | 0 \rangle = \langle 0 | A_{\Lambda} | 0 \rangle = 0. \quad (6.55)$$

demonstrar (6.54) é equivalente a provar que:

$$0 \leq \frac{Jz}{2S} \sum_{ij} S_i^+ D_{ij}(\alpha) \cdot S_j^- \geq 0 \quad (6.56)$$

onde $D_{ij}(\alpha) = Jz \delta_{ij} - \alpha J(1 - \delta_{ij})$.

Seja Ψ um vetor qualquer e $\{e_k\}$ uma base de $\mathcal{H} = \mathbb{C}^{2S+1}$,

$$\begin{aligned} \langle \Psi, D \Psi \rangle &= \sum_{\langle ij \rangle} \langle S_i^- \Psi | S_j^- \Psi \rangle D_{ij} \\ &= \sum_k \sum_{ij} \langle S_i^- \Psi | e_k \rangle \langle e_k | S_j^- \Psi \rangle D_{ij} \\ &= \sum_k \sum_{ij} \bar{x}_i^k \cdot \bar{x}_j^k D_{ij} \geq 0 \end{aligned} \quad (6.57)$$

pois para cada k fixo, tem-se:

$$\sum_{ij} \bar{x}_i^k \cdot \bar{x}_j^k D_{ij} \geq 0 \quad (6.58)$$

A demonstração de (6.58) baseia-se no Teorema de Gersgorin, (ver por exemplo Bellman (1960)). As raízes do polinômio característico de D devem estar no interior de um círculo de Centro D_{ii} e raio $\sum_j |D_{ij}|$, para $i=1,2,\dots,N$. Como,

$$J_{22} - \alpha \sum_j |\pm J_{1j}| \geq 0 \text{ para } i \text{ fixo,}$$

as raízes do polinômio característico associado a D são positivas, o que é uma condição necessária e suficiente para que D seja positiva definida Bellman (1960), disto segue (6.58). Como a desigualdade é positiva para cada k fixo, a soma (6.57) também é positiva, daí segue (6.56) e como consequência (6.55). Uma demonstração alternativa seria analisar a transformada de Fourier na rede, diagonalizando D, e a positividade segue do Teorema de Bochner-§§.

Corolário 6.4.1:- O estado fundamental de H_A^k é único.

Prova: O estado fundamental de A_A é único, como pode ser visto na figura 6.2 do Apêndice E. De (6.54),

$$H_A^k = A_A + B_A \geq A_A - \alpha A_A = (1 - \alpha) \cdot A_A \geq 0.$$

como a multiplicidade do estado fundamental é unitária, segue-se o mesmo para H_A^k , pois $0 < \alpha < 1$.

§

A idéia física subjacente ao Lema 6.4 e ao desenvolvimento subsequente reside na desigualdade (6.54). Não nos é dado conhecer o espectro de H_A^k , a menos do seu estado fundamental. Por outro lado, A_A tem um espectro conhecido, pois é uma matriz diagonal com o mesmo estado fundamental de H_A^k e "domina" B_A através de (6.54). A baixa temperatura tanto $\langle P_A \rangle_{A_A}$ como $\langle P_A^{<\delta>} \rangle_{A_A}$ é pequeno. Considerando B_A como uma perturbação fraca de A_A , através de (6.54). $\langle P \rangle_{H_A^k}$ e $\langle P^{<\delta>} \rangle_{H_A^k}$ poderão ser pequeno para uma escolha apropriada de α , δ , β e S.

O Lema 6.4 fornece as hipóteses necessárias para o uso do Teorema da Localização Exponencial (Theorem 3.1 de FL), a saber:

$$i) A_A \geq 0 \quad ii) \pm B_A \leq t A_A \quad 0 < t < 1 \quad iii) A_A + B_A \geq 0.$$

Seguindo o mesmo desenvolvimento de FL, vale o Lema:

Lema 6.5:-

$$\langle P_A \rangle^{1/\Lambda^1} \leq (2S+1) \cdot \exp(-\beta^{1/4}) + t^d \quad (6.59)$$

onde $t = (1 + \alpha)/2 < 1$ e em 3 dimensões,

$$d_1 = \left[\frac{5}{8}, \left\{ \frac{Jz(1-\alpha)}{2(1+\alpha)} \right\}^{1/3} \cdot \beta^{1/4} \right]_+ \quad (6.60)$$

onde $[x]_+$ representa o maior inteiro menor que x . A estimativa de d_1 encontra-se no Apêndice E, (E.10).

Prova: - Seja $E(de)$ a medida espectral do Hamiltoniano H_Λ . Pelo teorema espectral,

$$\text{Tr}(\exp(-\beta H_\Lambda^k) P_\Lambda) = \int_0^\infty \exp(-\beta e) \cdot \text{Tr}(E(de) P_\Lambda) \quad (6.61)$$

seja $\Delta \equiv \Delta(\beta)$, um número positivo a ser escolhido posteriormente,

$$\begin{aligned} \langle P_\Lambda \rangle_{H_\Lambda^k} &= Z_\Lambda^{-1} \left\{ \int_0^{\Delta|\Lambda|} \exp(-\beta e) \cdot \text{Tr}(P_\Lambda E_\Lambda(de)) + \right. \\ &\quad \left. + \int_{\Delta|\Lambda|}^\infty \exp(-\beta e) \cdot \text{Tr}(P_\Lambda E_\Lambda(de)) \right\} \end{aligned} \quad (6.62)$$

onde,

$$I_\Lambda = Z_\Lambda^{-1} \cdot \sum_i' \exp(-\beta e_i) \cdot (\Phi_i, P_\Lambda \Phi_i) \quad (6.63)$$

e

$$\begin{aligned} J_\Lambda &= Z_\Lambda^{-1} \int_{\Delta|\Lambda|}^\infty \exp(-\beta e) \cdot \text{Tr}(P_\Lambda E_\Lambda(de)) \leq \\ &\leq Z_\Lambda^{-1} \cdot \exp(-\beta \Delta|\Lambda|) \cdot \int_{\Delta|\Lambda|}^\infty \text{Tr}(E_\Lambda(de)) \leq \\ &\leq Z_\Lambda^{-1} \cdot \exp(-\beta \Delta|\Lambda|). \end{aligned} \quad (6.64)$$

em (6.61), $\{e_i\}$ são auto-valores de H_Λ^k com auto-vetores associados $\{\Phi_i\}$. e a soma $\sum_i'$ é restrita aos auto-valores $0 \leq e_i \leq \Delta|\Lambda|$. No Apêndice D algumas observações de interesse com respeito a I_Λ são feitas, bem como o Teorema da Localização Exponencial é discutido. Usando (6.60), tem-se:

$$\langle P_\Lambda \rangle^{1/|\Lambda|} \leq I^{1/|\Lambda|} + J^{1/|\Lambda|} \quad (6.65)$$

como $\text{Tr} \mathbb{1} = (2S+1)^{|\Lambda|}$ e $Z_\Lambda \leq 1$, escolhendo $\Delta(\beta) = \beta^{-3/4}$, tem-se:

$$J^{1/|\Lambda|} \leq (2S+1) \cdot \exp(-\beta^{1/4}) \quad (6.66)$$

A estimativa de $I^{1/|\Lambda|}$ é mais extensa e encontra-se no Apêndice E. Juntando as desigualdades (6.65), (6.66) e o valor de d_1 obtido em (E.10), segue a desigualdade (6.59).

§§.

De modo análogo temos o Lema:

Lema 6.6: -

$$\langle P_\Lambda^d \rangle^{1/|\Lambda|} \leq (2S+1) \cdot \exp(-\beta^{1/4}) + t^{d/2}$$

onde $t = (1 + \alpha)/2 < 1$ e em 3 dimensões,

$$d_2 = \left[\frac{1}{4} \cdot \left\{ \frac{(1-\alpha)^2}{2(1+\alpha)} \right\}^{1/3} \cdot \beta^{1/4} \right]_{+} \text{com } \Gamma = \frac{Jz}{2} \cdot (1 + 1/4S) \quad (6.67)$$

Prova: Idêntica a do Lema anterior, exceto quanto a estimativa d_2 que encontra-se no Apêndice E, (E.16). §§.

O resultado principal deste Capítulo é o Teorema:

Teorema 6.1: - Seja $S > 3/2$, então:

$$|f(H_A) - f(H_A^0)| \leq JzS^{-1} + 4SJz(2S+1)\exp(-\beta^{1/4}) + 2SJz(t^{d_1} + t^{d_2}) \quad (6.69)$$

Prova: - Considere-se a desigualdade (6.38) e seja $\delta = S - 3/2$,

$$Jz/(4S) \cdot (S - \delta)^2 \leq Jz/s \quad (6.70)$$

usando os Lemas 6.2 e 6.5,

$$Jz/(4S) \cdot (S + \delta) \cdot (3S - \delta) \langle P_i^{+\delta} \cdot P_j^{-\delta} \rangle \leq \leq 2SJz[(2S + 1) \cdot \exp(-\beta^{1/4}) + t^{d_1}] \quad (6.71)$$

usando os Lemas 6.3 e 6.6,

$$Jz/(4S) \cdot 8s \cdot \delta \cdot \langle P_i^{2\delta} \rangle \leq 2SJz[(2S+1) \cdot \exp(-\beta^{1/4}) + t^{d_2}] \quad (6.72)$$

aglutinando as equações (6.70), (6.71) e (6.72) segue (6.69) §§.

Como $d_1 \propto \beta^{1/4}$ e $d_2 \propto \beta^{1/4}$, a contribuição de t^{d_1} e de t^{d_2} , será exponencialmente pequena, pois $t < 1$ e para tanto necessita-se de uma pequena anisotropia $\alpha < 1$.

Esses resultados foram obtidos negligenciando H_A^d em (6.11). Justificamos aqui este procedimento. Usando (6.9),

$$H_A^k = H_A^0 + H_A^d \quad (6.73)$$

usando as propriedades do Apêndice B, é simples verificar que:

$$[H_A^0, H_A^d] = [H_A^k, H_A^d] = 0. \quad (6.74)$$

Seja $\{\Phi_i\}$ um conjunto normalizado de auto-estados de H_A^0 e $\{e_i\}$ o conjunto de auto-valores correspondente. Através de (6.74), verifica-se que $\{\Phi_i\}$ também são auto-estados de H_A^d com auto-valores associados denotados por f_i e $e_i + f_i = g_i$, onde:

$$H_{\lambda}^d \bar{\Phi}_i = f_i \bar{\Phi}_i \quad f_i \leq 0 \quad (6.75)$$

Retornando ao Lema 6.5 e repetindo os mesmos passos, tem-se:

$$\langle P_{\lambda} \rangle_{H_{\lambda}^k} = T_{\lambda} + J_{\lambda} \quad (6.76)$$

onde,

$$T = Z_{\lambda}^{-1} \cdot \sum_{g_i < \Delta|\lambda|} \exp(-\beta g_i) \cdot (\bar{\Phi}_i, P_{\lambda} \bar{\Phi}_i) \quad (6.77)$$

e,

$$J = Z_{\lambda}^{-1} \cdot \sum_{g_i \geq \Delta|\lambda|} \exp(-\beta g_i) \cdot (\bar{\Phi}_i, P_{\lambda} \bar{\Phi}_i) \leq \leq \exp(-\beta \Delta|\lambda|) \cdot \text{Tr } 1. \quad (6.78)$$

e tanto J (6.78) como J (6.65) seguem a mesma limitação superior. A dificuldade maior reside na estimativa da parte inferior do espectro de H_{λ}^k .

Próximo do estado fundamental de H_{λ}^0 e A_{λ} (6.55), a contribuição de H_{λ}^d é da ordem de $1/S$, e pode ser negligenciada para S suficientemente grande e $g_i \approx e_i$, para $S \gg 1$. Considere por exemplo um estado próximo do estado fundamental onde,

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}_i &= s_i^+ / (2S)^{1/2} |0\rangle, \text{ i ponto qualquer da rede, e} \\ \langle \bar{\Phi}_i | A \bar{\Phi}_i \rangle &= Jz / (2S) \cdot \sum_k \langle \bar{\Phi}_i | [S(S+1) - s_k^z \cdot (s_k^z - 1)] | \bar{\Phi}_i \rangle = Jz \end{aligned} \quad (6.79)$$

e,

$$\langle \bar{\Phi}_i | H^d \bar{\Phi}_i \rangle = -Jz / (2S) \cdot \sum_k \langle \bar{\Phi}_i | (s_i + s_k^z) \bar{\Phi}_i \rangle = -Jz / (2S). \quad (6.80)$$

neste auto-estado particular, $e_i = Jz$ e $f_i = -Jz / (2S)$, logo $g_i \approx e_i$ para $S \gg 1$. Nos estados próximo do estado fundamental, e_i é da ordem $O(1)$, ao passo que f_i é da ordem $O(1/S)$.

De modo mais geral, a mesma questão pode ser analisada em linguagem bosônica. Usando a transformação de Holsteín - Primakoff (2.40c) - (2.42c),

$$H^0 = \sum_{i,j} a_i^+ \cdot f_s^{1/2}(n_i) \cdot D\alpha(i,j) \cdot f_s^{1/2}(n_j) \cdot a_j \quad (6.81)$$

e

$$H^d = -Jz / (2S) \cdot \sum_i a_i^+ \cdot a_i \quad (6.82)$$

No limite $S \gg 1$, $f_s(n_i) \approx 1$, (3.8) e nesta aproximação;

$$H_{\lambda}^0 \sim \sum_{i,j} a_i^+ \cdot D_{\alpha}(i,j) a_j \quad (6.83)$$

e H_{λ}^0 e H_{λ}^d podem ser diagonalizados através da transformação de Fourier na rede (4.16), e:

$$H_{\lambda}^0 \sim \sum_k \epsilon_{\alpha}(k) a_k^+ \cdot a_k, \text{ para } s \gg 1, \text{ e } 0 < \epsilon_{\alpha}(k) < 1 \text{ para } \alpha < 1 \quad (6.84)$$

e,

$$H_{\lambda}^d = -Jz/(2S) \cdot \sum_k a_k^+ \cdot a_k \quad (6.85)$$

e H^0 "domina" H^d para S grande o suficiente.

A dificuldade em fornecer uma demonstração rigorosa desta aproximação reside na impossibilidade de estender o Lema 6.4 ao Hamiltoniano $H_{\lambda}^k = H_{\lambda}^0 + H_{\lambda}^d$, dado que inexistem informações a respeito do espectro de H_{λ}^k , em particular sobre o seu estado fundamental.

7. CONCLUSÃO E DISCUSSÃO

Na busca de uma formulação matemática precisa para a teoria das ondas de spin deparamo-nos com uma série de obstáculos existentes na teoria de Dyson I, II.

Numa primeira etapa foi analisada no Capítulo 2 os distintos mapeamentos existente entre os operadores de spin e os operadores bosônicos, sem restringir-se a um modelo específico.

A equivalência entre as transformações, obtida através da observação de que os distintos mapeamentos estão relacionados entre si através de uma transformação de semelhança, eliminou as restrições, até então existente, a respeito da não Hermiticidade do Hamiltoniano de Dyson. Este fato permite o uso de modo consistente da transformação de Dyson, na análise de diversos modelos de interesse.

O modelo ferromagnético de Heisenberg tem um estado fundamental bem definido. O critério geral desenvolvido na Seção 3.1 analisa a natureza e a unicidade do estado fundamental para os modelos ferromagnéticos.

Quando o Hamiltoniano de Heisenberg é descrito em função de operadores bosônicos, surge a restrição cinemática,, devido a limitação do número de excitações por sítio. Esta restrição é um obstáculo incontornável no cálculo da energia livre. Uma série de autores, além de Dyson, detiveram-se neste problema, porém sem êxito. Uma revisão sucinta deste esforço existe no Apêndice A. Para a maioria destes autores, o trabalho de Dyson I, II, é sempre considerado como um tratamento "rigoroso" da interação cinemática. Na Seção 3.2 detivemo-nos neste problema, reescrevendo os passos principais de Dyson de modo a facilitar a compreensão, e concluímos que os argumentos de Dyson são incorretos e não é possível concluir que a contribuição da restrição cinemática é exponencialmente pequena como função do inverso da temperatura. O raciocínio principal de Dy-

son reside na demonstração da existência de uma lacuna no espectro do operador de Heisenberg bosônico, entre os estados impróprios e os estados próprios. Contudo é possível exibir um contra-exemplo desta asserção de modo a tornar incorrigível a falha existente na demonstração. Mesmo na situação mais simples, no modelo de magnons livres, o erro cometido ao negligenciar a restrição cinemática é de difícil estimativa, sendo um problema em aberto.

Ao realizar a análise no espaço de momentos, Dyson dificulta a compreensão do seu desenvolvimento. Além disto, ele introduz uma "interação extra" que apresenta maiores dificuldades que as existentes a princípio. Mesmo a divisão entre interação dinâmica e cinemática sofre de ambiguidades.

Reescrevendo o Hamiltoniano de Heisenberg numa forma apropriada para a descrição das ondas de spin, logramos no Capítulo 4 reproduzir os passos essenciais do desenvolvimento de Dyson, com a diferença de limitar nossa análise no espaço das configurações. Neste esquema não só a distinção entre a interação cinemática e dinâmica fica transparente, como evita-se a introdução de qualquer tipo de interação extra. O papel da interação dinâmica como uma fraca perturbação ao modelo de magnons livres com uma constante de acoplamento da ordem de S^{-1} fica realçado. Com isto é possível traçar um quadro consistente do modelo de Heisenberg no espaço de bosons.

Relaxando a restrição cinemática, mantendo S fixo e grande no quadro de interação, o modelo pode ser analisado como um sistema de bósons livres. Dentro deste desenvolvimento é natural buscar uma resposta a questão proposta por Dyson:

Qual é a principal correção a magnetização espontânea devido a interação dinâmica?

Usando o método desenvolvido por Lee e Yang (1959), podemos responder a esta questão através da expansão de virial - quântica. A formulação deste método em termos matematicamente precisos é um problema em aberto desde a sua formulação inicial por Lee e Yang (1959), em particular no que se refere a convergência da série em expansão. Este problema e outros correlatos

estão comentados na Secção 5.1, porém sua solução extrapola os limites do modelo aqui analisado e situa-se no campo de resultados rigorosos gerais da Mecânica Estatística. Dentro destas limitações é possível analisar os efeitos da interação dinâmica através de uma expansão assintótica em potências de s^{-1} , como o desenvolvido na Secção 5.3. Fortuitamente a importância do Hamiltoniano diagonal proposto por Mattis (1981) foi realçada. Este Hamiltoniano foi construído por Mattis devido a razões técnicas e sua justificativa a posterior fundamentava-se em correções através de teoria da perturbação. Aqui este Hamiltoniano diagonal surge como uma consequência da conservação do momento dos spins na interação dinâmica e as correções posteriores podem ser obtidas sistematicamente.

Em resposta a questão inicial, verifica-se que a correção devido a interação dinâmica é da ordem de T^4 na temperatura, de S^{-1} na magnitude de spin e negativa. O coeficiente obtido é inferior ao de Wortis (1965) por um fator $3/4$, o que não é de todo surpreendente pois ali foi utilizada uma expansão diversa das nossa e o método de funções de Green. A discrepância numérica entre o nosso coeficiente e o de Dyson II reside no caráter diferente da expansão. No mais, a correção como função da temperatura (T^4), da magnitude de spin (S^{-1}), e do sinal da correção, indicativo de que na média a interação dinâmica é atrativa, esta de acordo com os resultados de Dyson II e Wortis (1965).

Como vimos, a restrição cinemática é um preço inevitável a ser pago quando o Hamiltoniano de Heisenberg é descrito como uma função de operadores bosônicos. A dificuldade em manipular este problema impede uma resposta a questão central da teoria das ondas de spin, a saber:

Para que valores de temperatura e magnitude de spin o Hamiltoniano de magnons livres é uma aproximação aceitável para descrever as propriedades do modelo ferromagnético a baixa temperatura?

O Capítulo 6 é uma tentativa de resposta a esta questão. Restringindo-se ao espaço dos operadores de spin a dificuldade introduzida pela restrição cinemática inexistente. Em compen-

sação é necessário manipular o Hamiltoniano de Heisenberg diretamente com todas as dificuldades a ele inerentes. Fröhlich e Lieb (1978) observaram que o método da positividade por reflexão poderia vir a ser útil no cálculo do valor esperado termodinâmico de observáveis globais em estados de equilíbrio. Foi exatamente isto que fizemos no Capítulo 6, seguindo de perto os passos de Fröhlich e Lieb (1978), que é particularmente útil ao estudo de modelos quânticos.

Uma divisão diferente da desenvolvida no Capítulo 5 do Hamiltoniano de Heisenberg foi realizada de modo que o Hamiltoniano cinético H_A^k corresponde ao Hamiltoniano de ondas de spin livres no limite de $S \gg 1$. A interação dinâmica é redefinida H_A^D é semelhante a anterior (V), exceto quanto a ausência de um termo extra da ordem de S^{-1} incorporado a H_A^k . Por outro lado, em ambos os desenvolvimentos, do Capítulo 5 e 6, o papel desempenhado pela magnitude de spin S na descrição das ondas de spin é realçado. Somente quando a magnitude de spin $S \gg 1$ e de temperatura $\beta \gg 1$ (ou $T \sim 0$) é que a interação dinâmica pode ser desprezada, mas a escolha de β depende de S . Isto é o indicativo de uma expansão assintótica, em contraste a uma expansão convergente, cuja forma é sugerida pelo Teorema 6.1.

Após este trabalho não só a estrutura matemática que relaciona o modelo de Heisenberg ao sistema de ondas de spin foi melhor compreendido como algumas dificuldades foram explicitadas.

Nesta caminhada, muitas vezes seguindo pegadas alheias, alguns obstáculos foram resolvidos, outros contornados, além dos que foram simplesmente saltados e são as pedras do caminho que ficam.

A título de conclusão fazemos nosso o pensamento de Dyson (1979) a respeito do seu trabalho:

"Consegui algum avanço neste problema, mas não consegui resolvê-lo completamente. Ainda não foi totalmente resolvido vinte e quatro anos depois"
acrescentando porém mais quatro anos.

APÊNDICE A :- Revisão Bibliográfica

Alguns trabalhos a respeito das ondas de spin, desenvolvidos após Dyson I,II, serão aqui resumidos de modo a fornecer um panorama geral sobre o assunto, além de resumir uma série de resultados dispersos entre diversas referências.

O critério de escolha dos trabalhos fundamenta-se no papel por eles desempenhados para a compreensão do formalismo matemático das ondas de spin, das aproximações envolvidas e da análise de outras características da interação entre magnons. Assim uma série de trabalhos fundamentados no uso do método das funções de Green, envolvendo as aproximações de fase caótica, ver por exemplo Keffer (1966) e Rui bao e Cho (1981), e os envolvendo renormalizações do espectro de energia (ver por exemplo Rastelli e Lindgård (1979), Wenzel e Wagner (1978), além das referências ali citadas) serão omitidos. Estas aproximações são de difícil controle e os resultados obtidos dependem do grau de consistência com os resultados obtidos através de métodos diferentes. (ver por exemplo a análise crítica de Keffer (1966), Balakrishnan (1980), Brito (1982)).

A revisão mais ampla sobre a teoria das ondas de spin é a de Keffer (1966). Em outro trabalho de revisão anterior Walker (1963) aponta para algumas dificuldades existentes no trabalho de Dyson I,II. Dos livros existentes destaca-se particularmente o de Akhiezer, Bar'yakhtar e Peletminkii (1968) além dos de Mattis (1965) e (1981). Akhiezer e col. refaz cuidadosamente os passos de Dyson e constitui um guia para a compreensão do desenvolvimento de Dyson I,II. Mattis (1981) preve um tratamento simplificado da interação dinâmica que foi confirmado pelos resultados obtidos no Capítulo 5.

A primeira teoria das ondas de spin é o trabalho clássico de Bloch (1930) onde a relação $T^{3/2}$ foi obtida pela primeira vez. Usando um modelo simples, uma cadeia linear de spin 1/2 com condições periódicas de contorno :

$$H(1/2) = -\frac{1}{2}J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j + k \sum_i \sigma_i^z \quad (A.1)$$

onde ($\vec{\sigma}_i$ são matrizes de Pauli). Bloch(1930) demonstrou que uma excitação do estado fundamental poderia ser descrita por uma superposição de ondas de spin. Considerando a função de onda do estado fundamental como:

$$\Psi_0 = \alpha_1 \dots \alpha_N \quad \sigma_1^z \alpha_1 = -\alpha_1 \quad (A.2)$$

o estado mais próximo pode ser imaginado como aquele em que um único spin está invertido e seria descrito pela função de onda:

$$\Psi_\ell = \alpha_1 \dots \alpha_{\ell-1} \cdot \beta_\ell \cdot \alpha_{\ell+1} \dots \alpha_N = \sigma_\ell^+ \Psi_0 \quad (A.3)$$

e Ψ_ℓ não é uma auto-função de $H(1/2)$. Contudo,

$$\Psi_k = \sum_\ell c_\ell^k \Psi_\ell \quad (A.4)$$

uma superposição linear de funções de onda, semelhante a uma perturbação com número de onda k , é uma auto-função de $H(1/2)$ com o valor:

$$E_k = E^{(0)} + k\omega_k \approx k + aJ(1 - \cos k\alpha) \quad (A.5)$$

a: parâmetro da rede e $k\alpha N/2\pi = 0, 1, \dots, N-1$, e $\epsilon_k = k\omega_k$ é a energia quantizada para excitar uma única onda de spin. Da estatística de Bose, com a relação espectral (A.5), obtém-se

$$M(T) / M(0) = 1 - aT^{3/2} \quad a > 0 \quad (A.6)$$

$M(T)$: magnetização espontânea à temperatura T . Esta aplicação da Mecânica Quântica a um modelo simples prevê uma magnetização espontânea, à baixa temperatura, é uma previsão excelente dos resultados experimentais. (ver por exemplo Keffer (1966) para uma discussão detalhada dos resultados experimentais).

Este método foi estendido a modelos mais gerais, para 3 dimensões, para magnitude de spin S qualquer por Møller (1933) e com a superposição de 2 ondas de spin na cadeia linear por Bethe(1931). Uma tentativa de análise da interação entre as ondas de spin, usando a expansão de virial, foi desenvolvida por Van Kranendonk (1955). Uma revisão explorando a analogia entre as ondas de spin e osciladores harmônicos clássicos foi desenvolvida por Van Kranendonk e Van Vleck (1958).

Em 1956, Dyson I,II apresenta dois tipos de interação entre as ondas de spin, a interação cinemática e a dinâmica, que invalidam a hipótese de superposição linear das funções de onda.

Uma investigação a respeito da existência ou não de estados ligados, em função da dimensionalidade, é o trabalho de Wortis(1963), aprimorado por Fernando Perez(1973). Ao contrário de Dyson I,II, Wortis observa a existência de estados ligados em 2 dimensões para valor de momento total K diferente de zero em 3 dimensões e acima de um certo limiar. Em 3 dimensões as energias dos estados ligados que são acessíveis são altas por isto pouco prováveis de serem atingidas pelo sistema de 2 magnons a baixa temperatura.

Alguns trabalhos contribuíram para a compreensão da estrutura matemática do formalismo das ondas de spin. A prova de que elas descrevem o comportamento assintótico (para $t \rightarrow \infty$) das excitações coletivas do modelo ferromagnético de Heisenberg em $T=0^\circ K$ foi demonstrada por Hepp(1972). Dembinski(1964) demonstrou a existência de 3 distintas transformações possíveis discutidas no Capítulo 2, através da análise matricial e das propriedades dos operadores quânticos de spin e de bosons. Como uma aplicação Dembinski (1964) analisa o problema de um anti-ferromagneto, criticando o desenvolvimento formal de Oguchi (1960) e (1961). Oguchi argumenta que a transformação de Dyson I,II, e a de Holstein Primakoff (discutidas no Capítulo 2) fornecem o mesmo resultado quando o operador $f_i(n)$ é aproximado por:

$$f_i(n) = \sqrt{1 - n_i/2S} \simeq 1 - n_i/4S - n_i^2/(32S^2) \quad (A.7)$$

esta expansão só seria possível caso $n_i \ll 2S$. Oguchi(1960) não leva em consideração esta restrição e desenvolve a expansão para o espaço todo, mesmo quando $n_i \rightarrow \infty$, o que foi criticado por Dembinski(1964).

Ressalte-se a diferença entre a expansão (A.7) e a desenvolvida por nós no Capítulo 5. No nosso caso a expansão é feita em potências de S^{-1} no interior do coeficiente de virial, quando a estimativa de magnons livres já foi obtida e estamos anali-

sando a influência da interação dinâmica através do segundo coeficiente de virial. Em contraposição, a expansão A.7 é formal e sem nenhum controle.

A relação entre as distintas representações bosônicas foi observada por Tyablikov (1967) e Herbert (1969). Contudo ambos não exploraram as potencialidades existentes nestas relações tal como fizemos no Capítulo 2.

Um problema central na teoria das ondas de spin consiste em estimar o erro cometido ao negligenciar a restrição cinemática no cálculo da função de partição, tal como foi discutido no Capítulo 3. A extensiva análise de Szeniewski, Morkowski, Szaniecki (1963), além das referências ali citadas, foi uma tentativa de estimar a contribuição da interação cinemática. Embora confirmem os resultados de Dyson, I e II, o argumento por eles utilizado é incorreto. Szaniecki (1962) realiza o desenvolvimento no espaço dos momentos, quando a restrição cinemática só pode ser verificada no espaço de configuração, de modo que somente parte dos estados impróprios são levados em consideração. A crítica de Dembinski (1967) ao tratamento de Szaniecki (1967) do modelo antiferromagnético aplica-se também ao tratamento do modelo ferromagnético de Szaniecki (1962), pois a demonstração da pequenez da interação cinemática pressupõe a validade do argumento de Dyson, no seu principal, como observou o próprio Dyson (conforme citação de Keffer (1966), pg. 62).

A interação cinemática em modelos antiferromagnéticos foi analisada por diferentes métodos por Herbert (1969), Kenan (1967) e Szaniecki (1967). E os resultados por eles obtidos são discrepantes. Enquanto Herbert (1969) conclui que a baixa temperatura o efeito da interação cinemática é relevante, Kenan (1967) mostra que a combinação entre a interação cinemática e dinâmica é pequena. O desconhecimento do estado fundamental do modelo antiferromagnético quântico, levam os autores a redefinir a interação cinemática através de auto-estados não, fisicamente, acessíveis no espaço dos momentos o que torna o desenvolvimento ambíguo e incapaz de fornecer uma resposta aceitável. É curioso observar que ao pretender avaliar a qualidade de uma aproximação uma série de

outras aproximações são feitas e perde-se até mesmo o sentido do que é ou não exato. Estes métodos são de pouca utilidade na estimativa do efeito da interação cinemática, que, como observamos no Capítulo 3, é um instigante problema em aberto.

O método da expansão de virial quântico foi usado para analisar um sistema de magnons interagentes por Greenberg(1963) e Wortis(1965). O primeiro trata o modelo ferromagnético de spin $1/2$ como um gás de rede. Neste modelo a interação cinemática pode ser representada por uma interação do tipo esfera dura ("hard core") na rede, contudo o tratamento desta interação em Greenberg é um tanto obscuro.

A análise mais cuidadosa do trabalho de Dyson foi desenvolvida por Wortis(1965). Wortis procura estender o método das funções de Green, usado com êxito na análise dos estados ligados de 2 magnons em Wortis(1963), para um conjunto de n magnons, $n > 2$. Wortis(1965) tece uma série de considerações críticas ao desenvolvimento de Dyson I, II., por exemplo quanto a introdução de uma interação extra em Dyson II (eq.3.11 do Capítulo 3). Contudo algumas dificuldades persistem e a principal delas é a solução das funções de Green para um sistema de n magnons. Wortis(1965) segue em muitos aspectos o mesmo tratamento da interação cinemática de Dyson, embora ele argumente a superioridade de seu argumento com relação a Dyson I, II. Algumas dificuldades existente em Dyson apontadas por Wortis(1965) foram elucidadas no Capítulo 2. Entretanto os problemas relacionados com o formalismo da expansão quântica de Mayer persistem, tal como discutimos no Capítulo 4, e alguns dos quais inserem-se no campo de resultados rigorosos da Mecânica Estatística.

A crítica desenvolvida por Loly(1970) quanto ao procedimento da expansão em potências de S^{-1} é de alcance limitado da do que é fortemente dependente de outra estimativa aproximada de Mattis(1965).

Outros tratamentos alternativos, às vezes considerado como "rigorosos", como o de Mori e Kawasaki(1962) ou de Wenzel e Wagner(1978) são interessantes quanto a algumas características envolvendo as ondas de spin, porém são de pequena utilidade quanto a compreensão das dificuldades aqui discutidas.

APÊNDICE B :~ OPERADORES DE SPIN

Algumas propriedades dos operadores de spin utilizadas no texto serão aqui desenvolvidas para efeito de completeza. Evitando repetições, não desenvolveremos as propriedades usuais dos operadores de momento angular que podem ser encontrados nos livros texto de Mecânica Quântica, por exemplo Messiah (1960). Um desenvolvimento apropriado ao estudo do modelo ferromagnético é o de Mattis (1981), Cap.3.

Um operador vetorial $\vec{J}$ representa um operador de momento angular se e somente se satisfaz a propriedade:

$$\vec{J} \times \vec{J} = i\vec{J} \quad (B.1)$$

e por exemplo:

$$iJ^z = [J^x, J^y] \quad (B.2)$$

usando (B.1) verifica-se que:

$$[S^2, S^k] = 0, \quad k=x,y,z. \quad (B.3)$$

e restringindo $\vec{J}$ a componente de spin $\underline{S}$

A propriedade (B.3) permite a diagonalização simultânea dos observáveis S^2 e S^z . Estes operadores possuem um conjunto completo de auto vetores $|sm\rangle$ com auto-valores $s(s+1)$ e m respectivamente.

$$S^2 |sm\rangle = s(s+1) |sm\rangle \quad (B.4)$$

$$S^z |sm\rangle = m |sm\rangle \quad (B.5)$$

Resumindo as propriedades essenciais, temos:

$$m = -s, -s+1, \dots, 0, \dots, s-1, s \quad (B.6)$$

definindo

$$S^{\pm} = S^x \pm iS^y,$$

$$(s'm'| S^+ |sm) = \delta_{ss'} \delta_{m+1,m'} \sqrt{(s-m)(s+m+1)} \quad (B.7)$$

$$(s'm'| S^- |sm) = \delta_{ss'} \delta_{m-1,m'} \sqrt{(s+m)(s-m+1)} \quad (B.8)$$

$$(s'm'| S^z |sm) = \delta_{ss'} \delta_{m,m'} m \quad (B.9)$$

$$(s'm'| S^2 |sm) = \delta_{ss'} \delta_{m,m'} s(s+1) \quad (B.10)$$

Em vez dos auto-valores m associados a componente de spin S_z na direção z , introduzimos o número quântico de desvios de spin: $n = s + m$, que está associado ao desvio de S^2 do seu estado de menor valor ($-s$) e n é o auto-valor do operador:

$$N = S^2 + s \quad (B.11)$$

Usando (B.8) podemos definir o estado de vácuo correspondente ao menor auto-valor de N .

$$|0\rangle \equiv |s, -s\rangle \quad \text{onde } S^2 |s, -s\rangle = -s |s, -s\rangle \quad (B.12)$$

e

$$S^- |s, -s\rangle = N |0\rangle = 0 \quad (B.13)$$

Só nos interessa o subspaço de S fixo, por isto omitiremos o índice S do estado $|sm\rangle$. Com a modificação (B.11) e substituindo m por $n-s$, as expressões (B.7) ~ (B.10) podem ser reescritas como:

$$\langle n' | S^+ | n \rangle = \delta_{n+1, n} \sqrt{2s} \cdot \sqrt{n+1} \cdot \sqrt{(1-n/2s)} \quad (B.14)$$

$$\langle n' | S^- | n \rangle = \delta_{n-1, n} \sqrt{2s} \cdot \sqrt{n} \cdot \sqrt{[1-(n-1)/2s]} \quad (B.15)$$

$$\langle n' | N | n \rangle = \delta_{n', n} \cdot n. \quad (B.16)$$

Através da ação sucessiva de S^+ no estado de vácuo, (B.12) pode se construir a base do espaço vetorial:

$$|n\rangle = (n!)^{-1/2} \cdot (S^+ / (2s))^{n/2} |0\rangle \quad (B.17)$$

Os estados $|n\rangle$ são ortogonais, porém não ortonormais, usando (B.15) temos:

$$S^- |n\rangle = \sqrt{2s}^{1/2} \sqrt{n} \cdot \sqrt{[1-(n-1)/2s]} \quad (B.18)$$

e

$$\langle n | m \rangle = \delta_{n, m} \cdot (n!)^{-1/2} \cdot (2s)^{-n/2} \cdot \langle 0 | (S^-)^n | n \rangle \quad (B.19)$$

introduzindo (B.18) sucessivas vezes em (B.19) temos:

$$\langle n | m \rangle = \delta_{n, m} \cdot F(n) \quad \text{com}$$

$$F(n) = 1 \cdot (1-1/2s) \cdot \dots \cdot (1-(n-1)/2s) \quad (B.20)$$

e $n=0, 1, 2, \dots, 2s$. o que pressupõe $F(0) = 1$ e $F(n) = 0$ para $n \geq 2s+1$

O modelo de Heisenberg é definido numa rede Λ de N pontos, onde $\Lambda \subset \mathbb{Z}^v$, v é a dimensão da rede, é descrito por uma função de spin onde em cada ponto da rede existe um spin $\vec{S}_i$, s fixo que interage com os vizinhos mais próximos através de uma constante de troca (exchange) J_{ij} , onde i, j são pontos da rede e vi-

zinhos mais próximos. O espaço de Hilbert total será o produto tensorial dos espaços de Hilbert ortogonais associados a cada ponto:

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{i \in \Lambda} \mathbb{C}_i^{(2s+1)} \quad (\text{B.21})$$

O modelo de Heisenberg em consideração é descrito pelo Hamiltoniano:

$$H_\Lambda = -(2s)^{-1} \cdot \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ J_{ij}^{\parallel} (S_i^z S_j^z - s^2) + J_{ij}^{\perp} S_i^+ S_j^- \right\} + h \sum_i (S_i^z + s) \quad (\text{B.22})$$

onde $\langle ij \rangle$ representam vizinhos mais próximos em Λ .

O número desvio total é representado pelo operador:

$$N_t = \sum_i N_i \quad N_i = S_i^z + s. \quad (\text{B.23})$$

Uma propriedade importante de N_t é:

$$[N_t, H_\Lambda] = 0 \quad (\text{B.24})$$

pois,

$$[N_t, H_\Lambda] = \sum_k \sum_{ij} \left\{ J_{ij}^{\parallel} [S_k^z, S_i^z S_j^z] + J_{ij}^{\perp} [S_k^z, S_i^+ S_j^-] \right\} + h \sum_k \sum_i [S_i^z, S_k^z] \quad (\text{B.25})$$

como

$$[S_i^z, S_k^z] = 0 \text{ e } \sum_k \sum_{i,j} S_k^z S_i^+ S_j^- = 0 \quad (\text{B.26})$$

pois i, j, k percorrem todos os pontos da rede, segue-se (B.24).

Usando a definição de $S^\pm$,

$$S^+ S^- = (S^x + iS^y)(S^x - iS^y) = (S^x)^2 + (S^y)^2 - S^z^2 \quad (\text{B.27})$$

ou:

$$S^+ S^- = s(s+1) - S^z(S^z - 1) \quad (\text{B.28})$$

APÊNDICE C: - CÁLCULO DE $\langle K, K' | V | K, K' \rangle$

Usando a definição de V (4.19) vamos calcular o valor de $\langle K, K' | V | K, K' \rangle$ usando (5.30). De (5.29):

$$T_{\Lambda_2} V \bar{e}^{\beta H_0} = \sum_{1,2} \langle 0 | a_1 a_2 V a_1^\dagger a_2^\dagger | 0 \rangle \bar{e}^{\beta(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \quad (C.1)$$

e

$$\langle 0 | a_1 a_2 V a_1^\dagger a_2^\dagger | 0 \rangle = \sum_{1',2',3',4'} \langle 0 | a_1 a_2 a_{1'}^\dagger a_{2'}^\dagger a_3 a_4 a_{3'}^\dagger a_{4'}^\dagger | 0 \rangle \cdot \Delta(1'+2'-3'-4') \cdot \Phi(1',2';3',4'). \quad (C.2)$$

usando as relações de comutação (4.15):

$$\begin{aligned} \sum_{1',2',3',4'} \langle 12 | a_{1'}^\dagger a_{2'}^\dagger a_3 a_4 | 12 \rangle \cdot \Delta(1'+2'-3'-4') \cdot \Phi(1',2';3',4') = \\ = (\delta_{11'} \cdot \delta_{22'} + \delta_{12'} \cdot \delta_{21'}) (\delta_{13'} \cdot \delta_{24'} + \delta_{14'} \cdot \delta_{23'}) \cdot \langle 12 | a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 | 12 \rangle \cdot \Phi(1',2';3',4') \end{aligned} \quad (C.3)$$

e a restrição Δ esta satisfeita.

Consideremos 2 situações diferentes:

(i) $1=2 = K = K'$

$$\begin{aligned} e, \quad \frac{1}{N} \cdot \sum_{1',2',3',4'} \Phi(1',2';3',4') \cdot (\delta_{11'} \cdot \delta_{22'} + \delta_{12'} \cdot \delta_{21'}) \cdot (\delta_{13'} \cdot \delta_{24'} + \delta_{14'} \cdot \delta_{23'}) \cdot \delta_{12} \cdot \langle 12 | a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 | 12 \rangle = \\ = \frac{2}{N} \cdot [J(K) - J(0)] \end{aligned} \quad (C.4)$$

que é o segundo termo de (5.30).

(ii) $1 = K \neq K' = 2$.

$$\begin{aligned} \sum_{1',2',3',4'} \Phi(1',2';3',4') \cdot (\delta_{11'} \cdot \delta_{22'} + \delta_{12'} \cdot \delta_{21'}) \cdot (\delta_{13'} \cdot \delta_{24'} + \delta_{14'} \cdot \delta_{23'}) \cdot \delta_{12} \cdot \langle 12 | a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 | 12 \rangle = \\ = \frac{4}{N} \cdot \sum_{\substack{1 \neq 2 \\ 1,2}} [J(1) + J(2) - J(0) - J(1-2)] \end{aligned} \quad (C.5)$$

que é precisamente o primeiro termo de (5.30).

A título de completeza podemos estimar o termo de segunda ordem $O(S^{-2})$, ou

$$T_{\Lambda_2} V^2 \bar{e}^{\beta H_0} = \sum_{1,2} \bar{e}^{\beta(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \cdot \langle 12 | V^2 | 12 \rangle \quad (C.6)$$

§ o valor de momento K_i será indicado simplesmente por i.

$$\begin{aligned}
e. \langle 1, 2 | v^2 | 12 \rangle &= \frac{1}{N^2} \cdot \sum_{\substack{j, j', k, k' \\ s, s', t, t'}} \langle 12 | a_1^+ \cdot a_2^+ \cdot a_3 \cdot a_4 \cdot a_5^+ \cdot a_6^+ \cdot a_7 \cdot a_8 | 12 \rangle \times \\
&\times \Delta(1+2-3-4) \cdot \Delta(5+6-7-8) \cdot \Phi(1, 2; 3, 4) \cdot \Phi(5, 6; 7, 8) \\
&= \frac{1}{N^2} \cdot \sum_{\substack{j, j', k, k' \\ s, s', t, t'}} \langle 12 | a_1^+ \cdot a_2^+ \cdot a_7 \cdot a_8 | 12 \rangle (\delta_{1j} \cdot \delta_{2k} + \delta_{1k} \cdot \delta_{2j}) \cdot (\delta_{7t} \delta_{8s} + \delta_{7s} \delta_{8t}) \times \\
&\times \langle 0 | a_3 \cdot a_4 \cdot a_5^+ \cdot a_6^+ | 0 \rangle \cdot (\delta_{4s'} \delta_{3t'} + \delta_{3s'} \cdot \delta_{4t'})
\end{aligned}$$

(C.8)

onde $\sum^i$ significa a soma sobre os momentos k_i^i somente, $i=1, \dots, 8$; e os termos que fornecem o valor esperado não nulo, porém com contribuição trivial no limite termodinâmico foram desprezados.

Usando as relações de comutação (4.15) e a simetria existente na troca de índices:

$$\begin{aligned}
T_{h_2} v^2 \bar{e}^{\beta H_0} &= \frac{1}{N^2} \cdot \sum_{1,2} \bar{e}^{\beta(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \cdot \sum_{3,4} \langle 0 | (a_1 a_1^+)^2 \cdot (a_2 a_2^+)^2 | 0 \rangle \langle 0 | a_3 \cdot a_3^+ \cdot a_4 \cdot a_4^+ | 0 \rangle \\
&\times \Phi(1, 2; 3, 4) \cdot \Phi(3, 4; 1, 2) \times (\delta_{11'} \cdot \delta_{22'} + \delta_{12'} \cdot \delta_{21'}) \times \\
&\times (\delta_{33'} \cdot \delta_{44'} + \delta_{34'} \cdot \delta_{43'}) \cdot \Delta(1+2-3-4).
\end{aligned}$$

(C.9)

$$e. T_{h_2} v^2 \bar{e}^{\beta H_0} = \frac{8}{N^2} \cdot \sum_{1,2} \bar{e}^{\beta(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \cdot \sum_3 \Phi^2(1, 2; 3, 1+2-3').$$

(C.10)

A contribuição $\delta b_2^{(2)}$ para b_2 , no limite termodinâmico, será:

$$\begin{aligned}
\delta b_2^{(2)} &= \frac{8 \beta^2}{(2s)^2} \cdot \frac{1}{(2\pi)^9} \cdot \int_{\mathbb{B}} d^3 k_1 \cdot d^3 k_2 \cdot d^3 k_3 \cdot \bar{e}^{\beta(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \cdot [J(1) + J(2) - J(3-1) - J(3-2)] \times \\
&\times [J(3) + J(1+2-3) - J(3-1) - J(3-2)] \\
&\text{integrando no intervalo } [-\pi, \pi]^3 \text{ na variável } k_3,
\end{aligned}$$

(C.11)

$$\delta b_2^{(2)} = \frac{1}{2} \left(\frac{\beta}{s} \right)^2 \cdot \frac{1}{(2\pi)^6} \cdot \int_{\mathbb{B}} d^3 k_1 \cdot d^3 k_2 \cdot \bar{e}^{\beta(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \cdot [1 + \cos(k_1 - k_2) - \cos(k_1) - \cos(k_2)]$$

(C.12)

A integral (C.12) pode ser estimada através da aproximação:

$$\cos 2(k_1 - k_2) \simeq 1 - 4(k_1 - k_2)^2/2 + 16(k_1 - k_2)^4/4! + O(k^6) \quad (C.13)$$

nesta aproximação, observando a contribuição nula das funções ímpares no intervalo $[-\pi, \pi]$,

$$\delta b_2^{(2)} \sim \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\beta}{s}\right)^2 \cdot \frac{1}{(2\pi)^6} \cdot \left[\frac{\Gamma(s/2)}{\beta^{s/2}}\right]^2 = \frac{2}{(\omega s)^2} \cdot \bar{\beta}^3 \cdot \frac{\Gamma^2(s/2)}{(2\pi)^6} \quad (C.14)$$

A contribuição de 2º ordem é proporcional a T^3 . Isto modifica pouco a estimativa inicial pois é da ordem $O(S^{-2})$ e estamos na região $S \gg 1$.

APÊNDICE D: - COMENTÁRIO A RESPEITO DO TEOREMA DA LOCALIZAÇÃO EXPONENCIAL

Para efeito de completeza e facilidade de leitura, parte do desenvolvimento de Fröhlich e Lieb (1978) será aqui comentado.

A intuição física subjacente ao Teorema da Localização Exponencial é atraente. Queremos obter um limitante superior para $\langle P_\Lambda \rangle_{H_\Lambda^0}$. P_Λ definido em (6.47) e H_Λ^0 em (6.16). P_Λ é um projetor em estados longe do estado fundamental de H_Λ^0 . A alternativa é dividir o espectro de H_Λ^0 através de um parâmetro $\Delta(\beta)$ sutilmente escolhido, de modo a fornecer um limitante para a parte do espectro com energia maior que $\Delta|\Lambda|$. (J_Λ em (6.62)), além de outra parte com energia menor que $\Delta|\Lambda|$ (I_Λ em (6.61)). Para uma temperatura suficientemente baixa, $\beta \gg 1$, é possível encontrar um limitante exponencialmente pequeno para J_Λ . Com a parte inferior do espectro, I_Λ , as dificuldades são maiores, particularmente quando H_Λ^0 é um Hamiltoniano quântico. Embora P_Λ seja uma projeção sobre estados cuja energia média excede $e_0 + \Delta|\Lambda|$, e_0 estado fundamental de H_Λ^0 , I_Λ não é zero, pois P_Λ pode ter elementos de matriz não nulo em auto-estados de H_Λ^0 com energia $e_i < e_0 + \Delta|\Lambda|$, e a soma (6.61) :

$$I_\Lambda = \bar{Z}_\Lambda^{-1} \cdot \sum_i e^{-\beta e_i} (\Psi_i | P_\Lambda \Psi_i) \quad (D.1)$$

não é necessariamente nula para $\beta \gg 1$, pois o espectro de um operador não depende da temperatura. A idéia central reside em mostrar que $(\Psi_i | P_\Lambda \Psi_i) \rightarrow 0$ suficientemente rápido quando $i \rightarrow 0$, e assim é de se esperar que $I_\Lambda \rightarrow 0$ rápido o suficiente quando $\beta \rightarrow \infty$, através de uma escolha apropriada de $\Delta(\beta)$.

O espectro de H_Λ^0 é desconhecido. Contudo ele pode ser decomposto em 2 partes (6.51):

$$H_\Lambda^0 = A_\Lambda + B_\Lambda \quad (D.2)$$

onde o espectro de A_λ é conhecido, ao menos próximo do estado fundamental. B_λ é em geral associado ao modelo XY, cujo espectro é totalmente desconhecido. P_λ é um auto-projetor de A_λ , com imagem localizada nos auto-vetores de A_λ com energia associada, $e_n > e_0 + n\Delta|\lambda|$, para algum $n > 1$. Se $B_\lambda = 0$, $H_\lambda^0 = A_\lambda$ e

$$(\Phi_i | P_\lambda \Phi_i) = (\Psi_i | P_\lambda \Psi_i)$$

pois $e_n > e_0 + n\Delta|\lambda|$, e os respectivos auto-vetores são ortogonais. Caso B_λ for "relativamente pequeno" com relação a A_λ , $B_\lambda \leq \epsilon A_\lambda$, poderíamos imaginar que sua ação nos $\{\Phi_i\}$ com auto-valor de energia associados e_n seria insuficiente para abaixar a energia de e_n até um certo valor limite $e_0 + \Delta|\lambda|$. O princípio da localização exponencial dir-nos-á que os auto-vetores de A_λ , $\{\Phi_i\}$ com energia $e_n > e_0 + n\Delta|\lambda|$, quando expandido em $\{\Psi_i\}$ estão fortemente "localizados" ao redor de $e_1 > e_0 + \Delta|\lambda|$, o que implica na pequenez de $(\Psi_i | P_\lambda \Psi_i)$ quando $e_i \approx e_0$.

Esquemáticamente podemos representar os espectros:

P_ρ projeção espectral de A_λ , correspondente ao intervalo do espectro $[\rho, \infty)$, com $M_\rho = P_\rho \mathcal{H}$ (o subspaço dos auto-vetores de A_λ com auto-valores $\geq \rho$). Com as hipóteses:

$$H^0 \Phi = \lambda \Phi \quad \Phi \in M_\rho \quad B \Psi \in M_\rho \quad 0 \leq j \leq d \quad j \text{ inteiro}$$

$$j \text{ inteiro e } \sigma = \frac{\epsilon \rho}{\rho - \lambda} < 1 \quad \text{ou } \rho > \lambda(1 - \epsilon)^{-1}$$

Os parâmetros ρ e ϵ são escolhidos de modo a cons-

truir uma lacuna no espectro de $A_\lambda, \xi - \lambda > 0$. Se a importância relativa de B_λ com relação a A_λ for grande, $\epsilon \sim 1$ e $\xi/\lambda \gg 1$, maior deve ser o tamanho desta lacuna. O princípio da localização exponencial investiga se $\psi = \sum_i c_i \phi_i$

então o coeficiente c_i só será relevante para $e_i > \lambda$, de modo que $(\psi, \phi) \sim 0$. Em resumo, gostaríamos de obter informação a respeito do espectro de H_λ^0 . Na impossibilidade de tal feito, busca-se explorar o espectro conhecido de A_λ , expandir a auto-função de H_λ^0 em termos dos auto-vetores de $A_\lambda \{\psi\}$. O resultado obtido é que $P_\lambda \phi$ é uma projeção em auto-vetores de A_λ com auto-estados de energia associados $e > \xi$, de modo que

$$\langle \phi, P_\lambda \phi \rangle \leq \sigma^{2d} \text{ e } \langle \phi, P_\lambda \phi \rangle \rightarrow 0, d \rightarrow \infty.$$

pois $\sigma < 1$

O Teorema da localização exponencial (Theorem 3.1, pg. 254 de Fröhlich e Lieb (1978)) pressupõe A_λ e B_λ operadores auto-adjuntos e:

i) $A_\lambda \geq 0$, ii) $B_\lambda \in A$ e dado $\xi > \lambda > 0$, λ é tal que: $(A_\lambda + B_\lambda)\phi = \lambda \phi$, mais a definição de d acima descrita, demonstra que $|\langle \phi, \psi \rangle| \leq \sigma^d, \psi \in M_\xi$

A demonstração reside basicamente no uso da desigualdade de Schwarz sucessivas vezes e nas propriedades dos operadores A_λ e B_λ

APÊNDICE E:- ESTIMATIVA DE d_1 e d_2

Usando o Teorema da Localização Exponencial d_1 e d_2 , podem ser obtidos. Consideraremos a dimensão $V=3$, e seguiremos na medida do possível a mesma notação que Fröhlich e Lieb (1978). Seja P_λ o operador projeção sobre os auto-vetores ψ de A_λ , com autovalores maior que $\xi = n\Delta|\lambda|$, para algum $\Delta > 0$ e $n > 1$. Seja P_ξ o projetor sobre os auto-estados de A_λ com auto-valores no intervalo $[\xi, \infty)$. O expoente d é definido pela condição:

$$\begin{aligned} (1 - P_\xi) \cdot (B_\lambda \cdot (A_\lambda - \lambda)^{-1})^d \psi &\neq 0 \\ (1 - P_\xi) \cdot (B_\lambda \cdot (A_\lambda - \lambda)^{-1})^j \psi &= 0 \end{aligned} \quad (E.1)$$

$j=0,1,\dots,d-1$, onde ψ é um vetor arbitrário normalizado, auto-vetor de P_λ , com $P_\lambda \psi = \psi$ e $\xi - \lambda > 0$. Denotaremos por E_{gap} a diferença entre a energia mínima de A em qualquer estado em $P_\lambda \mathcal{H}$ e

$$E_{\text{gap}} = \inf \text{spec.} ((P_\lambda A_\lambda P_\lambda) - \xi) > 0 \quad (E.2)$$

Então d é o número de vezes que B pode ser aplicado a sem abaixar a energia A_λ mais do que E_{gap} . Em modelos onde o estado fundamental é conhecido, como no caso ferromagnético, uma estimativa para d pode ser a seguinte:

Os auto-valores de A_λ em $(1 - P_\xi) \mathcal{H}$ são 'próximos' do estado fundamental. Seja $L \geq 2$, um inteiro tal que $|\lambda|^{1/3} / L$ é também um inteiro., e decomponha-se $|\lambda| / L^3$ em cubos disjuntos e congruentes c , cujas arestas medem L . Seja Φ um auto-vetor de $\{S_i^z, i \in \Lambda\}$. Para Φ , um cubo perfeito é definido como um cubo tal que:

perfeito: $\{c = c_\Phi \text{ se } S_i^z \Phi = -S_i^z \Phi \text{ para todo } i \in c_\Phi$
 imperfeito: $\{c = \bar{c}_\Phi \text{ de outro modo.}$

Supondo que a A_λ -energia de Φ é menor que ξ . O índice d é obtido a partir da resposta a duas questões:

(i) Qual é o número mínimo N de cubos perfeitos necessário para obter um estado com A_λ -energia inferior a $\xi = n\Delta|\lambda|$?

(ii) Quantas (k) vezes B_λ deve ser aplicado de modo a converter um cubo imperfeito em um cubo perfeito?

Nosso objetivo é buscar estas respostas para o modelo em consideração. Seja:

$$\bar{\Psi} \equiv (B_{\lambda} (A_{\lambda} - \lambda)^{-1}) d \Psi$$

A energia ($\bar{e}$) associada a $A\bar{\Psi}$, é $\bar{e} > e$.

Os auto-vetores de A_{λ} formam uma base $\{\bar{\Phi}_i^z\}$ e:

$\bar{\Psi} = \sum_j (\bar{\Psi}, \bar{\Phi}_j^z) \bar{\Phi}_j^z$. Seja $\bar{\Phi} = \bar{\Phi}_{j_0}$, um auto-vetor de A com energia associada e_0 , e devido a definição de d em (E.1), tal $\bar{\Phi}$ existe. Este auto-estado deve conter um número mínimo de quadrados perfeitos, N . Deste modo caso acrescentarmos o número de vezes (k) em que $B(A - \lambda)^{-1}$ pode ser aplicado a $\bar{\Psi}$, para reverter um cubo imperfeito em um cubo perfeito teremos o menor número d que $B(A - \lambda)^{-1}$ pode ser aplicado a $\bar{\Psi}$ satisfazendo (E.1), com isto respondemos as duas questões e

$$d \geq m.k.$$

Consideremos a A_{λ} -energia de um cubo perfeito como sendo zero. Então a A_{λ} -energia de um cubo imperfeito é positiva.

Para responder (i), é mais simples inverter a questão Qual é o número máximo (I) de cubos imperfeitos $\bar{c}_0$ que podem ser construídos cuja energia total é inferior a e :

$$I. \min \bar{c}_0 \leq n \Delta |\lambda| \quad (E.3)$$

I : número de cubos imperfeitos.

$\min \bar{c}_0$ energia mínima de um cubo imperfeito.

ora,

$$I = |\lambda| l^3 - N$$

N : número de cubos perfeitos.

A_{λ} energia mínima de A_{λ} em um cubo imperfeito, com a definição $S_i^z \bar{\Phi} = \lambda_i \bar{\Phi}$, é quando um único spin, em um sítio qual quer i_0 , é maior que $-S$, ou $\lambda_{i_0} > -S$ e todos os sítios restantes

$\lambda_i = -S$, $i \neq i_0$. A figura E.1 representa uma configuração para o caso particular $l=3$, e um corte transversal no plano XY.

Figura E.1

$\ell=3$

-s	-s	-s
-s	-s	-s
-s	-s	-s

cubo perfeito c_θ

A-energia ≈ 0

$\ell=3$

-s	-s	-s
-s	λ	-s
-s	-s	-s

cubo imperfeito $\bar{c}_\theta$

i_0 com a menor

A-energia.

$$\min_{\lambda_i > -s} \bar{c}_\theta = \min \left\{ Jz/2s \left[(s(s+1) - \lambda_i \cdot (\lambda_i - 1)) \right] \right\} = Jz. \quad (E.4)$$

A função $A(x)$, $-s \leq x \leq s$, esta representada na figura E.2. É evidente que a condição (E.4) é obtida tendo em vista que no mínimo $\lambda_i \geq -s + 1$.

Figura E.2: O mínimo de $A(x)$ com $(-s + 1) \leq x \leq s$, ocorre em $x=s$ e disto segue (E.4).

$$x = -s + 1$$

Substituindo 1 e (E.4) em (E.3), tem-se

$$(|\lambda| \cdot \ell^{-3} - N) \cdot Jz \leq n\Delta \cdot |\lambda| \quad (\text{E.5})$$

ou

$$N \geq (\ell^{-3} - n\Delta / (Jz)) |\lambda| > 0. \quad (\text{E.6})$$

Deve-se escolher $n\Delta$ de modo a fornecer $N > 0$, como $\ell \geq 2$ uma escolha possível será:

$$n\Delta < Jz/16 \quad (\text{E.7})$$

Por definição de (6.53),

$$B_\lambda = -J\alpha / (2S) \cdot 1/2 \cdot \sum_{ij} (S_i^+ \cdot S_j^- + S_i^- \cdot S_j^+) \quad (\text{E.8})$$

Através de (E.8), vemos que a aplicação de B faz com que a componente z em um sítio é diminuída enquanto a componente z em outro sítio é aumentada. Portanto para rebaixar a componente z de um spin em um certo sítio i $\bar{c}_i$ de $S_i^z \geq 0$, para $-S$, sem contudo aumentar a componente z de outros spins em $\bar{c}_j$, B tem que ser aplicado no mínimo

$$p \geq S \cdot \bar{D} \quad (\text{E.5})$$

$\bar{D}$: distância média de um sítio $\bar{a}$ face do cubo. Por exemplo, para l par:

$$\bar{D} = \frac{\sum_{t=0}^{(\ell-2)/2} (6 \cdot (\ell-2t)^2 + 12(\ell-2t-2) - 16) \cdot t}{\sum_{t=0}^{(\ell-2)/2} (6 \cdot (\ell-2t)^2 + 12(\ell-2t-2) - 16)} \quad (\text{E.6})$$

para $\ell \gg 1$, a distância média é aproximadamente idêntica tanto para ℓ par como para ℓ ímpar, e vale

$$\bar{D} \approx 7/8 \cdot \ell \quad \text{ou} \quad \bar{D} > \ell/2 \quad (\text{E.7})$$

Da definição de P_λ (6.47), como $P_\lambda \Psi = \Psi$, em um cubo $\bar{c}_i$ existem $\ell^3/2$ sítios cuja componente de spin associada deve ser baixada de $S^z \geq 0$, (como pode ser verificado através da Figura 6.1) para $S^z = -S$, de modo a torná-lo um cubo perfeito. Para obter um cubo perfeito por aplicação repetida de $B_\lambda \cdot (A - \lambda)^{-1}$ à Ψ , o operador B deve ser aplicado no mínimo m vezes, onde:

$$m \geq S \cdot \frac{\ell^3}{2} \cdot \frac{1}{2} \quad (\text{E.8})$$

Considerando (E.6) e (E.8), pode-se estimar d , através da definição (E.1), pois:

$$d \geq mk \geq \frac{sl^4}{4} |\lambda| [l^{-3} - n\Delta (Jz)^{-1}] \quad (E.9)$$

seja :

$\Delta = [(2.n\Delta/(Jz))^{-1/3}]_+$ onde $[x]_+$ significa o maior inteiro menor e igual a x , e:

$$d_1 \geq \frac{sl^4}{4} \cdot |\lambda| \cdot \frac{l^{-3}}{2} \text{ ou}$$

$$d_1 \geq \frac{s}{4} \cdot (2n\Delta/(Jz))^{-1/3} = \frac{s}{8} \cdot |\lambda| \cdot (Jz/2n)^{1/3} \Delta^{-1/3}$$

escolhendo $n = (1 + \alpha)/(1 - \alpha)$, e $\Delta = \beta^{-3/4}$,

$$d_1 \geq \left[\frac{s}{8} \cdot |\lambda| \cdot \left\{ \frac{Jz(1 - \alpha)}{(1 + \alpha)} \right\}^{1/3} \cdot \beta^{1/4} \right]_+ \quad (E.10)$$

que é o resultado de (6.58). §

Estimativa de d_2 :-

Para estimar d_2 , considere $c_\emptyset$ um cubo perfeito para um auto-estado de $(S_i^z, i \in \Lambda)$, com $S_i^z \Phi = t_i \Phi$, desde que $t_i < -\lambda s$, $\lambda = 1 - 1/2s$, ou:

cubo perfeito : $c = c_\emptyset$ se $S_i^z \Phi = t_i \Phi$, $t_i < -\lambda s$, para todo i em $c_\emptyset$.

cubo imperfeito : $\bar{c} = \bar{c}_\emptyset$ de outro modo.

Por exemplo a Figura 6.3 representa um cubo perfeito para $l=3$ e outro imperfeito, secçãoado ortogonalmente ao eixo z .

$l=3$

-s	-s	-s
-s	-s	-s
-s	-s	-s

$l=3$

-s	-s	-s
-s	s	-s
-s	-s	-s

$\sigma > -\lambda s$.

Figura 6.3 a.: -Cubo perfeito

Figura 6.3b: Cubo imperfeito de energia mais baixa.

A mínima A_x -energia de um cubo imperfeito é dado por:

$$\min_{t_i > -\lambda S} \left\{ Jz/(2S) [S(S+1) - t_i(t_i - 1)] \right\} =$$

$$= \frac{Jz}{2} \cdot (1 - \lambda) (S(1 + \lambda) + 1) \equiv M$$

$$M = \frac{Jz}{2} \cdot (1 + 1/(4S))$$

(E.11)

A figura 6.4, representa a função $A(x)$

Figura 6.4 :- O mínimo de $A(x)$ sob a condição (E.11) encontra-se no ponto $\bar{x} = -\lambda S$, com $\lambda = 1 - 1/2S$.

Para obter a estimativa d_2 são feitos os mesmos passos anteriores da estimativa de d_1 . Da definição de $P_\lambda^{<\delta}$ (6.49) e (6.24), $P_\lambda^{<\delta} \Psi = \Psi$, restringe-se a auto-vetores Ψ "longe" do estado fundamental, isto é com energia- A_λ associada maior que a energia- A_λ do estado fundamental, de modo a constituir uma lacuna no espectro de A_λ , e $E_{\text{gap}} > 0$ pois $(P_\lambda^{<\delta} A_\lambda P_\lambda^{<\delta}) - \langle \Psi \rangle > 0$ e como em (E.2), resta responder as questões (i) e (ii).

O menor número de cubos perfeitos para um estado de energia- A_λ associada $\langle \Psi \rangle$, satisfaz a desigualdade:

$$(|\lambda| \cdot \ell^{-3} - N) \cdot M \leq n \Delta |\lambda|$$

portanto:

$$N \geq |\lambda| (\ell^{-3} - n \Delta / M) \quad (\text{E.12})$$

Para tornar um cubo imperfeito em perfeito, B_λ deve ser aplicado ao vetor Ψ na imagem de $P_\lambda^{<\delta}$, no mínimo m vezes,

$$m \geq \frac{\ell^4}{2} \cdot 1 \quad (\text{E.13})$$

pois ℓ^3 spins do cubo devem ser rebaixados na componente z de:

$$t_i = -\delta \quad \text{para } t_i = -\lambda S$$

ou seja, em cada sítio i , t_i deve ser alterado de no mínimo 1 unidade. Pelo mesmo argumento de (E.8), segue (E.13).

Escolhendo n e Δ como anteriormente,

$$d_2^1 \geq N \cdot m \geq |\lambda| (\ell^{-3} - n \Delta / M) \ell^4 / 2 \quad (\text{E.14})$$

seja $\ell = [(2n\Delta / M)^{1/3}]$, e:

$$\begin{aligned} d_2 &\geq |\lambda| \frac{\ell^4}{2} \cdot \frac{\ell^{-3}}{2} = \\ &= \left[\frac{|\lambda|}{4} \left\{ \frac{M \cdot (1-\alpha)}{2 \cdot (1+\alpha)} \right\}^{1/3} \cdot \beta^{1/4} \right] + \end{aligned} \quad (\text{E.15})$$

com $M = \frac{Jz}{2} \cdot (1 + 1/4S)$, que é o resultado utilizado em (6.67)

§§

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Akhiezer, A.I.; Bar'yakhtar, V.B. e Peletminskii, S.V. (1968)
" Spin Waves" - North Holland, Amsterdam.
- Balakrishnan, R. (1980):- Physical Review B, 21, 2844.
- Bellman, R. (1960):- "Introduction to Matrix Analysis" Mc Graw Hill, New York.
- Bethe, H.A. (1931) :- Z.Physik 71, 205.
- Bloch, F. (1930) :- Z.Physik 61, 206.
- Bogoliubov, N.N. (1970):- "Lectures on Quantum Statistics" vol.2, Gordon & Breach.
- Bonato, C.A. (1983):- Tese de doutorado, Instituto de Física da Universidade de São Paulo.
- Brito, A.A.S. (1982):- Physica Status Solidi b, 113, K35.
- Brito, A.A.S. e Wreszinski, W.F. (1984):- Preprint-IFUSP, a ser publicado em Physical Review B.
- Dembinski, S.T. (1964):- Physica 30, 1217.
- Dembinski, S.T. (1967):- Physica 35, 119.
- Dwight, H.B. (1961):- " Tables of Integrals and Other Mathematical Data" The Macmillan Co., New York.
- Dyson I, F.J. (1956a):- Physical Review 102, 1217.
- Dyson II, F.J. (1956b):- Physical Review 102, 1230.
- Dyson, F.F., Lieb, E.H. e Simon, B.:- Journal of Statistical Physics, 18, 335.

- Dyson, F.J. (1979) :- "Pertubando o Universo" UnB Editora, Brasília.
- Fallot, M. (1936) :- Annals of Physics 6 , 305.
- Fernando Perez, J. (1973) :- Tese de Doutorado, E.T.H. Zurich.
- Fröhlich, J. e Lieb, H.E. (1978) :- Communications of Mathematical Physics, 60, 233.
- Fröhlich, J.; Israel, R. e Lieb, E.H. (1978) :- Communications of Mathematical Physics, 62, 1.
- Greenberg, N.I. (1963) :- Journal of Mathematical Physics, 4 , (1963).
- Herbert, D.C. (1979) :- Journal of Mathematical Physics, 10, 2255
- Hepp, K. (1972) :- Physical Review B 5 , 95.
- Holstein, T. e Primakoff, H. (1940) :- Physical Review 58, 1098.
- Huang, K. (1968) :- " Statistical Mechanics " -North Holland, Amsterdam.
- Kahn, B. e Uhlenbeck, G.E. (1938) :- Physica 5 , 399.
- Keffer, F. (1966) :- " Handbuch der Physik", Band XVIII/ 2, editado por W.J.Wijn - Springer Verlag, Berlin.
- Kenan, R.P. (1967) :- Physical Review 159 , 430.
- Kramers, H.A. (1936) :- Comm. Kamerling Onnes Lab. Univ. Leiden 22, Suppl. 83.
- Landau, L.; Fernando Perez, J. e Wreszinski, W.F. (1981) :- Journal of Statistical Physics 26, 755.

- Lee, T.D. e Yang, C.N. (1959) :- Physical Review 113, 1165.
- Lieb, E.H. (1973) :- Communications of Mathematical Physics, 31
327.
- Loly, P. (1970) :- Annals of Physics 56, 40.
- Malléev, S. (1957) :- JETP 33, 1010.
- Mattis, D.C. (1965) :- "The Theory of Magnetism". New York ,
Harper & Row.
- Mattis, D.C. (1981) :- "The Theory of Magnetism". New York ,
Springer.
- Messiah, A. (1960) :- "Mecanique Quantique", Dunod, Paris.
- Møller, C. (1933) :- Z. Physik 82, 559.
- Miedema, A.R. ; Wieling, R.F. e Hiskamp, W.J. (1965) :- Physica
31, 1585.
- Mori, H. e Kawasaki, K. (1962) :- Progress of Theoretical Physics,
27, 529.
- Mostow, G.D. e Sampson, J.H. (1972) :- "Algebra Linear" Mc Graw-
Hill, New York.
- Oguchi, T. (1960) :- Physical Review 117, 117.
- Oguchi, T. (1961) :- Progress of Theoretical Physics, 25, 721.
- Opechowski, M.R. (1937) :- Physica 4, 715.
- Pathria, R.K. e Kawatra, M.P. (1962) :- Progress of Theoretical
Physics, 27, 638.
- Pathria, R.K. (1972) :- "Statistical Mechanics" Oxford, Perga-
mon Press.

- Rastelli, E. e Lindgard, P.A. (1979) :- Journal of Physics C 12 1899.
- Reed, M. e Simon, B. (1980) :- "Methods of Modern Mathematical Physics" vol. I , London, Academic Press.
- Ruelle, D. (1969) :- "Statistical Mechanics - Rigorous Results" Reading , Benjamin, New York.
- Rui-bao, T. e Cho, P.F. (1981) :- Chinese Physics, 1 , 557.
- Schafroth, M.R. (1954) :- Proceedings Physical Society (London) A 67, 33.
- Škrinjar, M.J. ; Kapor, D.V. e Šetrajčič, J.P. (1981) :- Physica Status Solidi b , 103, 559.
- Simon, B. (1978):- Annals Israel Physics Society 2, 287.
- Stanley, E. (1974) :- "Phase Transition and Critical Phenomena" vol.3, editado por Domb, C. e Green, M.S., Academic Press, London.
- Streater, R.F. (1967) :- Communications of Mathematical Physics, 6 , 233.
- Szanieck, J. (1962a) :- Physica Status Solidi, 2 , 1354.
- Szanieck, J. (1962b) :- Acta Physica Polonica, 21, 219.
- Szanieck, J. (1963) :- Acta Physica Polonica, 22, 379.
- Szanieck, J. (1967) :- Acta Physica Polonica, 32, 271.
- Szczeniowski, S. ; Morkowski, J. e Szanieck, J. (1963) :- Physica Status Solidi 3 , 537.

- Tyablicov, S. (1967) :- " Methods in Quantum Theory of Magnetism"
Plenum Press, New York.
- Van Hemmen, L ; Brito, A.A.S. e Wreszinski, W.F. (1983) :- Pre-
print, IFUSP, a ser publicado em J.Statistical Physics (1984).
- Van Kranendonk (1955) :- Physica, 21, 749.
- Van Kranendonk, J. e Van Vleck, J.H.(1958) :- Reviews of Modern
Physics, 30, 1.
- Walker, L.R. (1963) :- in " Magnetism I ", editado por Rado, G.T.
& Suhl, H. , Academic Press, New York.
- Wenzel, G. e Wagner, M. (1978) :- Journal of Physics C ,11, 137.
- Wortis, M. (1963) :- Physical Review, 132, 85.
- Wortis, M. (1965) :- Physical Review, 138, A 1126.