

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

**Modelo de Heisenberg Antiferromagnético de spin-1/2
na Rede Triangular com Interações Competitivas**

Dairon A. Jiménez Lozano

Orientador: Prof. Dr. Mário José de Oliveira

Dissertação de mestrado
apresentada ao Instituto de Física
para a obtenção do título de
Mestre em Ciências

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Mário José de Oliveira - USP

Prof. Dr. Masayuki Oka Hase - USP

Prof. Dr. Eduardo Miranda - UNICAMP

São Paulo

2016

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Jiménez Lozano, Dairon Andrés

Modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin $\frac{1}{2}$ na rede triangular com interações competitivas. - São Paulo, 2016.

Dissertação (Mestrado) – Universidade de São Paulo. Instituto de Física – Depto. de Física Geral.

Orientador: Prof. Dr. Mário José de Oliveira

Área de Concentração: Materiais Magnéticos e Propriedades Magnéticas.

Unitermos: 1. Física; 2. Física da matéria condensada; 3. Mudança de fase.

USP/IF/SBI-070/2016

UNIVERSITY OF SÃO PAULO
INSTITUTE OF PHYSICS

**Spin-1/2 Antiferromagnetic Heisenberg Model in the
Triangular Lattice with Competitive Interactions**

Dairon A. Jiménez Lozano

Advisor: Prof. Dr. Mário José de Oliveira

Dissertation submitted to the
Physics' Institute of the University
of São Paulo in fulfillment of the
requirement for the degree of
Master of Science

Examination Board:

Prof. Dr. Mário José de Oliveira - USP

Prof. Dr. Masayuki Oka Hase - USP

Prof. Dr. Eduardo Miranda - UNICAMP

São Paulo

2016

Agradecimentos

Agradeço ao professor Mário José de Oliveira pela sua orientação
e ao CNPq pelo suporte financeiro.

Nesta dissertação estudamos sistemas de spins em redes de baixa dimensionalidade e em temperatura nula, analisando suas transições de fases quânticas. Mais precisamente, estudamos as propriedades do estado fundamental e as possíveis transições de fase do modelo de Heisenberg quântico antiferromagnético de spin-1/2, com interações entre os primeiros e segundos vizinhos, em diversas redes, e em particular na rede triangular, que é o foco de nosso estudo. Para a obtenção do estado fundamental aproximado, usamos um método variacional em que a rede é particionada num conjunto de plaquetas de sítios. O estado fundamental é escrito como um produto tensorial dos estados das plaquetas. Para a rede triangular, escolhemos um triângulo como uma plaqueta. Quatro fases foram encontradas: a fase antiferromagnética de Néel, a colinear, a fase de Néel modificada e aquela que denominamos de ligação covalente ressonante. Obtivemos as energias e as magnetizações de subrede em função da razão entre as interações de primeiros e segundos vizinhos. Entre as fases de Néel e a colinear, podemos observar a fase de ligação covalente ressonante caracterizada como um singleto quanto ao spin de cada plaqueta.

Palavas-chave: modelo de Heisenberg; modelos antiferromagnéticos; ligação covalente ressonante.

Abstract

In this thesis we study spin systems in low-dimensional lattices at zero temperature, analyzing their quantum phase transitions. More precisely, we study the properties of the ground state and the possible phase transitions in the antiferromagnetic spin-1/2 quantum Heisenberg model with interaction between the first and second neighbors, in several lattices, and in particular in the triangular lattice, which is the focus of our study. To obtain the approximate ground state, we use a variational method in which the lattice is partitioned into a set of plates of sites. The ground state is written as a tensor product of the states of plates. For the triangular lattice, we choose a triangle as a plate. Four phases were found: the antiferromagnetic Néel phase, the collinear, the modified Néel phase and that we call resonating valence bond. We obtained the energy and the magnetization as a function of the ratio of the interactions between the first and second neighbor sites. Between the Néel and collinear phases, we can observe the spin resonating valence bond phase, characterized as a singlet with respect to the spin of each plate.

Keywords: Heisenber model; antiferromagnetic models; resonating valence bond.

1	Introdução	5
1.1	Momento magnético	6
1.2	Matrizes de Pauli	7
1.3	Modelo de Heisenberg	9
1.4	Rede triangular e estados magnéticos	11
1.5	Interações competitivas e frustração	13
2	Aproximação ao problema e explicação do método	16
2.1	O método usado	16
2.2	Exemplos de aplicação do método	17
3	Rede Triangular	24
3.1	Tratamento Clássico do Problema	25
3.2	Tratamento Quântico do Problema	30
	Conclusões e Perspectivas	43
	Referências Bibliográficas	45

CAPÍTULO 1

Introdução

Os sistemas magnéticos que são objeto de nosso estudo fazem parte da classe de materiais magnéticos [1, 2, 3] que possuem dipolos magnéticos microscópicos mesmo na ausência de campo magnético externo. A altas temperaturas, essa classe de materiais se encontra no estado paramagnético, caracterizado pela ausência de magnetização. A baixas temperaturas, eles podem exibir diversos tipos de ordenamento magnético entre os quais encontram-se o ferromagnético, o antiferromagnético, o ferrimagnético e outros ordenamentos mais complexos [1]. Tais sistemas magnéticos são descritos por diversos modelos, destacando-se o modelo de Ising e o modelo de Heisenberg. Esse último descreve sistemas magnéticos com simetria esférica e é o objeto de nosso estudo.

Embora sejam comuns as transições de fase induzidas pela variação da temperatura, é possível também a ocorrência de transições de fase a temperatura zero. Esse é o caso das transições de fase denominadas transições de fase quânticas [4], as quais são induzidas por um parâmetro ou conjunto de parâmetros. Em nosso estudo esse papel é desempenhado pelo parâmetro de competição entre as interações a segundos e primeiros vizinhos. As diversas fases a temperatura zero são aquelas correspondentes ao estado fundamental do sistema quântico em estudo. Aqui analisamos as transições em sistemas quânticos descritos pelo modelo de Heisenberg. Mais especificamente, nosso objetivo é a determinação do estado fundamental da hamiltoniana quântica de Heisenberg definida na rede triangular com interações antiferromagnéticas entre primeiros e segundos vizinhos. O estudo do estado fundamental do modelo de Heisenberg na rede triangular com interação competitivas tem sido realizado por vários autores [5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13].

Com a finalidade de obter o estado fundamental, utilizamos o método variacional desenvolvido por Oliveira [14]. O método foi utilizado para obtenção do diagrama de fase do modelo de Heisenberg na rede quadrada com interações entre primeiros e segundos vizinhos [14, 15]. Esse método consiste na partição da rede em plaquetas e na construção de um estado que é um produto tensorial dos possíveis estados das plaquetas. Esse método foi utilizado na rede quadrada e três estados foram encontrados: o antiferromagnético de Néel, o estado colinear e o estado que denominamos de ligação covalente ressonante. Na rede triangular, também encontramos esses três estados. Entretanto, a transição entre o estado de Néel e o estado de ligação covalente ressonante revelou-se ser descontínua em oposição ao caso da rede quadrada em que essa transição é contínua [14]. Além disso, encontramos um quarto estado que denominamos de Néel modificada.

1.1 Momento magnético

Os sistemas magnéticos que são objeto de nosso estudo entendem-se como um sólido cristalino composto por átomos ou íons que possuem momento de dipolo magnético, mesmo na ausência de campo magnético externo. Quando não há interação entre os dipolos magnéticos, eles constituem os sistemas paramagnéticos ideais. Nesses casos, o momento de dipolo magnético é aquele de um átomo livre, e possui duas causas [16]: o momento angular intrínseco, ou spin, dos elétrons e o momento angular orbital dos mesmos. Denotando por \vec{J} o momento angular total, então o momento magnético $\vec{\mu}$ de um átomo é dado por [17]

$$\vec{\mu} = -\frac{g\mu_B}{\hbar}\vec{J} \quad (1.1)$$

onde \hbar é a constante reduzida de Planck, μ_B é o magneton de Bohr, e g é o fator giro-magnético. Quando o átomo magnético está sujeito a um campo magnético \vec{B} , os níveis de energia são dados por $E = -\mu B$, ou

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad (1.2)$$

onde $\mu = mg\mu_B$ e m toma os valores $j, (j-1), (j-2), \dots, -(j-2), -(j-1), -j$. Tendo em vista a estreita relação entre momento magnético e momento angular, resumimos a seguir a teoria do momento angular em mecânica quântica [18]. Um conjunto de três operadores J^x, J^y, J^z os quais satisfazem as relações de comutação

$$\begin{aligned} [J^x, J^y] &= i\hbar J^z \\ [J^y, J^z] &= i\hbar J^x \\ [J^z, J^x] &= i\hbar J^y \end{aligned} \quad (1.3)$$

são chamados de componentes cartesianas do momento angular \vec{J} . Os colchetes significam o comutador definido por $[A, B] = AB - BA$. O quadrado, $J^2 = \vec{J} \cdot \vec{J}$, do operador momento angular é dado por

$$J^2 = (J^x)^2 + (J^y)^2 + (J^z)^2 \quad (1.4)$$

Utilizando (1.3) concluímos que

$$[J^2, J^x] = [J^2, J^y] = [J^2, J^z] = 0 \quad (1.5)$$

que pode ser escrito na forma $[J^2, \vec{J}] = 0$. Resaltamos duas propriedades importantes do momento angular: 1) os autovalores de J^2 são $j(j+1)\hbar^2$ onde j pode ser um inteiro ou um semi-inteiro, e 2) os autovalores de J^z são $m\hbar$ onde m toma os valores

$$j, (j-1), (j-2), \dots, -(j-2), -(j-1), -j \quad (1.6)$$

O número j é chamado de momento angular total do sistema, e o número m que é chamado de componente z do momentum angular total; dado j , m pode tomar só os valores (1.6). Os autovalores de J^2 e J^z são $j(j+1)\hbar$ e $m\hbar$ respetivamente.

Estamos interessados em trabalhar com o caso em que $j = 1/2$ que corresponde ao caso de um único elétron na ausência de momento angular, ou, em breve, caso de spin-1/2.

1.2 Matrizes de Pauli

a. Base do espaço \mathbb{C}^2 e matrizes de Pauli

O estado quântico intrínseco de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ pode ser descrito mediante um vetor do espaço de Hilbert \mathbb{C}^2 , a base canônica do qual é representada pelos kets $|+\rangle$ e $|-\rangle$ definidos como

$$|+\rangle := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

os quais são os autovetores do operador de spin no eixo de quantização que escolhemos como o eixo z . Qualquer vetor $|\psi\rangle$ do espaço se pode escrever como a seguinte combinação linear dos vetores (1.7):

$$|\psi\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle \quad (1.8)$$

onde os coeficientes a e b são números complexos.

Agora apresentamos as matrizes de Pauli σ^x , σ^y e σ^z que são proporcionais às componentes cartesianas dos operadores de momento angular, que junto com a matriz identidade

constituem uma base para o espaço vetorial dos operadores lineares que atuam sobre o espaço de Hilbert \mathbb{C}^2 . Suas representações na base canônica (1.7) são

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

As Matrizes de Pauli são hermitianas e atuam da seguinte maneira sobre os elementos da base (1.7).

$$\begin{aligned} \sigma^x|+\rangle &= |-\rangle, & \sigma^y|+\rangle &= i|-\rangle, & \sigma^z|+\rangle &= |+\rangle \\ \sigma^x|-\rangle &= |+\rangle, & \sigma^y|-\rangle &= -i|+\rangle, & \sigma^z|-\rangle &= -|-\rangle \end{aligned} \quad (1.10)$$

b. Espaço de Hilbert de mais de uma partícula, produto tensorial de finitos espaços

Seja $\{|\gamma\rangle\}$ a base canônica (1.7) onde γ representa os símbolos $+$ e $-$. Suponhamos que temos duas partículas de spin- $\frac{1}{2}$ cada uma possuindo seu próprio espaço de Hilbert \mathbb{C}^2 , cujas bases são respetivamente $\{|\gamma_1\rangle\}$ e $\{|\gamma_2\rangle\}$. O espaço \mathcal{H} associado às duas partículas é o produto tensorial dos espaços associados a cada partícula

$$\mathcal{H} = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \quad (1.11)$$

O espaço \mathcal{H} é de dimensão 4 complexa, sendo sua base dada por todos os possíveis produtos da base (1.7) com ela mesmo:

$$\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\} \quad (1.12)$$

Indutivamente se pode definir o espaço de Hilber para um conjunto finito de partículas de spin- $\frac{1}{2}$:

$$\bigotimes_{i=1}^n \mathbb{C}^2 = \mathbb{C}^{2n} \quad (1.13)$$

A base canônica deste novo espaço vetorial é o conjunto de todos os possíveis produtos de n -tuplas da base (1.7) com ela mesmo n vezes, resultando em

$$\{|+++ \dots +\rangle, |+++ \dots -\rangle, \dots, |-- \dots -\rangle\} \quad (1.14)$$

Daremos especial atenção ao produto tensorial dos espaços de três partículas de spin- $\frac{1}{2}$, pois os resultados desta dissertação fazem referência à rede triangular.

Nesse caso o espaço é $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ e a base é:

$$\{|+++ \rangle, |++-\rangle, |+-+\rangle, |+--\rangle, |-++\rangle, |-+-\rangle, |--+\rangle, |---\rangle\} \quad (1.15)$$

Como antes sabemos que qualquer ket do espaço se pode escrever como uma combinação linear dos vetores da base (1.15).

Os operadores de spin que atuam neste espaço são produtos tensoriais dos operadores atuando no espaço de cada partícula. Suponhamos que há três operadores A , B e C atuando nos espaços da primeira, segunda e terceira partícula respetivamente. O produto tensorial deles $A \otimes B \otimes C$ atua num vetor da base (1.15) assim:

$$A \otimes B \otimes C |\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3\rangle = A |\gamma_1\rangle \otimes B |\gamma_2\rangle \otimes C |\gamma_3\rangle \quad (1.16)$$

onde γ_j toma os valores $+$ ou $-$.

Por último definimos o operador momento angular de spin \vec{S} , representado por matrizes S^x , S^y e S^z relacionadas com as matrizes de Pauli (1.9) da seguinte maneira:

$$S^x = \frac{\hbar}{2}\sigma^x, \quad S^y = \frac{\hbar}{2}\sigma^y, \quad S^z = \frac{\hbar}{2}\sigma^z \quad (1.17)$$

1.3 Modelo de Heisenberg

Interação entre dipolos magnéticos e Interação de troca direta

Suponhamos por simplicidade que temos dois elétrons indistinguíveis nas posições \vec{r}_1 e \vec{r}_2 , e consideremos que a função de onda espacial total normalizada é o produto dos estados de um elétron $\psi_a(r_1)$ e $\psi_b(r_2)$, o módulo ao quadrado da função de onda deve ser invariante com respeito à troca de ambos os elétrons. O princípio de exclusão de Pauli implica que a função de onda deve ser antissimétrica [2, 19]. Então se χ é a parte do spin da função de onda normalizada do sistema dos dois elétrons, temos duas possibilidades: a parte espacial da função de onda simétrica e a parte de spin antissimétrica ou a parte espacial da função de onda antissimétrica e a parte de spin simétrica. A primeira opção corresponde ao estado singleto com $S_{total} = 0$, a segunda opção corresponde ao estado tripleto com $S_{total} = 1$. Aqui colocamos $\hbar = 1$. As funções de onda totais para cada opção são :

$$\begin{aligned} \psi_S &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) + \psi_a(r_2)\psi_b(r_1)) \cdot \chi_S \\ \psi_T &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) - \psi_a(r_2)\psi_b(r_1)) \cdot \chi_T \end{aligned} \quad (1.18)$$

onde os subíndices S e T significam simétrico e antissimétrico e representam os estados singleto e tripleto, respectivamente.

As energias desses estados são:

$$\begin{aligned} E_S &= \int \psi_S^* \mathcal{H} \psi_S dV_1 dV_2 \\ E_T &= \int \psi_T^* \mathcal{H} \psi_T dV_1 dV_2 \end{aligned} \quad (1.19)$$

onde \mathcal{H} é o hamiltoniano do sistema. Agora

$$\vec{S}^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (1.20)$$

Tendo em conta que $S_1 = S_2 = \frac{1}{2}$ resulta então

$$\begin{aligned} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 &= \frac{1}{2}S_{\text{total}}(S_{\text{total}} + 1) - \frac{1}{2}S_1(S_1 + 1) - \frac{1}{2}S_2(S_2 + 1) \\ &= \frac{1}{2}S_{\text{total}}(S_{\text{total}} + 1) - \frac{3}{4} \end{aligned} \quad (1.21)$$

O Hamiltoniano efetivo pode-se expressar como

$$\mathcal{H} = \frac{1}{4}(E_S + 3E_T) + \mathcal{H}_{\text{spin}} \quad (1.22)$$

onde fizemos a seguinte definição

$$\mathcal{H}_{\text{spin}} = (E_T - E_S)\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (1.23)$$

O primeiro termo é constante e pode ser absorvido em uma redefinição do zero de energia. O segundo termo é dependente do spin e é o termo relevante nesta aproximação para dar conta das propriedades magnéticas. Vamos definir agora a constante de troca por:

$$J = \frac{E_S - E_T}{2} = \int \psi_a^*(\vec{r}_1)\psi_b^*(\vec{r}_2)\mathcal{H}\psi_a(\vec{r}_2)\psi_b(\vec{r}_1)dV_1dV_2 \quad (1.24)$$

Com isso o termo dependente do spin do Hamiltoniano efetivo (1.24) se pode escrever:

$$\mathcal{H}_{\text{spin}} = 2J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (1.25)$$

Para um conjunto de átomos, generalizamos a equação (1.25) e escrevemos

$$\mathcal{H} = \sum_{i < j} J_{ij}\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.26)$$

que é a Hamiltoniana de Heisenberg, com J_{ij} sendo a constante de troca entre o spin i e o spin j , o fator 2 se incluiu na contagem dupla da soma. Além disso, admitimos que J_{ij} tenha o mesmo valor para todos os pares de sítios i, j que possuam a mesma distância $|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ entre os sítios do par. Nesta dissertação usaremos a seguinte escolha [20]:

$$\begin{cases} J_1, & \text{para primeiros vizinhos} \\ J_2, & \text{para segundos vizinhos} \\ 0, & \text{em outros casos} \end{cases} \quad (1.27)$$

Podemos observar que se J_{ij} é negativo, então o alinhamento ferromagnético é favorecido, mas se J_{ij} for positivo será favorecido o alinhamento antiferromagnético para o par i, j de spins.

Estaremos estudando o modelo de Heisenberg antiferromagnético com interações até segundos vizinhos (chamado de modelo $J_1 - J_2$), numa cadeia de spins unidimensional e em duas dimensões nas redes quadrada e triangular. O operador Hamiltoniano do sistema se pode escrever como:

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,k \rangle\rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_k \quad (1.28)$$

onde a primeira soma é sobre primeiros vizinhos e a segunda sobre os segundos. O modelo $J_1 - J_2$ é um conjunto de spins vetoriais acoplados com interações de troca a primeiros e segundos vizinhos as quais são bilineares nos operadores de spin e isotrópicas sob rotações de todos os spins.

1.4 Rede triangular e estados magnéticos

Magnetismo coletivo e ordem magnética

Além da existência de um momento magnético no nível atômico, o magnetismo permanente precisa um alinhamento dos momentos magnéticos (ver figura 1.1).

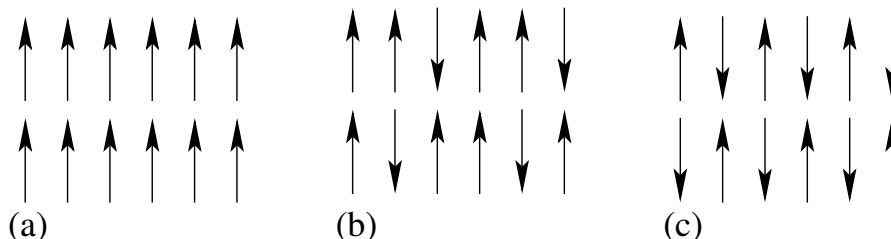


Figura 1.1: Ilustração da ordem (a) ferromagnética, (b) ferrimagnética e (c) antiferromagnética. As setas representam os momentos magnéticos atômicos

Os materiais ferromagnéticos são caracterizados por momentos apontando todos na mesma direção a temperatura $T = 0\text{K}$. Todos os momentos magnéticos atômicos estão alinhados paralelamente o qual é causado pela interação de troca [20]. Quando as magnetizações das sub-redes são iguais e opostas o material é antiferromagnético. A situação mais simples relativo ao comportamento antiferromagnético está dado por momentos magnéticos entre primeiros vizinhos alinhados antiparalelamente. Temos duas possibilidades para descrever a situação:

- i. Uma interação negativa entre primeiros vizinhos.
- ii. A rede particionada em duas sub-redes, cada uma delas exibindo um alinhamento ferromagnético, mas com alinhamento antiparalelo em cada uma das duas sub-redes.

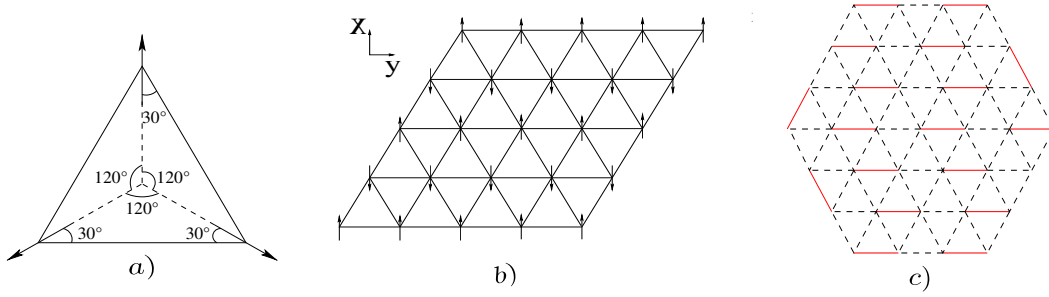


Figura 1.2: a) Célula de Néel, esta plaqueta constitui a unidade básica do estado de Néel, as setas representam as magnetizações as quais formam ângulos de 120° entre si. b) Estado colinear, este estado apresenta simetria de paridade e invariância com respeito ao ângulo que forma a magnetização com o eixo x . c) Uma possível dimerização para a rede triangular.

Os ferrimagnéticos exibem duas sub-redes com magnetizações diferentes e opostas, portanto a magnetização é não nula. Isto representa um ponto intermediário entre ferro e antiferromagnetismo.

Possíveis Estados magnéticos na rede triangular

a. Estado de Néel

A solução clássica na rede triangular para um antiferromagneto de Heisenberg de spin $1/2$ é o estado de Néel clássico que consiste em uma configuração tripartita da rede, na qual as magnetizações formam um ângulo de 120° entre si como se mostra na (figura 1.2a).

b. Estado colinear

A fase colinear que usaremos (figura 1.2b) se caracteriza por estar composta de duas sub-redes com a mesma e oposta magnetização numa configuração bipartita. Na rede triangular se distingue da fase de Néel em que só tem dois sentidos para a magnetização possuindo simetria de paridade e há invariância com respeito ao ângulo que forma a magnetização com o eixo x .

c. Estado de ligação covalente ressonante

Esta fase, figura 1.2c, está caracterizada por ser desordenada e por ter simetrias rotacional e translacional. Anderson [21] propôs um estado que denominamos de ligação covalente ressonante ou **RVB**, de acordo com as suas sigla em inglês "resonating-valence-bond", o qual é uma superposição de funções de onda nas quais cada spin está enlaçado com outro por meio de uma interação tipo singlete [22]. Por exemplo, para dois spins este estado está dado por

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle - |-+\rangle] \quad (1.29)$$

que corresponde ao dímero. Também se cumprem as seguintes relações

$$S^z|\psi\rangle = S^2|\psi\rangle = 0 \quad (1.30)$$

1.5 Interações competitivas e frustração

Interações competitivas

Existem varios tipos de interações competitivas [23], a saber:

- i. Interações auto-competitivas.

Subunidades idênticas acopladas mediante uma interação simples podem competir entre si e formar, devido a esta competição não trivial configurações ordenadas um exemplo é a competição entre interações de troca entre primeiros e segundos vizinhos (1.28).

- ii. Competição entre interações de curto e longo alcance.

Um exemplo deste tipo de competição é a formação de domínios magnéticos. Neste caso a interação dipolar é fraca em comparação com a interação de troca, embora a interação de troca seja de curto alcance mas a interação dipolar não. Assim quando o número de dipolos é grande a energia dipolar aumenta e pode competir com a interação de troca.

- iii. Competição entre interações sobre uma escala similar.

Um exemplo deste tipo de competição é o modelo de Frenkel-Kontorova que consiste em uma cadeia de N osciladores acoplados por molas que simulam um potencial periódico. A física do modelo é determinada pela competição entre a energia elástica a qual favorece uma separação incomensurada entre os osciladores, e a tendência dos osciladores a ficar no fundo dos poços de potencial acarretando uma estrutura comensurada.

Frustração

Os sistemas magnéticos com interações competitivas tem sido estudados por mais de quatro décadas. Um dos exemplos mais bem conhecidos é o modelo de Ising na rede triangular antiferromagética. Não obstante o conceito de frustração começou a tomar forma a partir dos estudos de Toulouse [24] no contexto dos vidros de spin. A frustração foi definida pela primeira vez para sistemas tipo Ising, depois foi generalizada para sistemas de spin vetorial. A frustração é gerada pela competição de varias interações e também pela geometria da rede. O modelo $J_1 - J_2$ exhibe ambos tipos de frustração, resultando

em uma degenerescência do estado fundamental, o qual tem a contribuição dos dois tipos de frustração. Muitos sistemas da matéria condensada são frustrados, no sentido de que existem varias interações competindo, cada uma delas favorecendo um tipo distinto de estado. Essa competição pode ser analisada mudando um certo parâmetro do sistema tal como a temperatura, campo magnético, etc. Há uma variedade de efeitos que resultam

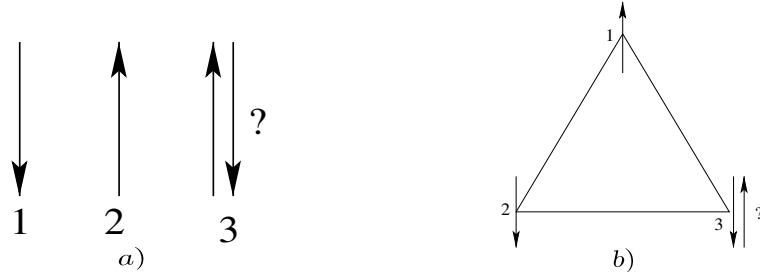


Figura 1.3: a) Exemplo de frustração numa dimensão, o spin 1 aponta para em cima faria que o spin 2 apontasse para abaixo e o spin 3 para em cima, no entanto o spin 2 apontando para em cima faria que o spin 3 apontasse para abaixo, portanto é impossível satisfazer as três inrações simultaneamente. b) No caso da célula triangular em duas dimensões as interações comportam-se analogamente.

da competição de interações entre primeiros vizinhos com interações entre segundos vizinhos. Um exemplo simples é uma cadeia de spins com interações antiferromgnéticas (figura 1.3a) se tomamos três deles resulta impossível satisfazer as duas interações (primeiros e segundos vizinhos) simultaneamente.

A rede triangular com interações antiferromagnéticas a primeiros vizinhos no qual permitem-se só dois possíveis sentidos para a magnetização, como na fase colinear (figura 1.2b), resulta ser o exemplo mais simples de frustração devido à geometria da rede.

Não é possível para todos os spins (no caso colinear por exemplo) nos vértices de um triângulo satisfazer uma configuração antiparalela ótima a qual minimize as interações duas a duas. O estado resultante na rede triangular no caso de spins vetoriais é a chamada estrutura 120° (figura 1.2a). Uma definição dada por Toulouse [24, 25] diz que uma geometria é frustrada se o sinal trocado do produto das interações de troca J_i em torno de uma plaqueta P é negativo.

$$\lambda_P = \text{sinal} \prod_{i \in P} (-J_i) \quad (1.31)$$

onde $J_i > 0$ significa interação antiferromagnética. Portanto a rede triangular é frustrada. O principal efeito da frustração da rede triangular é que a maioria das vezes dá lugar a uma ordem magnética não-colinear como por exemplo a estrutura 120° e frequentemente a uma alta degenerescência. As realizações experimentais de tais sistemas magnéticos frustrados são tipicamente baseados em triângulos e tetraedros. As redes baseadas na

geometria triangular são especialmente importantes nos sistemas frustrados porque fazem que a frustração seja mais visível e natural e porque essa geometria tem mais chance para uma realização experimental em sistemas físicos reais. Por exemplo átomos de He absorvidos na rede 2D do grafite [26] poderia ser um sistema de spin $1/2$ sobre a rede triangular.

Os materiais que contêm momentos magnéticos acoplados antiferromagneticamente podem impedir a formação de ordens magnéticas colineares e frequentemente apresentam um comportamento inusual a baixas temperaturas. Os materiais de interesse podem ter transições de fase a um estado ordenado inusual com propriedades novas, ou podem não ter transição convencional nenhuma.

Aproximação ao problema e explicação do método

2.1 O método usado

Vamos descrever aqui o método que usamos, que é aquele desenvolvido por Oliveira [14]. Estamos interessados em encontrar transições de fase a temperatura zero. Para isso devemos minimizar a energia livre de Helmholtz do sistema $F = U - TS$, que neste caso se reduz à energia $F = U$. Faz-se uma partição da rede como mostra a figura 2.1.

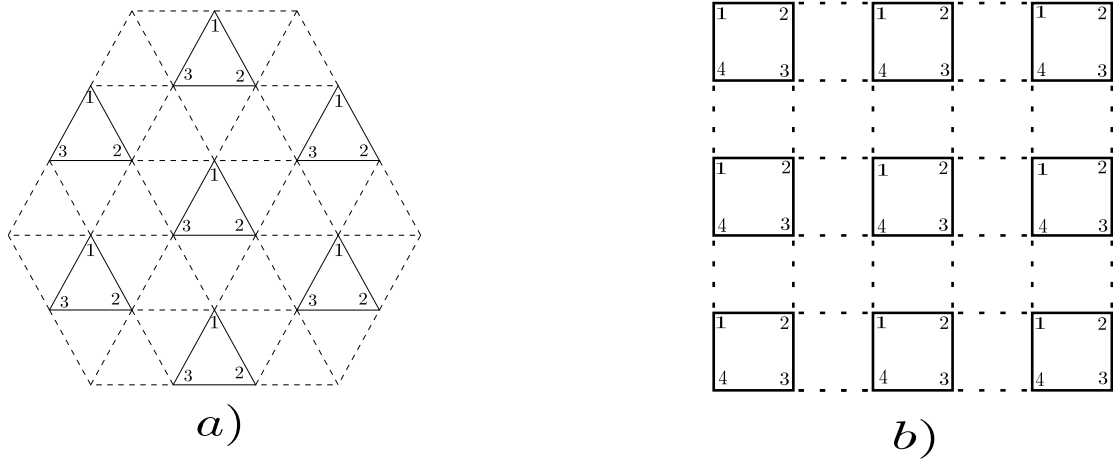


Figura 2.1: Partição de redes 2-dimensionais, as plaquetas mostram-se em linha contínuas: (a) Partição de uma região da rede triangular, os três vértices de cada plaqueta são numerados em sentido horário. (b) Partição de uma região da rede quadrada, os quatro vértices de cada plaqueta são numerados em sentido horário.

Cada parte é chamada de plaqueta, que contém n pontos ($n = 3$ no caso da rede triangular

e $n = 4$ para a rede quadrada). Vamos associar com cada plaqueta estados exatos que construimos convenientemente. Supomos que há N_p plaquetas. Associado a cada plaqueta l existe um estado exato $|\phi_l\rangle$, que é uma combinação linear dos elementos da base (1.15). O estado $|\psi\rangle$ da rede completa é o produto tensorial dos estado de cada uma das plaquetas

$$|\psi\rangle = \bigotimes_{l=1}^{N_p} |\phi_l\rangle \quad (2.1)$$

O nosso operador hamiltoniano está dado por

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j + \alpha \sum_{\langle\langle i,k \rangle\rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_k \quad (2.2)$$

onde a primeira soma é sobre os primeiros vizinhos e a segunda soma é sobre os segundos. Faremos uso do método variacional linear da mecânica quântica. Assim, cada um dos estados $|\phi_l\rangle$ tem 2^n parâmetros em geral

$$|\phi_l\rangle = a_{1,l}|+++, \dots, +\rangle + a_{2,l}|+++, \dots, -\rangle + \dots + a_{2^n,l}|---, \dots, -\rangle \quad (2.3)$$

Tomamos o valor esperado do operador hamiltoniano \mathcal{H} (2.2) com respeito ao ket de prova normalizado $|\psi\rangle$ (2.1). Obtemos assim a energia E da rede como função dos parâmetros $\{a_{i,l}\}_{1 \leq i \leq 2^n}$ e do parâmetro de competição α ,

$$E = \langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle \quad (2.4)$$

A seguir devemos minimizar a energia E para cada valor possível de α , obtendo valores ótimos dos parâmetros $\{a_{i,l}\}_{1 \leq i \leq 2^n}$. Consequentemente obtém-se a energia E como função de α . Mudando o ket de prova $|\psi\rangle$ obtemos outra função da energia E como função de α , e procedemos do mesmo jeito com outro ket de prova. Por último devemos identificar os valores do parâmetro de competição correspondentes às interseções dos gráficos das funções de energia que resultam. Esses valores são precisamente as transições de fase quânticas da rede de spin.

2.2 Exemplos de aplicação do método

a. Cadeia unidimensional

Vamos dar dois exemplos do uso deste método, no qual as plaquetas têm um estado exato $|\phi_l\rangle$. O primeiro exemplo corresponde a uma cadeia de N (par) spins $1/2$ quânticos com interações antiferromagnéticas entre primeiros e segundos vizinhos. O operador Hamiltoniano do sistema está dado pela expressão (1.28), nas unidades de $J_1 \frac{\hbar^2}{4}$, resultando

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+1} + \alpha \sum_{i=1}^N \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+2} \quad (2.5)$$

onde o parâmetro de frustração é $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$.

Vamos escolher como ket de prova $|\psi\rangle$ aquele dado pela seguinte equação

$$|\psi\rangle = \prod_l |\phi_l\rangle \quad (2.6)$$

com $|\phi_l\rangle$ dado pela seguinte expressão:

$$|\phi_l\rangle = \begin{cases} a|+\rangle + b|-\rangle, & l \text{ ímpar} \\ c|+\rangle + d|-\rangle, & l \text{ par} \end{cases} \quad (2.7)$$

onde as constantes a , b , c e d são números complexos restritos à condição de normalização

$$|a|^2 + |b|^2 = |c|^2 + |d|^2 = 1 \quad (2.8)$$

Usando os operadores (1.10) para calcular a energia $\langle \mathcal{H} \rangle = \langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle$ resulta:

$$\langle \mathcal{H} \rangle = N [2(a^*bd^*c + b^*ac^*d) + (|a|^2 - |b|^2)(|c|^2 - |d|^2) + \alpha]$$

onde temos usado a condição de normalização (2.8). Fazendo a hipótese adicional $a = c$, $b = -d$ resulta

$$\langle \mathcal{H} \rangle = N [|a|^4 + |b|^4 - 6|a|^2|b|^2 + \alpha] \quad (2.9)$$

Agora vamos minimizar a expressão (2.9) em função dos parâmetros variacionais a e b . Para isto faremos a substituição $x := |a|^2$ e $y := |b|^2$ com o qual temos:

$$\frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{N} = x^2 + y^2 - 6xy + \alpha \quad (2.10)$$

sujeito à condição de normalização $x + y = 1$. Temos

$$\begin{aligned} \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{N} &= x^2 + (1-x)^2 - 6x(1-x) + \alpha \\ &= 8x^2 - 8x + 1 + \alpha \end{aligned} \quad (2.11)$$

Tomando a derivada com respeito a x e igualando a zero resulta:

$$\frac{\partial (\langle \mathcal{H} \rangle / N)}{\partial x} = 16x - 8 = 0 \quad (2.12)$$

o qual implica que $x = \frac{1}{2}$ e $y = 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$ e portanto $|a|^2 = |b|^2 = \frac{1}{2}$. Escolhendo $a, b \in \mathbb{R}$ chegamos à expressão para cada $|\phi_l\rangle$

$$|\phi_l\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle, & l \text{ ímpar} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle, & l \text{ par} \end{cases} \quad (2.13)$$

Resultando por último

$$\frac{\langle \mathcal{H} \rangle_{min}}{N} = \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{4} - 6\frac{1}{4} + \alpha \right) = -1 + \alpha \quad (2.14)$$

A expressão (2.14) como função de α tem inclinação positiva. Agora vamos tentar com outro ket de prova para encontrar uma expressão da energia em função do parâmetro de competição α , mas que seja decrescente. Para isto vamos tomar o seguinte ket de prova:

$$|\phi_l\rangle = \begin{cases} a|+\rangle + b|-\rangle ; \text{ se } l = 2n + 1 \text{ ou } 2n; \text{ com } n \text{ par} \\ c|+\rangle + d|-\rangle ; \text{ se } l = 2n + 1 \text{ ou } 2n; \text{ com } n \text{ impar} \end{cases} \quad (2.15)$$

sujeito à condição de normalização (2.8). De novo, com a hipótese adicional $a = c, b = -d$ temos:

$$\langle \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \rangle = \langle \vec{\sigma}_3 \cdot \vec{\sigma}_4 \rangle = 1 \quad (2.16)$$

E também temos:

$$\begin{aligned} \langle \vec{\sigma}_2 \cdot \vec{\sigma}_3 \rangle &= 2 \left(-2|a|^2|b|^2 + (|a|^2 - |b|^2)^2 \right) \\ \langle \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_3 \rangle &= \langle \vec{\sigma}_2 \cdot \vec{\sigma}_3 \rangle = |a|^4 + |b|^4 - 6|a|^2|b|^2 \\ \langle \vec{\sigma}_2 \cdot \vec{\sigma}_4 \rangle &= \langle \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_3 \rangle \end{aligned} \quad (2.17)$$

portanto

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} \rangle &= \sum_i [\langle \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+1} \rangle + \alpha \langle \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+2} \rangle] \\ &= \frac{N}{2} + \frac{N}{2} (|a|^4 + |b|^4 - 6|a|^2|b|^2) + \alpha N (|a|^4 + |b|^4 - 6|a|^2|b|^2) \end{aligned} \quad (2.18)$$

Fazendo a substituição $x := |a|^2$ e $y := |b|^2$, $x + y = 1$, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{N} &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2}(x^2 + y^2 - 6xy) + \alpha(x^2 + y^2 - 6xy) \\ &= \frac{1}{2} + \left(\frac{1}{2} + \alpha \right) (x^2 + y^2 - 6xy) = \frac{1}{2} + \left(\frac{1}{2} + \alpha \right) (x^2 + (1-x)^2 - 6x(1-x)) \\ &= \frac{1}{2} + \left(\frac{1}{2} + \alpha \right) (8x^2 - 8x + 1) \end{aligned} \quad (2.19)$$

Minimizando com respeito a x :

$$\frac{\partial (\langle \mathcal{H} \rangle / N)}{\partial x} = \left(\frac{1}{2} + \alpha \right) (16x - 8) = 0 \quad (2.20)$$

Vamos nos focar nos valores positivos de α , então $x = \frac{1}{2}$. Temos

$$|\phi_l\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle ; \text{ se } l = 2n + 1 \text{ ou } 2n; \text{ com } n \text{ par} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle ; \text{ se } l = 2n + 1 \text{ ou } 2n; \text{ com } n \text{ impar} \end{cases} \quad (2.21)$$

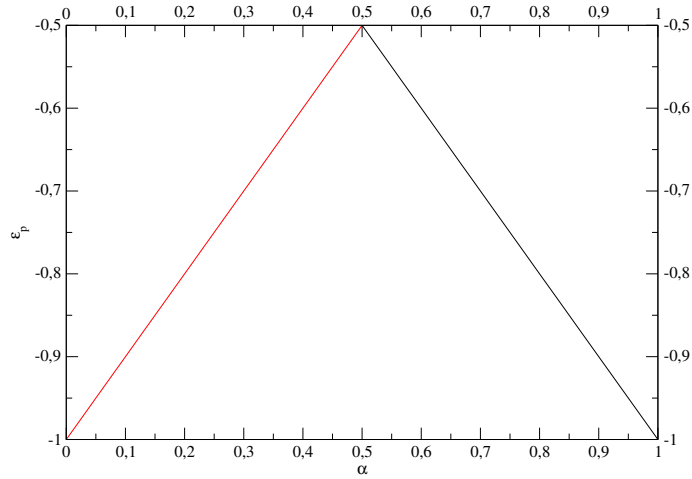


Figura 2.2: Energia por plaqueta ϵ_p para a cadeia unidimensional, a transição é no valor $\alpha = \frac{1}{2}$.

E portanto

$$\frac{\langle \mathcal{H} \rangle_{min}}{N} = \frac{1}{2} + \left(\frac{1}{2} + \alpha \right) \left(8\frac{1}{4} - 8\frac{1}{2} + 1 \right) = -\alpha \quad (2.22)$$

Observamos que a expressão (2.22) para a energia mínima por spin é decrescente com respeito ao parâmetro α . O ponto de interseção das gráficos (figura 2.2) referentes as equações (2.14) e (2.22) é $\alpha = \frac{1}{2}$. Este é o ponto da transição de fase, pois neste ponto o sistema muda o estado de magnetização (ver figuras 2.2 e 2.3), que para $\alpha < \frac{1}{2}$ está dada por:

$$\langle \vec{\sigma}_i \rangle = \begin{cases} (1, 0, 0) & ; \text{ para } i = 1, 3, 5, \dots \\ (-1, 0, 0) & ; \text{ para } i = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (2.23)$$

E para $\alpha > \frac{1}{2}$ está dada por:

$$\langle \vec{\sigma}_i \rangle = \begin{cases} (1, 0, 0) & ; \text{ para } i = 2n + 1 \text{ ou } 2n; \text{ com } n \text{ par} \\ (-1, 0, 0) & ; \text{ para } i = 2n + 1 \text{ ou } 2n; \text{ com } n \text{ ímpar} \end{cases} \quad (2.24)$$



Figura 2.3: Esquerda: Magnetização para $\alpha < \frac{1}{2}$. Direita: Magnetização para $\alpha > \frac{1}{2}$.

b. Rede Quadrada

O segundo exemplo dado por Oliveira [14] corresponde a uma rede quadrada de spins $1/2$ que interagem via o hamiltoniano (2.2). O ket de prova que escolhemos para esta partição da rede, ver figura 2.1b é o produto tensorial de todos os kets para quatro pontos da forma:

$$|\phi_l\rangle = a|+-+ -\rangle + b| - + - +\rangle + c|++- -\rangle + d| - + + -\rangle + e| - - + +\rangle + f|+ - - +\rangle \quad (2.25)$$

onde a, b, c, d, e e f são parâmetros variacionais reais que cumprem a relação de normalização $a^2 + b^2 + c^2 + d^2 + e^2 + f^2 = 1$. O primeiro posto nos elementos da base (1.14), com $n = 4$, corresponde ao vértice 1, o segundo ao vértice 2 e assim por diante, ver figura 2.1b. Com esta escolha do ket de prova, a magnetização $\langle \vec{\sigma}_i \rangle$ do spin i não tem componentes no eixo x nem no eixo y figura. É conveniente usar um conjunto de parâmetros x, y, z, u, v e w , definidos mediante

$$\begin{cases} x = (a + b)/\sqrt{2} \\ y = (c + e)/\sqrt{2} \\ z = (d + f)/\sqrt{2} \\ u = (a - b)/\sqrt{2} \\ v = (c - e)/\sqrt{2} \\ w = (d - f)/\sqrt{2} \end{cases} \quad (2.26)$$

Esses parâmetros cumprem a relação $x^2 + y^2 + z^2 + u^2 + v^2 + w^2 = 1$.

As magnetizações $m_1 := \langle \sigma_1^z \rangle$, $m_2 := \langle \sigma_2^z \rangle$, $m_3 := \langle \sigma_3^z \rangle$, $m_4 := \langle \sigma_4^z \rangle$, para cada sítio da plaqueta são:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1^z \rangle &= 2(xu + yv - zw) \\ \langle \sigma_2^z \rangle &= 2(-xu + yv + zw) \\ \langle \sigma_3^z \rangle &= 2(xu - yv + zw) \\ \langle \sigma_4^z \rangle &= 2(-xu - yv - zw) \end{aligned} \quad (2.27)$$

O estado fundamental obtém-se minimizando a energia $\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle$. Usando o ket de prova (2.25) chegamos à seguinte expressão para a energia por spin ϵ em termos dos parâmetros variacionais, onde usamos a condição de normalização $x^2 + y^2 + z^2 + u^2 + v^2 + w^2 = 1$:

$$\begin{aligned} \epsilon &= -x^2 - u^2 - 4x^2u^2 + 2x(y + z) \\ &+ \alpha \left[\frac{1}{2} - (y - z)^2 - v^2 - w^2 + 6x^2u^2 - 6y^2v^2 - 6z^2w^2 \right] \end{aligned} \quad (2.28)$$

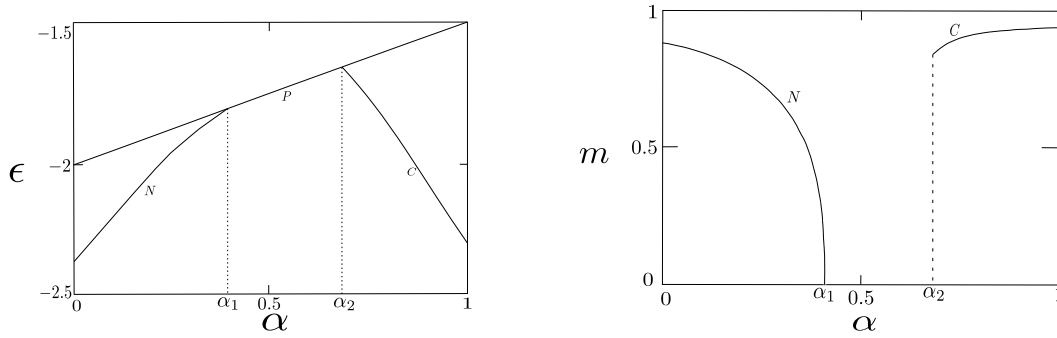


Figura 2.4: Resultado na rede quadrada conforme a referência [14]. Esquerda: Energia por spin ϵ como função de α para as fases de Néel (N), paramagnética (P) e colinear (C). Direita: Magnetização m como função de α

Usando a técnica dos multiplicadores de Lagrange, com a condição de normalização $g = x^2 + y^2 + z^2 + u^2 + v^2 + w^2 - 1$ para minimizar a energia por spin ϵ :

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial x} = \lambda \frac{\partial g}{\partial x}, \quad \frac{\partial \epsilon}{\partial y} = \lambda \frac{\partial g}{\partial y}, \quad \frac{\partial \epsilon}{\partial z} = \lambda \frac{\partial g}{\partial z} \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial u} = \lambda \frac{\partial g}{\partial u}, \quad \frac{\partial \epsilon}{\partial v} = \lambda \frac{\partial g}{\partial v}, \quad \frac{\partial \epsilon}{\partial w} = \lambda \frac{\partial g}{\partial w}$$

Resultando o seguinte conjunto de equações

$$\begin{aligned} -x + y + z + (6\alpha - 4)xu^2 &= \lambda x \\ x - \alpha y + \alpha z - 6\alpha yv^2 &= \lambda y \\ x + \alpha y - \alpha z - 6\alpha zw^2 &= \lambda z \\ -u + (6\alpha - 4)x^2u &= \lambda u \\ -\alpha v - 6\alpha y^2v &= \lambda v \\ -\alpha w - 6\alpha z^2w &= \lambda w \end{aligned} \quad (2.30)$$

Se acharem três fases, como ilustrado na figura 2.4.

a. Fase ordenada de Néel

Nesta fase as magnetizações cumprem as relações $m_1 = -m_2 = m_3 = -m_4 \neq 0$. Chegamos às seguintes relações.

$$v = w = 0 \text{ e } u \neq 0 \quad (2.31)$$

Esta solução ocorre no intervalo $\alpha < \alpha_1 = 0.417$. O parâmetro de ordem vai para zero continuamente. Obtemos então $m_1 = 2xu$. A magnetização esclonada é definida como $m_e = (m_1 - m_2 + m_3 - m_4)/4 = 2xu$. Por conseguinte a solução depende dos parâmetros variacionais não nulos e do parâmetro de competição entre as interações de troca α .

b. Fase colinear.

Nesta fase as magnetizações cumprem as relações $m_1 = m_2 = -m_3 = -m_4 \neq 0$. Resultam às seguintes relações.

$$(v = w = 0 \text{ e } v \neq 0) \text{ ou } (u = v = 0 \text{ e } w \neq 0) \quad (2.32)$$

Para valores $\alpha > \alpha_2 = 0.683$, a energia por spin é menor do que a energia por spin da solução paramagnética, o parâmetro de ordem tem um salto em α_2 cujo valor é 0.841.

c. Estado desordenado, paramagnético (estado RVB).

Nesta fase as magnetizações cumprem as relações $m_1 = m_2 = m_3 = m_4 = 0$. As condições sobre as magnetizações fazem que $xu = yv = zw = 0$. E as eq. (2.30) têm como solução os valores para x , y e z dados por $x = -2/\sqrt{6}$, $y = z = 1/\sqrt{6}$.

Rede Triangular

Vamos trabalhar numa rede bidimensional triangular (de triângulos equiláteros) com condições de contorno periódicas. O operador hamiltoniano do sistema está dado pela expressão (1.28). Os operadores de spin relacionam-se com as matrizes de Pauli mediante:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad (3.1)$$

Mas vamos trabalhar em unidades de $J_1 \frac{\hbar^2}{4}$ resultando no seguinte Hamiltoniano, com $\alpha = J_2/J_1$:

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j + \alpha \sum_{\langle\langle i,k \rangle\rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_k \quad (3.2)$$

A energia do estado fundamental se obtém minimizando a expressão

$$E = \langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle \quad (3.3)$$

onde o ket teste $|\psi\rangle = \prod_l |\phi_l\rangle$, e cada $|\phi_l\rangle$ é o ket teste para cada plaqueta, dado por:

$$\begin{aligned} |\phi_l\rangle = & a|+++ \rangle + b|++-\rangle + c|+-+\rangle + d|+--\rangle \\ & + e| - ++ \rangle + f| - +- \rangle + g| - - + \rangle + h| - - - \rangle \end{aligned} \quad (3.4)$$

onde a, b, c, d, e, f, g, h são em geral números complexos que cumprem a condição de normalização

$$|a|^2 + |b|^2 + |c|^2 + |d|^2 + |e|^2 + |f|^2 + |g|^2 + |h|^2 = 1 \quad (3.5)$$

3.1 Tratamento Clássico do Problema

Antes de entrar no estudo quântico, das fases que construímos, vamos fazer uma exposição da contraparte clássica destas fases. Quando dizemos tratamento clássico das fases estamos abusando da linguagem pois na realidade vamos dotar o sistema com um estado quântico que é um ket do tipo (2.1) em que cada plaqueta é um sítio.

a. Fase de Néel

Como observamos na (figura 3.1), ao ponto 1 da plaqueta corresponde o estado ket $|w\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle + |-\rangle]$, tendo em conta as escolhas dos eixos x , y e z . Para achar o ket do ponto 2, fazemos uma rotação do ket $|w\rangle$ por um ângulo $\varphi = 120^\circ = \frac{2\pi}{3}$, pois o ângulo $\theta = 30^\circ = \frac{\pi}{6}$.

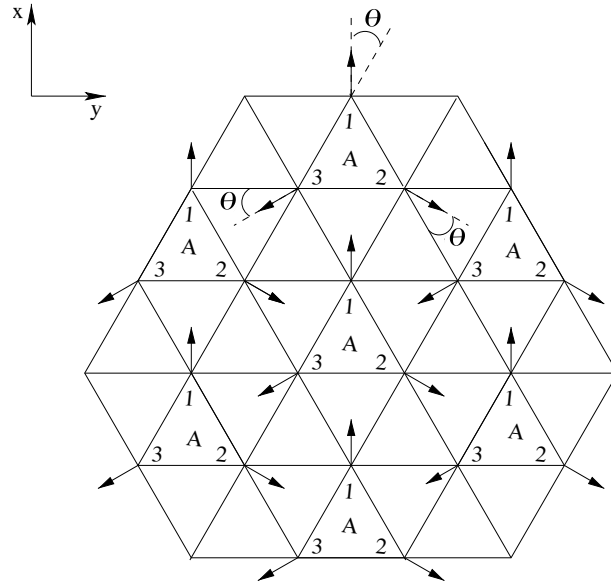


Figura 3.1: Estado de Néel. Observe a escolha dos eixos x e y , o eixo z fica entrando no plano do papel; as setas indicam a orientação das magnetizações cuja magnitude é 1; o ângulo $\theta = \frac{\pi}{6}$; todas as plaquetas são do mesmo tipo A .

O operador de rotação é:

$$\exp\left(\frac{-i\vec{\sigma} \cdot \hat{n}\varphi}{2}\right) = \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) - i\vec{\sigma} \cdot \hat{n} \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right)$$

Com $\varphi = \frac{2\pi}{3}$ resulta

$$\exp\left(\frac{-i\sigma^z\pi}{3}\right) = \cos\left(\frac{\pi}{3}\right) - i\sigma^z \sin\left(\frac{\pi}{3}\right) = \frac{1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2}\sigma^z \quad (3.6)$$

aplicando este operador de rotação no ket $|w\rangle$ resulta

$$\begin{aligned}\exp\left(\frac{-i\sigma^z\pi}{3}\right)|w\rangle &= \frac{1}{2}\left(1 - i\sqrt{3}\sigma^z\right)\frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle + |-\rangle] \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}}[|+\rangle + |-\rangle - i\sqrt{3}|+\rangle + i\sqrt{3}|-\rangle] \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}}\left[\left(1 - i\sqrt{3}\right)|+\rangle + \left(1 + i\sqrt{3}\right)|-\rangle\right]\end{aligned}\quad (3.7)$$

Para o ket do ponto 3, devemos girar $|w\rangle$ por um ângulo $\varphi = \frac{4\pi}{3}$:

$$\exp\left(\frac{-2i\sigma^z\pi}{3}\right) = \cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) - i\sigma^z \sin\left(\frac{2\pi}{3}\right) = -\frac{1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2}\sigma^z \quad (3.8)$$

o qual implica

$$\begin{aligned}\exp\left(\frac{-2i\sigma^z\pi}{3}\right)|w\rangle &= \frac{1}{2}\left(-1 - i\sqrt{3}\sigma^z\right)\frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle + |-\rangle] \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}}\left[\left(-1 - i\sqrt{3}\right)|+\rangle + \left(-1 + i\sqrt{3}\right)|-\rangle\right]\end{aligned}\quad (3.9)$$

Então o ket teste de "cada plaqueta" fica

$$\begin{aligned}|\phi\rangle &= |w\rangle \otimes \exp\left(\frac{-i\sigma^z\pi}{3}\right)|w\rangle \otimes \exp\left(\frac{-2i\sigma^z\pi}{3}\right)|w\rangle \\ &= \frac{1}{4\sqrt{2}}\left[-2|+++\rangle + (1 + i\sqrt{3})|++-\rangle + (1 - i\sqrt{3})|+-+\rangle - 2|+--\rangle\right. \\ &\quad \left.- 2|-++\rangle + (1 + i\sqrt{3})|---\rangle + (1 - i\sqrt{3})|--+\rangle - 2|---\rangle\right]\end{aligned}\quad (3.10)$$

A energia por plaqueta ϵ_p desta fase se pode achar muito simplesmente tendo em conta as interações entre primeiros e segundos vizinhos, há seis primeiros vizinhos e também seis segundos vizinhos (figura 3.2).

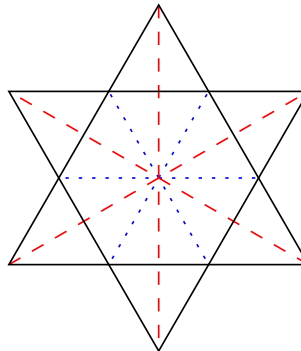


Figura 3.2: Primeiros e segundos vizinhos na rede triangular, as linhas azuis representam as interações entre primeiros vizinhos enquanto que as vermelhas representam as interações entre segundos vizinhos.

Vamos fazer a contagem das contribuições de cada uma das interações à energia, tanto a primeiros vizinhos quanto a segundos vizinhos. Cada ponto da rede tem 6 primeiros vizinhos (figura 3.1), todos com uma magnetização tal que o produto interno entre eles é $-\frac{1}{2}$, e também tem 6 segundos vizinhos tais que o produto interno entre eles é 1, mas estamos contando duas vezes cada interação. Dessa maneira temos o seguinte para a energia E :

$$E = \frac{6}{2} \left(-\frac{1}{2} \right) N + \alpha \frac{6(1)N}{2} \quad (3.11)$$

Agora usando que $N = 3N_p$ resulta:

$$\epsilon_p = -\frac{9}{2} + 9\alpha \quad (3.12)$$

E as magnetizações são

$$\begin{aligned} m_1^x &= 1 & , & & m_1^y &= 0 & , & & m_1^z &= 0 \\ m_2^x &= -\frac{1}{2} & , & & m_2^y &= \frac{\sqrt{3}}{2} & , & & m_2^z &= 0 \\ m_3^x &= -\frac{1}{2} & , & & m_3^y &= -\frac{\sqrt{3}}{2} & , & & m_3^z &= 0 \end{aligned} \quad (3.13)$$

b. Fase colinear

A fase colinear (figura 3.3) apresenta degenerescência infinita devido a que qualquer ângulo das magnetizações (setas) com respeito ao eixo y dá lugar à mesma energia.

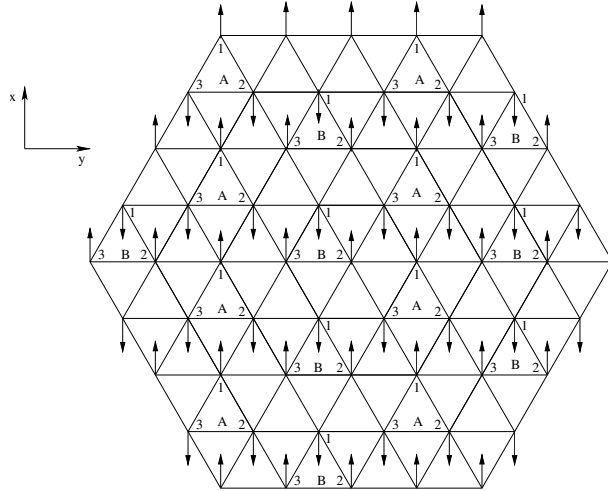


Figura 3.3: Estado correspondente à fase colinear. Observe a escolha dos eixos x e y , o eixo z fica entrando no plano do papel; as setas indicam a orientação das magnetizações; há dois tipos de plaquetas A e B.

Para fazer a contagem da energia por plaqueta ϵ_p vamos proceder da maneira habitual, como observa-se na figura 3.3 cada ponto da rede possui 4 primeiros vizinhos antiparalelos e 2 paralelos, e também possui 4 primeiros vizinhos antiparalelos e 2 paralelos, além disso, estamos contando duas vezes cada interação, portanto a energia E está dada por:

$$E = \frac{-2N}{2} + \alpha \frac{-2N}{2}$$

Consequentemente a energia por plaqueta $\epsilon_p = \frac{E}{N_p}$ é:

$$\epsilon_p = -3 - 3\alpha \quad (3.14)$$

As magnetizações são

$$\begin{aligned} m_{1A}^x &= 1 & , & & m_{1A}^y &= 0 & , & & m_{1A}^z &= 0 \\ m_{2A}^x &= -1 & , & & m_{2A}^y &= 0 & , & & m_{2A}^z &= 0 \\ m_{3A}^x &= -1 & , & & m_{3A}^y &= 0 & , & & m_{3A}^z &= 0 \\ & & & & & & & & & (3.15) \\ m_{1B}^x &= -1 & , & & m_{1B}^y &= 0 & , & & m_{1B}^z &= 0 \\ m_{2B}^x &= 1 & , & & m_{2B}^y &= 0 & , & & m_{2B}^z &= 0 \\ m_{3B}^x &= 1 & , & & m_{3B}^y &= 0 & , & & m_{3B}^z &= 0 \end{aligned}$$

c. Fase de Néel modificada

Esta fase compõe-se de três tipos de plaquetas como se mostra na figura (3.4). O cálculo pode ser feito classicamente, tomando as magnetizações locais como sendo de magnitude 1. Como observa-se na figura 3.4, cada sítio tem dois vizinhos paralelos e o resto formando um ângulo de 120 graus entre si, o produto interno entre os paralelos dá 1, e entre o resto dá $-\frac{1}{2}$. Isto implica que na conta a ser feita devemos fazer a soma $1 + 1 - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$, deste modo a contribuição, à energia, das interações entre primeiros vizinhos é nula. Para calcular a contribuição dos segundos vizinhos, observemos na figura 3.4, que para cada sítio as magnetizações entre segundos vizinhos formam um ângulo de 120 graus entre si e seu produto interno dá $-\frac{1}{2}$, logo a energia E é

$$E = \left(-\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right) \frac{N}{2} \alpha = -\frac{3}{2} N \alpha \quad (3.16)$$

o número dois que está dividindo o N é pelo fato de haver contado duas vezes cada interação. Ainda $N = 3N_p$ implica

$$\epsilon_p = -\frac{9}{2} \alpha = -4.5\alpha \quad (3.17)$$

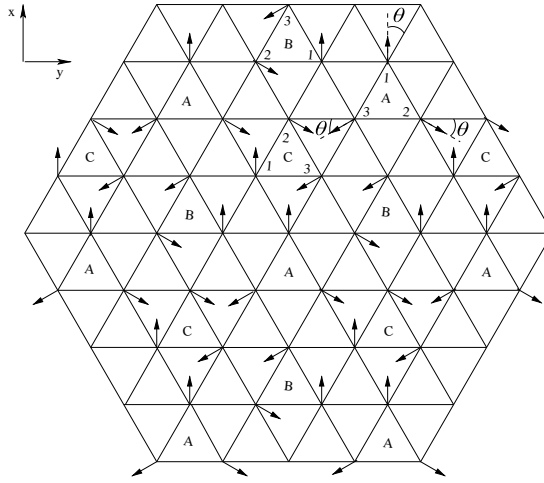


Figura 3.4: Estado de Néel modificado. Observe a escolha dos eixos x e y , o eixo z fica entrando no plano do papel; as setas indicam a orientação das magnetizações cuja magnitude é 1; o ângulo $\theta = \frac{\pi}{6}$; as plaquetas são de três tipos A, B e C que correspondem à permutações entre si.

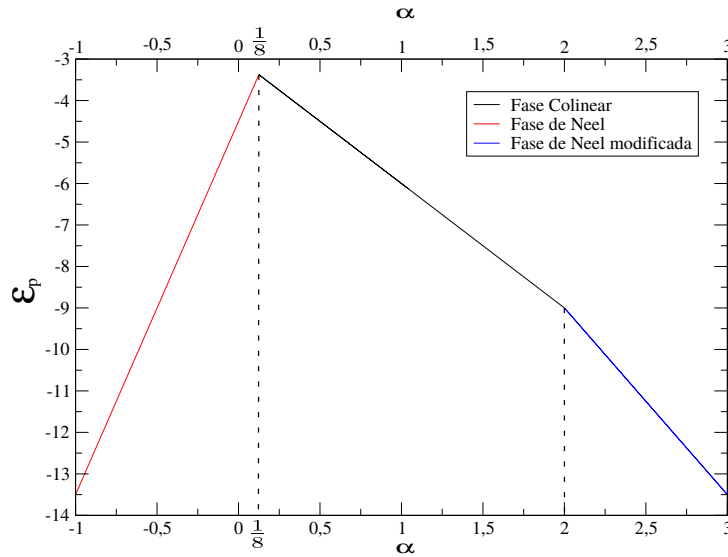


Figura 3.5: Transição clássica desde a fase de Néel para a fase Colinear no valor $\alpha = \frac{1}{8} = 0,125$.

Por último, observando a figura (3.5), conseguimos encontrar a transição clássica da fase de Néel para a fase Colinear no valor do parâmetro de competição $\alpha = \frac{1}{8}$, [5, 6]. Igualando as expressões para a energia por plaqueta para ambas as fases de Néel e colinear (3.12) e (3.14)

$$-\frac{9}{2} + 9\alpha = -3 - 3\alpha \Rightarrow \alpha = \frac{1}{8} \quad (3.18)$$

Da mesma maneira igualando e resolvendo as equações (3.14) e (3.17) encontramos uma transição no valor do parâmetro de competição $\alpha = 2$. Estas transições resultam ser de descontinuas segundo as inclinações dos gráficos de cada fase, ver figura 3.5.

3.2 Tratamento Quântico do Problema

a. Fase de Néel

Para garantir que as magnetizações têm componente z nula, escolhemos o ket teste h, g, f, e da seguinte forma: $h = a^*, g = b^*, f = c^*, e = d^*$, onde a estrela significa complexo conjugado.

O ket teste, equação (3.4), fica

$$\begin{aligned} |\phi\rangle = & a|+++ \rangle + b|++- \rangle + c|+-+ \rangle + d|+-- \rangle \\ & + d^*| -++ \rangle + c^*| -+- \rangle + b^*| - -+ \rangle + a^*| --- \rangle \end{aligned} \quad (3.19)$$

E as magnetizações são

$$\begin{aligned} m_1^x &= \langle \sigma_1^x \rangle = 2(ad + a^*d^* + bc + b^*c^*) \\ m_2^x &= \langle \sigma_2^x \rangle = 2(ac^* + a^*c + bd^* + b^*d) \\ m_3^x &= \langle \sigma_3^x \rangle = 2(ab^* + a^*b + cd^* + c^*d) \\ m_1^y &= \langle \sigma_1^y \rangle = 2i(ad - a^*d^* + bc - b^*c^*) \\ m_2^y &= \langle \sigma_2^y \rangle = 2i(ac^* - a^*c + bd^* - b^*d) \\ m_3^y &= \langle \sigma_3^y \rangle = 2i(ab^* - a^*b + cd^* - c^*d) \\ m_1^z &= \langle \sigma_1^z \rangle = 0 \\ m_2^z &= \langle \sigma_2^z \rangle = 0 \\ m_3^z &= \langle \sigma_3^z \rangle = 0 \end{aligned} \quad (3.20)$$

Agora desejamos que a geometria da fase seja como se mostra na figura 3.6, isto se pode conseguir impondo que $a^* = a, d^* = d, c = b^*$, que de acordo com a equação (3.20) resulta em:

$$\begin{aligned} m_1^x &= 2(ad + ad + bb^* + b^*b) = 4(ad + b_1 + b_2) \\ m_2^x &= 2(ab^* + ab + b^*d + bd) = 2(a + d)(b^* + b) = 4b_1(a + d) \\ m_3^x &= 2(a + d)(b^* + b) = 4b_1(a + d) \\ m_1^y &= 0 \\ m_2^y &= 2i(ab - ab^* + bd - b^*d) = -2i(a + d)(b^* - b) = -4b_2(a + d) \\ m_3^y &= 2i(ab^* - ab + b^*d - bd) = 2i(a + d)(b^* - b) = 4b_2(a + d) \\ m_1^z &= 0 \\ m_2^z &= 0 \\ m_3^z &= 0 \end{aligned} \quad (3.21)$$

O qual implica que

$$\begin{aligned} m_3^x &= m_2^x \\ m_3^y &= -m_2^y \end{aligned} \quad (3.22)$$

Agora segundo se observa na figura (3.6): $(m_1^x)^2 = (m_2^x)^2 + (m_2^y)^2$, e, $(m_2^y)^2 = 3(m_2^x)^2$ logo

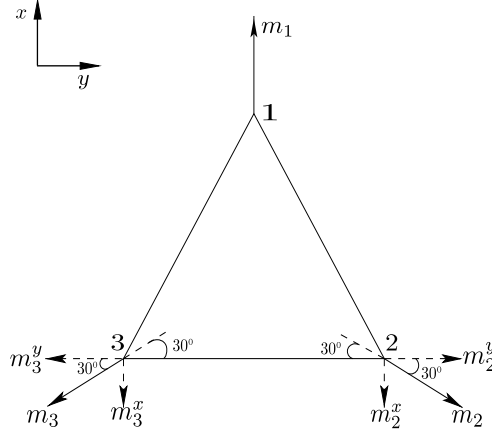


Figura 3.6: Geometria das magnetizações na célula de Néel.

$$(ad + b_1 + b_2)^2 = b_1^2(a + d)^2 + b_2^2(a + d)^2 = (b_1^2 + b_2^2)(a + d)^2$$

Vemos que a condição $b_1^2 + b_2^2 = bb^* = d^2$ é compatível, pois com ela chegamos à seguinte igualdade:

$$(ad + d^2)^2 = d^2(a + d)^2$$

Agora, $(m_2^y)^2 = 3(m_2^x)^2$, portanto, $16b_2^2(a + d)^2 = 3[16b_1^2(a + d)^2]$, logo, $b_2^2 = 3b_1^2$, então

$$b_2 = \pm\sqrt{3}b_1 \quad (3.23)$$

Ademais $d^2 = b_1^2 + b_2^2 = b_1^2 + 3b_1^2 = 4b_1^2 \Rightarrow d = \pm 2b_1$, obtendo as seguintes condições sobre os parâmetros variacionais:

$$\begin{cases} a = a_1 \\ b = b_1 + ib_2 = b_1(1 \pm i\sqrt{3}) = c^* \\ d = d_1 = \pm 2b_1 \end{cases}$$

Escolhemos

$$\begin{cases} b_2 = +\sqrt{3}b_1 \\ d = -2b_1 \end{cases} \quad (3.24)$$

Fazemos esta escolha para que no limite $\lim_{\alpha \rightarrow -\infty} |\phi_l\rangle$ o resultado seja o estado de Néel clássico por razões que ficarão claras mais adiante.

Resultando:

$$\begin{cases} a = a_1 \\ b = b_1 + ib_2 = b_1(1 + i\sqrt{3}) = c^* \\ d = d_1 = -2b_1 \end{cases} \quad (3.25)$$

Se pode observar que ficam só dois parâmetros a_1 e b_1 . O ket teste para a fase de Néel é:

$$\begin{aligned} |\phi_l\rangle = & a_1|+++ \rangle + b_1(1 + i\sqrt{3})|++-\rangle + b_1(1 - i\sqrt{3})|+-+\rangle \\ & -2b_1|+-- \rangle + b_1(1 - i\sqrt{3})|--+\rangle + b_1(1 + i\sqrt{3})| - + - \rangle \\ & -2b_1| - ++ \rangle + a_1| --- \rangle \end{aligned} \quad (3.26)$$

Os valores de a_1 e b_1 que fazem o ket teste da equação (3.26) seja sua contraparte clássica da equação (3.10), são por comparação $a_1 = -\frac{1}{2\sqrt{2}}$ e $b_1 = \frac{1}{4\sqrt{2}}$, esta é a razão de haver escolhido os sinais das relações (3.24). É claro que esses a_1 e b_1 cumprem a relação de normalização

$$a_1^2 + 12b_1^2 = \frac{1}{2} \quad (3.27)$$

Para calcular a energia por plaqueta $\epsilon_p = \langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle / N_p$, onde $|\psi\rangle = \prod_l |\phi_l\rangle$, contamos as contribuições a primeiros e segundos vizinhos como se mostra na (figura 3.2).

$$\epsilon_p = 6a_1^2 - 72b_1^2 - 192(a_1b_1 - 2b_1^2)^2 + 576\alpha(a_1b_1 - 2b_1^2)^2 \quad (3.28)$$

As magnetizações são dadas por:

$$\begin{aligned} m_1^x &= -8a_1b_1 + 16b_1^2, & m_1^y &= 0, & m_1^z &= 0 \\ m_2^x &= 4a_1b_1 - b_1^2, & m_2^y &= \sqrt{3}(8b_1^2 - 4a_1b_1), & m_2^z &= 0 \\ m_3^x &= 4a_1b_1 - b_1^2, & m_3^y &= -\sqrt{3}(8b_1^2 - 4a_1b_1), & m_3^z &= 0 \end{aligned} \quad (3.29)$$

As equações (3.28) e (3.29) estão sujeitas à condição de normalização (3.27).

Visando minimizar a energia por plaqueta, equação (3.28), vamos definir m como sendo o módulo da magnetização

$$m := 8b_1(2b_1 - a_1) = m_1^x \quad (3.30)$$

A energia por plaqueta ϵ_p pode ser escrita como segue

$$\epsilon_p = 6a_1^2 - 72b_1^2 - 3[64(a_1b_1 - 2b_1^2)^2] + 9\alpha[64(a_1b_1 - 2b_1^2)^2]$$

Com a definição de m dada pela equação (3.30), ϵ_p fica

$$\epsilon_p = 6a_1^2 - 72b_1^2 - 3m^2 + 9\alpha m^2 \quad (3.31)$$

A seguir vamos eliminar as duas variáveis a_1 e b_1 . A relação de normalização (3.27) implica $a_1^2 = \frac{1}{2} - 12b_1^2$, e ϵ_p fica

$$\begin{aligned} \epsilon_p &= 3 - 144b_1^2 - 3m^2 + 9\alpha m^2 \\ &= 3 - \frac{9}{2}(32b_1^2) - 3m^2 + 9\alpha m^2 \end{aligned} \quad (3.32)$$

Usando a definição (3.30) resulta:

$$2b_1 - a_1 = \frac{m}{8b_1} \Rightarrow a_1 = 2b_1 - \frac{m}{8b_1}$$

Pondo isto na relação de normalização, equação (3.27), resulta:

$$\left(2b_1 - \frac{m}{8b_1}\right)^2 + 12b_1 = \frac{1}{2}$$

logo

$$32b_1^2 - m + \frac{m^2}{32b_1^2} = 1 \Rightarrow (32b_1^2)^2 - 32(1+m)b_1^2 + m^2 = 0 \quad (3.33)$$

Resolvendo para $32b_1^2$ dá

$$32b_1^2 = \frac{1}{2} \left\{ 1 + m \pm \sqrt{1 + 2m + m^2 - 4m^2} \right\} = \frac{1}{2} \left\{ 1 + m \pm \sqrt{1 + 2m - 3m^2} \right\} \quad (3.34)$$

Por conseguinte a energia por plaqueta ϵ_p equação (3.32) se pode escrever em termos de m

$$\epsilon_p = 3 - \frac{9}{4} \left\{ 1 + m + \sqrt{1 + 2m - 3m^2} \right\} - 3m^2 + 9\alpha m^2 \quad (3.35)$$

escolhemos o sinal positivo(+) na expressão (3.34), pois queremos que a energia ϵ_p seja mínima. Vamos agora minimizar a energia derivando com respeito a m e igualando a zero:

$$\frac{d\epsilon_p}{dm} = 0 \quad (3.36)$$

Resulta

$$-\frac{9}{4} \left\{ 1 + \frac{1-3m}{\sqrt{1+2m-3m^2}} \right\} - 6m + 18\alpha m = 0 \quad (3.37)$$

Resolvendo para α :

$$\alpha = \frac{1}{18m} \left[\frac{9}{4} \left\{ 1 + \frac{1-3m}{\sqrt{1+2m-3m^2}} \right\} + 6m \right]$$

$$\alpha = \frac{1}{3} + \frac{1}{8m} \left\{ 1 + \frac{1-3m}{\sqrt{1+2m-3m^2}} \right\} \quad (3.38)$$

O que segue será graficar m e ϵ_p contra α , para conseguirmos isto damos valores a m , e depois invertemos a relação, ver gráficas 3.8 e 3.9.

b. Fase colinear

Como sabemos a fase colinear caracteriza-se por estar composta de duas subredes cada uma com magnetização igual e oposta dando lugar à uma fase antiferromagnética. Vamos escolher o ket teste para está fase como sendo (ver figura 3.3):

$$\begin{aligned} |\phi_A\rangle &= a|+++ \rangle + b|++- \rangle + b|+-+ \rangle - b| - ++ \rangle \\ &\quad - b|+-- \rangle + b| - +- \rangle + b| - -+ \rangle + a| - - - \rangle. \end{aligned} \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} |\phi_B\rangle &= a|+++ \rangle - b|++- \rangle - b|+-+ \rangle + b| - ++ \rangle \\ &\quad - b|+-- \rangle + b| - +- \rangle + b| - -+ \rangle - a| - - - \rangle. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} m_{1A}^x &= 4b(b-a) \quad , \quad m_{1A}^y = 0 \quad , \quad m_{1A}^z = 0 \\ m_{2A}^x &= -4b(b-a) \quad , \quad m_{2A}^y = 0 \quad , \quad m_{2A}^z = 0 \\ m_{3A}^x &= -4b(b-a) \quad , \quad m_{3A}^y = 0 \quad , \quad m_{3A}^z = 0 \end{aligned} \quad (3.40)$$

$$\begin{aligned} m_{1B}^x &= -4b(b-a) \quad , \quad m_{1B}^y = 0 \quad , \quad m_{1B}^z = 0 \\ m_{2B}^x &= 4b(b-a) \quad , \quad m_{2B}^y = 0 \quad , \quad m_{2B}^z = 0 \\ m_{3B}^x &= 4b(b-a) \quad , \quad m_{3B}^y = 0 \quad , \quad m_{3B}^z = 0 \end{aligned}$$

As relações (3.39) e (3.40) estão sujeitas à condição de normalização:

$$2a^2 + 6b^2 = 1 \quad (3.41)$$

As interações entre primeiros vizinhos se podem dividir em duas partes, as interações internas e as externas. As interações internas têm o mesmo valor para as plaquetas tipo A e B, são interações dos pontos internos (1,2), (1,3) e (2,3), figura (3.3). A expressão delas em função do parâmetro variacional b se mostra na tabela (3.1).

Interação	Valor
1,2	$2a^2 - 10b^2 = 1 - 16b^2$
1,3	$1 - 16b^2$
2,3	$2a^2 + 6b^2 = 1$

Tabela 3.1: Valores das interações internas

Cada interação externa tem o valor absoluto $m^2 = 16(ab - b^2)^2$. Como se mostra na figura (3.3) as interações externas entre primeiros vizinhos (PV) das plaquetas têm sinais, tabela (3.2), que depende dos pontos da rede entre os quais se localiza a interação.

As interações entre PV internas somam $(3 - 32b^2)N_p$.

As dos PV externas somam

$$\frac{N_p}{2}(-2)16(ab - b^2)^2 + \frac{N_p}{2}(-2)16(ab - b^2)^2 = -32N_p(ab - b^2)^2$$

E as interações entre segundos vizinhos (SV) somam

$$(-2)16(ab - b^2)^2 \frac{3}{2}N_p = -48(ab - b^2)^2 N_p$$

Ou seja que a energia por plaqueta ϵ_p é

$$\epsilon_p = 3 - 32b^2 - 32(ab - b^2)^2 - 48\alpha(ab - b^2)^2 \quad (3.42)$$

vamos definir

$$m := 4b(b - a) \quad (3.43)$$

Interação	Sinal
1A,2B	+
1A,3B	+
2A,1A	-
2A,3B	-
3A,1A	-
3A,2B	-
1B,3A	+
1B,2A	+
2B,3A	-
2B,1B	-
3B,2A	-
3B,1B	-

Tabela 3.2: Sinais das interações externas

Usando a definição (3.43) e a condição de normalização (3.41), se obtém a energia por plaqueta ϵ_p em função de m . Para isso precedemos assim:

A equação (3.43) implica que

$$a = b - \frac{m}{4b} \Rightarrow a^2 = b^2 - \frac{m}{2} + \frac{m^2}{16b^2}$$

Agora usando a equação (3.41) se chega a

$$8b^2 - m + \frac{m^2}{8b^2} = 1$$

portanto

$$(8b^2)^2 - (1+m)(8b^2) + m^2 = 0$$

Resolvendo para $8b^2$ resulta

$$8b^2 = \frac{1}{2} \left\{ 1 + m \pm \sqrt{1 + 2m - 3m^2} \right\}$$

Se escolhe o sinal positivo para minimizar a energia por plaqueta ϵ_p .

A expressão para a energia por plaqueta ϵ_p da fase colinear fica então:

$$\epsilon_p = 1 - 2m - 2\sqrt{1 + 2m - 3m^2} - 2m^2 - 3\alpha m^2 \quad (3.44)$$

Como na fase de Néel quântica, vamos agora a minimizar a energia derivando com respeito a m e igualando a zero:

$$\frac{d\epsilon_p}{dm} = 0 \quad (3.45)$$

Resulta:

$$-2 - \frac{2(1-3m)}{\sqrt{1+2m-3m^2}} - 4m - 6\alpha m = 0$$

Resolvendo para α :

$$\alpha = -\frac{2}{3} - \frac{1}{3m} - \frac{1-3m}{3m\sqrt{1+2m-3m^2}} \quad (3.46)$$

De novo vamos graficar m e ϵ_p contra α dando valores a m , e depois invertendo a relação, ver gráficas 3.8 e 3.9.

c. Estado de ligação covalente ressonante

Esta fase só tem sentido dentro da teoria quântica pois o estado correspondente se compõe de uma superposição de dímeros os quais são estados singleto como mostra a figura 3.7; isto é

$$|\phi_l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle - |-+\rangle] \quad (3.47)$$

A única contribuição para a energia $\epsilon_p = \frac{E}{N_p} = \frac{\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle}{N_p}$, onde \mathcal{H} está dado pela expressão (3.2), é dada pelo vizinho próximo que faz parte do singleto.

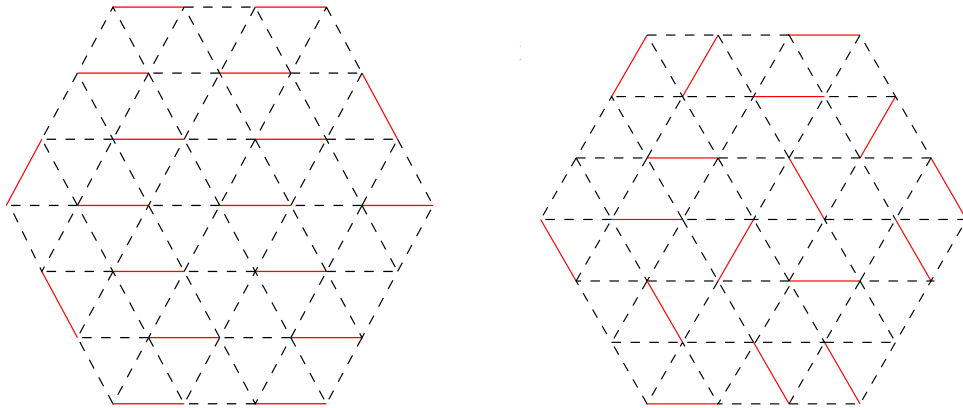


Figura 3.7: Duas possíveis dimerizações de uma região hexagonal da rede triangular, a contagem de energia não se altera, por conseguinte as duas possuem a mesma energia.

Assim os únicos termos que contribuem com a energia são do tipo $\langle \phi_l | \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j | \phi_l \rangle$:

$$\langle \phi_l | \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j | \phi_l \rangle = \frac{1}{2} [\langle + - | - \langle - + |] (\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y + \sigma_i^z \sigma_j^z) [| + - \rangle - | - + \rangle] = -3 \quad (3.48)$$

Como $N = 2N_D$ e também $N = 3N_p$, então $N_D = \frac{3}{2}N_p$, portanto energia se pode escrever em termos de N_p como:

$$E = \frac{N}{2}(-1 - 1 - 1) = \frac{3N_p}{2}(-3) \quad (3.49)$$

resultando o seguinte valor para a energia por plaqueta:

$$\epsilon_p = -4.5 \quad (3.50)$$

A magnetização, $\langle \vec{\sigma}_i \rangle$, em cada ponto da rede é zero

$$\langle \vec{\sigma}_i \rangle = \frac{1}{2} [\langle + - | - \langle - + |] (\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z) [| + - \rangle - | - + \rangle] = 0 \quad (3.51)$$

d. Fase de Néel modificada

Esta fase compõe-se de três tipos de plaquetas como se mostra na figura 3.4. Os kets teste da fase de Néel modificada, ver figura 3.4, correspondem a permutações entre si das magnetizações nos pontos 1, 2 e 3 das plaquetas A, B e C, onde a plaqueta tipo A é a plaqueta que usou-se para os cálculos na fase de Néel.

$$\begin{aligned} |\phi_A\rangle &= a_1 | + + + \rangle + b_1(1 + i\sqrt{3}) | + + - \rangle + b_1(1 - i\sqrt{3}) | + - + \rangle \\ &\quad - 2b_1 | + - - \rangle + b_1(1 - i\sqrt{3}) | - - + \rangle + b_1(1 + i\sqrt{3}) | - + - \rangle \\ &\quad - 2b_1 | - + + \rangle + a_1 | - - - \rangle. \\ |\phi_B\rangle &= a_1 | + + + \rangle + b_1(1 + i\sqrt{3}) | - + + \rangle + b_1(1 - i\sqrt{3}) | + + - \rangle \\ &\quad - 2b_1 | - + - \rangle + b_1(1 - i\sqrt{3}) | + - - \rangle + b_1(1 + i\sqrt{3}) | - - + \rangle \\ &\quad - 2b_1 | + - + \rangle + a_1 | - - - \rangle. \\ |\phi_C\rangle &= a_1 | + + + \rangle + b_1(1 + i\sqrt{3}) | + - + \rangle + b_1(1 - i\sqrt{3}) | - + + \rangle \\ &\quad - 2b_1 | - - + \rangle + b_1(1 - i\sqrt{3}) | - + - \rangle + b_1(1 + i\sqrt{3}) | + - - \rangle \\ &\quad - 2b_1 | + + - \rangle + a_1 | - - - \rangle. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Os parâmetros a_1 e b_1 cumprem a mesma relação de normalização (3.27).

A energia por plaqueta ϵ_p da fase de Néel modificada é:

$$\begin{aligned}
\epsilon_p &= 6a_1^2 - 72b_1^2 + 96(a_1b_1 - 2b_1^2)^2 - 288\alpha(a_1b_1 - 2b_1^2)^2 \\
&= 6a_1^2 - 72b_1^2 + \frac{3}{2}[8b_1(a_1 - 2b_1)]^2 - \frac{45}{10}[8b_1(a_1 - 2b_1)]^2 \\
&= 3 - 144b_1^2 + \frac{3}{2}m^2 - \frac{45}{10}\alpha m^2
\end{aligned} \tag{3.53}$$

Onde usamos as relações (3.27) e (3.30).

Como na fase de Néel se pode achar a relação (3.34), e portanto a energia por plaqueta ϵ_p fica:

$$\epsilon_p = 3 - \frac{9}{4} \left\{ 1 + m \pm \sqrt{1 + 2m - 3m^2} \right\} + \frac{3}{2}m^2 - \frac{9}{2}\alpha m^2$$

Mas escolhamos o sinal positivo(+) porque queremos minimizar a energia ϵ_p , resulta pois:

$$\epsilon_p = 3 - \frac{9}{4} \left\{ 1 + m + \sqrt{1 + 2m - 3m^2} \right\} + \frac{3}{2}m^2 - \frac{9}{2}\alpha m^2 \tag{3.54}$$

Vamos agora minimizar a energia derivando com respeito a m e igualando a zero:

$$\frac{d\epsilon_p}{dm} = 0$$

$$\frac{d\epsilon_p}{dm} = 3m - \frac{9}{4} \left\{ 1 + \frac{1 - 3m}{\sqrt{1 + 2m - 3m^2}} \right\} - 9\alpha m = 0 \tag{3.55}$$

Então α se pode escrever como:

$$\alpha = \frac{1}{3} - \frac{1}{4m} \left\{ 1 + \frac{1 - 3m}{\sqrt{1 + 2m - 3m^2}} \right\} \tag{3.56}$$

Utilizando o mesmo procedimento que antes graficamos m e ϵ_p contra α , e invertimos a relação, ver gráficas 3.8 e 3.9.

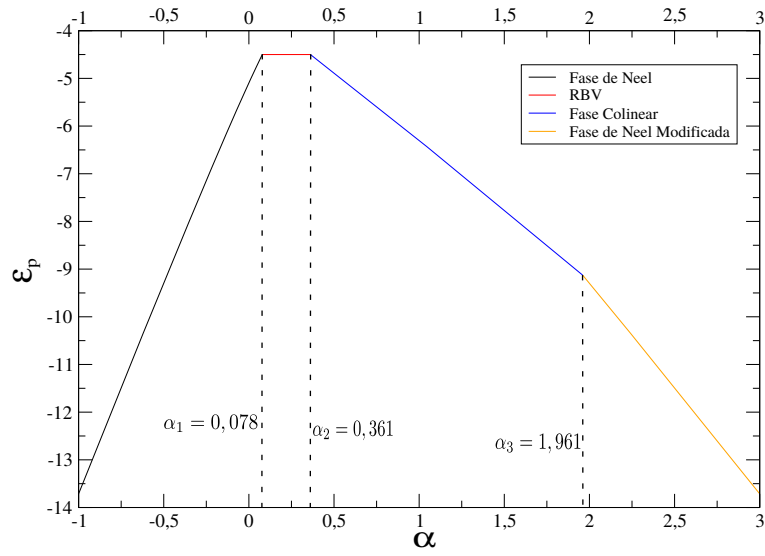


Figura 3.8: Energia por plaqueta ϵ_p como função de α , as transições ocorrem em $\alpha_1 = 0,080$, $\alpha_2 = 0,361$ e $\alpha_3 = 1,961$.

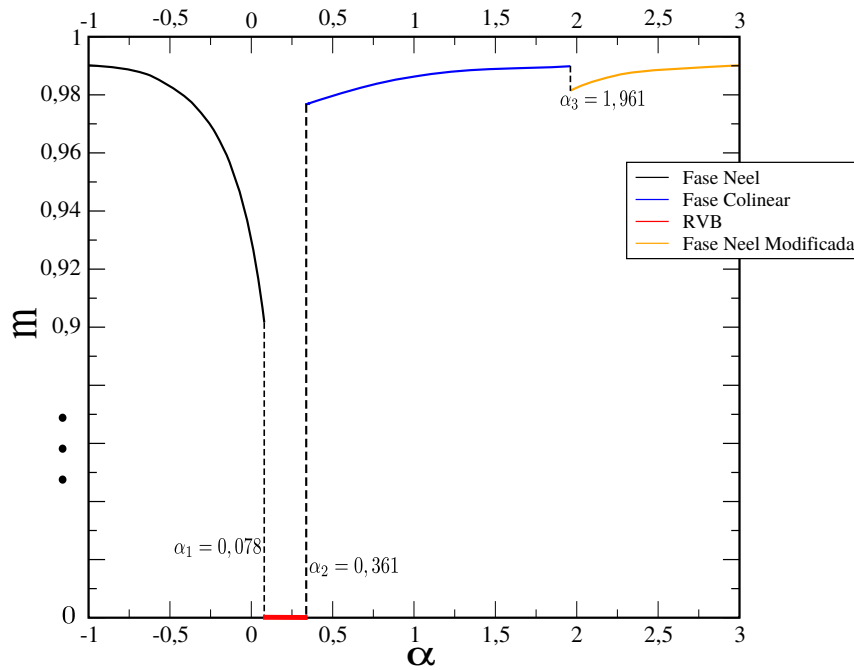


Figura 3.9: Parâmetro de ordem m como função de α , as transições ocorrem em $\alpha_1 = 0,080$, $\alpha_2 = 0,361$ e $\alpha_3 = 1,961$.

Nos gráficos para a energia por plaqueta ϵ_p e a magnetização m (figuras 3.8 e 3.9) se observa que as transições são de primeira ordem, em comparação com a transição na rede quadrada (figura 2.4) onde observam-se duas transições uma delas é contínua e a outra é descontínua, isso observa-se na descontinuidade no gráfico da magnetização ou também no gráfico da energia pois nesse ponto as pendentes do gráfico são diferentes pela esquerda e pela direita.

Por razões de consistência, vamos olhar para os limites clássicos das diferentes fases:

i. Fase de Néel.

Classicamente temos que a magnitude do vetor de magnetização vale 1, neste limite o parâmetro de competição vai para infinito negativo $\alpha \rightarrow -\infty$. Da equação (3.38) temos neste limite $\alpha = -\frac{1}{8\sqrt{1-m}}$, então

$$\alpha^2 = \frac{1}{64(1-m)} \quad (3.57)$$

logo

$$m = 1 - \frac{1}{64\alpha^2} \quad (3.58)$$

como isto a equação (3.35) fica

$$\epsilon_p = 3 - \frac{9}{4} \left\{ 2 - \frac{1}{64\alpha^2} - \frac{1}{4\alpha} \right\} - 3 \left(1 - \frac{1}{64\alpha^2} \right) + 9\alpha \left(1 - \frac{2}{64\alpha^2} \right) \quad (3.59)$$

no limite de α muito grande os denominadores na expressão (3.59) anulam-se, resultando

$$\epsilon_p = 3 - \frac{9}{2} - 3 + 9\alpha = -\frac{9}{2} + 9\alpha \quad (3.60)$$

a qual é a energia por plaqueta para a fase de Néel no tratamento clássico equação (3.12).

ii. Fase colinear.

No limite clássico no qual a magnitude do vetor de magnetização vale 1, temos que α vai para infinito positivo $\alpha \rightarrow +\infty$, a expressão (3.46) fica $\alpha = \frac{1}{3\sqrt{1-m}}$, com o qual temos

$$\alpha^2 = \frac{1}{9(1-m)} \quad (3.61)$$

e portanto

$$m = 1 - \frac{1}{9\alpha^2} \quad (3.62)$$

Então a energia por plaqueta para a fase colinear, expressão (3.44), fica:

$$\begin{aligned} \epsilon_p = 1 - 2 \left(1 - \frac{1}{9\alpha^2} \right) - 2 \sqrt{\frac{1}{9\alpha^2} \left(1 + 3 - \frac{1}{3\alpha^2} \right)} \\ - 2 \left(1 - \frac{1}{9\alpha^2} \right) - 3\alpha \left(1 - \frac{1}{9\alpha^2} \right)^2 \end{aligned} \quad (3.63)$$

no limite que estamos tratando os denominadores anulam-se, resultando

$$\epsilon_p = 1 - 2 - 2 - 3\alpha = -3 - 3\alpha \quad (3.64)$$

que resulta ser a energia por plaqueta clássica, equação (3.14).

iii. Fase de Néel modificada.

Igual que antes, no limite clássico ($m = 1$, e $\alpha \rightarrow \infty$), a expressão (3.56) se reduz a $\alpha = \frac{1}{2\sqrt{1-m}}$ então seu quadrado é

$$\alpha^2 = \frac{1}{4(1-m)} \quad (3.65)$$

logo

$$m = 1 - \frac{1}{4\alpha^2} \quad (3.66)$$

portanto a energia por plaqueta para a fase de Néel modificada, equação (3.54) fica:

$$\begin{aligned} \epsilon_p = & 3 - \frac{9}{2} \left\{ 1 + 1 - \frac{1}{4\alpha^2} + \sqrt{\frac{1}{4\alpha^2} \left(1 + 3 \left(1 - \frac{1}{4\alpha^2} \right) \right)} \right\} \\ & + \frac{3}{2} \left(1 - \frac{1}{4\alpha^2} \right)^2 - \frac{9}{2} \alpha \left(1 - \frac{1}{4\alpha^2} \right)^2 \end{aligned} \quad (3.67)$$

que se reduz a:

$$\epsilon_p = 3 - \frac{9}{4}(2) + \frac{3}{2} - \frac{9}{2}\alpha = -\frac{9}{2}\alpha \quad (3.68)$$

que é exatamente sua contraparte clássica (3.17).

Conclusões e Perspectivas

Neste estudo, analisamos os estados fundamentais da hamiltoniana quântica de Heisenberg definida na rede triangular com interações antiferromagnéticas entre primeiros e segundos vizinhos. Com essa finalidade, utilizamos o método variacional desenvolvido por Oliveira [14], que consiste na partição da rede em plaquetas e na construção de um estado que é um produto tensorial dos possíveis estados das plaquetas. Quatro estados fundamentais, ou fases, foram encontrados. Em função do parâmetro de competição entre as interações de primeiros e segundos vizinhos, encontramos sucessivamente as seguintes fases: antiferromagnética de Néel, colinear, ligação covalente ressonante e Néel modificada. As transições entre eles são todas descontínuas. Notar que no caso da rede quadrada, a transição entre a fase de Néel e o estado de ligação covalente ressonante é contínua [14]. Para melhor entendimento o surgimento das diversas fases, nosso estudo quântico foi precedido de um tratamento clássico.

Usando o tratamento clássico, encontramos uma transição em $\alpha = \frac{1}{8}$ que se separa em duas transições de fase quânticas em $\alpha = 0.079$ e $\alpha = 0.361$. Também encontramos a existência de um estado que não possui ordem magnética que corresponde a um sólido de spin na região do parâmetro de competição $0.079 < \alpha < 0.361$. Anderson [21] propôs uma fase de ligação covalente ressonante, um estado desordenado sem ordem magnética de longo alcance, como o estado fundamental da rede triangular. Este sólido é precisamente a fase intermediária que encontramos a qual deve ser comparada com os resultados de Li [13, 12] cujos valores para a região são $0.060 < \alpha < 0.165$. A fase colinear é a única que apresenta frustração.

Nosso cálculo variacional prevê que a fase de ligação covalente ressonante é sucedida por duas fases quando o parâmetro de competição cresce: a colinear e em seguida aquela

que denominamos de Néel modificada. Isso não acontece com os cálculos feitos na rede quadrada em que a fase de ligação covalente ressonante é sucedida por uma única fase. Para saber se a existência dessas duas fases de fato acontece, devemos efetuar um cálculo variacional com um ket de prova mais elaborado ou utilizar outros métodos.

Pretendemos no futuro trabalhar com a rede triângular por meio de outra abordagem que consiste na utilização do método de Monte Carlo desenvolvido por Oliveira [27, 28, 29]. Esse método se baseia no cálculo do maior autovalor de matrizes cujos elementos são não-negativos. Portanto, ele pode ser utilizado para obter o estado fundamental de Hamiltonianas que podem ser transformadas, por meio de uma transformação unitária, num operador com elementos de matriz não-negativos. Mais precisamente, devemos realizar uma transformação unitária de tal forma que $-\mathcal{H}$ possua elementos não diagonais não-negativos.

Referências Bibliográficas

- [1] L. J. de Jongh, *Magnetic Properties of Layered Transition Metal Compounds*, Kluwer, Dordrecht, 1990.
- [2] L. J. de Jongh and A. R. Midiema, *Experiments on Simple Magnetic Systems*, Taylor and Francis, London, 1970.
- [3] R. J. Birgenau, H. J. Guggenheim, and G. Shirane, *Phys. Rev. B* **8** (1973) 304.
- [4] T. R. de Oliveira, G. Rigolin, M. C. de Oliveira and E. Miranda, *Phys. Rev. Lett.* **97** (2006) 170401.
- [5] R. Deutscher, H. U. Everts, *Z. Phys. B* **93** (1993) 77.
- [6] T. Jolicoeur, E. Dagotto, E. Gagliano and S. Bacci, *Phys. Rev.* **42** (1990) 4800.
- [7] R. Kaneko, S. Morita and M. Imada, *J. Phys. Soc. Jnp.* **83** (2014) 093707.
- [8] A. V. Chubokov and T. Jolicoeur, *Phys. Rev B* **46** (1992) 11137.
- [9] L. O. Manuel and H. A. Cecatto, *Phys. Rev B* **60** (1999) 9489.
- [10] F. Wang and A. Vishwanath, *Phys. Rev B* **74** (2006) 174423.
- [11] Z. Zhu and S. R. White, *Phys. Rev B* **92** (2015) 041105.
- [12] R. F. Bishop and P. H. Y. Li. *EPL* **112** (2015) 67002.
- [13] P. H. Y. Li, R. F. Bishop, and C. E. Campbell, *Phys. Rev. B* **91** (2015) 014426.
- [14] M. J. de Oliveira *Phys. Rev. B* **43** (1991) 6181.

- [15] O. D. Mabelini, O. D. R. Salmon and J. R. de Sousa, *Solid State Communication* **165** (2013) 33.
- [16] C. Kittel, *Introduction to Solid State*, Wiley New York, 1971, 4th edition.
- [17] Richard P. Feynman, Robert B. Leighton and Matthew Sands, *Lectures on Physics, volume 2*, California Institute of Technology 1964.
- [18] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloë, *Quantum Mechanics Volume 1*, Wiley-VCH. 1977.
- [19] Poliana Heiffig Penteado. *Modelo de Heisenberg antiferromagnético com interações não-uniformes*, Universidade de São Paulo, São Carlos 2008.
- [20] Mathias Getzlaff, *Fundamentals of Magnetism*, Springer, New York, 2008.
- [21] P. W. Anderson, *Mat. Res. Bull.* **8** (1973) 153.
- [22] S. Zhou, J. A. Hoyos, V. Dobrosavljevic and E. Miranda, *EPL* **87** (2009) 27003.
- [23] Elena Y. Vedmedenko, *Competing Interactions and Pattern Formation in Nanoworld*, Wiley-VCH 2007.
- [24] G. Toulouse, *Commun. Phys.* **2** (1977) 115.
- [25] H. T. Diep, *Magnetic Systems with Competing Interactions*, World Scientific 1994.
- [26] V. Elser, *Phys. Rev. Lett.* **62** (1989) 2405.
- [27] M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. B* **48** (1993) 6141.
- [28] R. A. Sauerwein and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. B* **49** (1994) 5983.
- [29] R. A. Sauerwein and M. J. de Oliveira, *Mod. Phys. Lett. B* **9** (1995) 619.