Antiferromagneto Bidimensional
na presença de um campo magnético staggered

Marcos Paulo Pontes Fonseca

Junho de 2007

Livros Grátis

http://www.livrosgratis.com.br

Milhares de livros grátis para download.

Antiferromagneto Bidimensional na presença de um campo magnético staggered

Marcos Paulo Pontes Fonseca

Orientador: Prof. Dr. Antônio Sérgio Teixeira Pires

Tese apresentada à
UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS,
como requisito parcial para a obtenção do grau de
DOUTOR EM CIÊNCIAS.

Junho de 2007

Pensamentos

O futuro da ciência
é o enigma do próprio ser,
uma vez desvendado
a humanidade atingirá
conhecimentos capazes,
de desvendar o próprio universo...

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. Antônio Sérgio Teixeira Pires, por sua dedicação e competência como orientador.

Ao meu pai que sempre me ajudou, e tem um grande orgulho de mim.

A minha mãe em memória, que custeou os meus estudos.

As minhas avós em memória, que sempre muito me admiraram.

A Josiane que muito me ajudou nos momentos difíceis.

A Deus pelos caminhos da vida, e pela superação nos momentos difíceis.

A todos os meus tios(as), primos(as) e parentes em geral pelo incentivo.

Aos funcionários do departamento de Física, pessoal das secretarias e bibliotecárias, em especial Shirley, Marluce, Edina e Perpétua.

A todos os professores, que ajudaram na minha formação na UFMG, e na UVF em especial ao Prof. Dr. Afranio Rodrigues Pereira.

Aos irmãos Alexandre Faissal, Carlos Renato, Damião, Lauro, Mario, Miquita dentre outros.

A amiga Mariana e ao amigo Geraldo Moreira pelas discussões teóricas.

Aos colegas da pós-graduação.

A Capes, que financiou este trabalho.

Resumo

O primeiro trabalho que nos dedicamos, foi calcular a energia do gap à temperatura zero, a fim de detectar uma transição de fase quântica, para o modelo de Heisenberg antiferromagnético bidimensional, na presença do campo staggered. Mapeando o antiferromagneto através do modelo sigma não-linear, calculamos a energia do gap em função da temperatura para $g > g_c$ e $g < g_c$. Aqui g é o parâmetro de acoplamento que mede as flutuações quânticas, e g_c é o parâmetro de acoplamento crítico. Calculamos também a energia do gap à temperatura zero, como função do campo staggered[1].

Um outro trabalho que fizemos, consiste em estudarmos as interações entre ondas de spin e um sóliton, no modelo antiferromagnético bidimensional clássico, na presença de um campo staggered. Partido do Hamiltoniano de Heisenberg clássico(modelo sigma não-linear), obtivemos as equações de movimento, e encontramos uma solução estática para o modelo representando o sóliton. Calculamos as auto-funções para as ondas de spin na presença do sóliton, e os desvios de fase exatos. Utilizando do método de aproximação de Born, calculamos os desvios de fase, e comparamos com os resultados exatos. E ainda calculamos a correção quântica para a energia do sóliton[2]. Além deste, usamos estes resultados, para calcular a largura de linha EPR para o modelo[3].

A apresentação desta tese consiste em cinco capítulos; o primeiro capítulo é introdutório, onde descrevemos alguns modelos magnéticos, e mostramos como o Hamiltoniano contínuo, é obtido através do Hamiltoniano discreto, e fazemos um breve comentário sobre a importância em estudarmos materiais magnéticos de baixa dimensionalidade. No segundo capítulo descrevemos, como ocorrem as transições de fases em materiais magnéticos de baixa dimensionalidade, especialmente sobre transição de fase de Kosterlitz-Thouless[4], e a transição de fase quântica. No terceiro capítulo apresentamos o primeiro trabalho, onde calculamos a energia do gap em função da temperatura no espectro de excitações magnéticas em duas dimensões, utilizando o modelo sigma não-linear com o campo staggered. No quarto capítulo apresentamos os outros trabalhos relacionados, com a interação entre ondas de spin e o sóliton no antiferromagneto na presença do campo staggered, assim como a largura de linha EPR devido a interação. No quinto e último capítulo, apresentamos nossas conclusões sobre os trabalhos, e as perspectivas futuras.

Abstract

The first work of this thesis is the calculation of the energy of the gap at zero temperature, in order to detect a quantum phase transition, for the two-dimensional Heisenberg antiferromagnet, in the presence of a staggered field. Mapping the antiferromagnet into the non-linear sigma model, we calculated the energy of the gap as a function of the temperature for $g > g_c$ and $g < g_c$. Here g is the parameter that measures the quantum fluctuations, and g_c it is the critical parameter. We also calculated the energy of the gap at zero temperature, as function of the staggered field[1].

The second work, consists in the study the interactions between spin waves and a soliton, in the classic two-dimensional antiferromagnet, in the presence of a staggered field. We have used the classic Heisenberg hamiltonian (non-linear sigma model), and we have obtained the equations of motion. We found a static solution for the model representing the soliton. We calculated the eigenfunctions for the spin waves in the presence of the soliton, and the exact phase deviations. Using the Born approximation, we calculated the phase deviations, and compared with exact results. We also calculated the quantum correction to the energy of the soliton[2]. We used these results to calculate the EPR line width for the model[3].

The presentation of this thesis consists of five chapters; the first chapter is introductory, where we describe some magnetics models, and we show how continuous Hamiltonian is obtained starting from a discreet one. In the second chapter we describe the phases transitions in magnetic materials of low dimensionality, especially the Kosterlitz-Thouless phase transition[4], and the quantum phase transition. In the third chapter we presente the first work, where we calculate the energy of the gap as a function of the temperature in the spectrum of magnetic excitements in two dimensions, using the non-linear sigma model with the staggered field. In the fourth chapter we presente the other works, with the interaction among spin waves and the soliton in the antiferromagnet in the presence of the staggered field, as well as the EPR line width due to interaction. In the fifth and last chapter, we make our conclusions, and we presente the perspectives future.

Conteúdo

PENSAMENTOS **i**

AGRADECIMENTOS **ii**

RESUMO **iii**

ABSTRACT **iv**

1 Introdução **1**

1.1 Materiais Magnéticos de baixa dimensão 1

1.2 Modelos Magnéticos 3

1.3 Versão contínua do modelo antiferromagneto na presença do campo staggered 13

2 Transições de fase **19**

2.1 Transição de Fase de Kosterlitz-Thouless 19

2.2 Transição de Fase Quântica 26

2.2.1 Estado Fundamental de Néel ordenado para o Antiferromagneto 29

2.2.2 Estado Fundamental Quântico Desordenado para o Antiferromagneto 32

2.2.3 Região Quântica Crítica para o Antiferromagneto ($x_1 \ll 1$ ou $x_2 \gg 1$) 33

3 Antiferro com campo staggered e a energia de ponto zero **35**

3.1 Introdução 35

3.2 O modelo 36

3.3 Introdução do vínculo 37

3.4 Expansão $1/N$ 38
3.5 A solução da Integral Gaussiana 40
3.6 Método do Ponto de Sela 41
3.7 Resultados 42
3.8 Conclusões 46

4 Antiferromagneto 2D na presença de um campo staggered 47
4.1 Introdução 47
4.2 Solução sóliton para o modelo 49
4.3 Auto-funções para as ondas de spin na presença do sóliton 53
4.4 Os desvios de fase 54
4.5 Correção quântica para energia clássica do sóliton 57
4.6 Contribuição para largura de linha da ressonância paramagnética eletrônica (EPR) 57
4.7 Conclusões 62

5 Conclusões 64

A Desenvolvimento da Equação(4.3) 66

B Obtenção das Eqs. de movimento para os campos (θ e ϕ) 68

C Solução da equação das ondas de spin 70

Lista de Figuras

1.1 Estrutura típica de um material magnético isolante 2-D (K_2NiF_4)(M. Steiner and A. R. Bishop). 2

1.2 A dimerização da rede bidimensional. Cada par de círculos brancos e pretos correspondem a um dimer. 14

2.1 Configuração dos spins representando um vórtice. 22

2.2 Configuração dos spins representando um anti-vórtice. 22

2.3 Configuração dos spins representando um par de vórtice e anti-vórtice. 23

2.4 O diagrama de fase do Hamiltoniano de Heisenberg como uma função da temperatura e do acoplamento g. O acoplamento g mede a força das flutuações quânticas. Este é inversamente proporcional ao valor do spin S, e também depende da razão de J. Os parâmetros $X_1 = NK_BT/(2\pi\rho_s)$ e $X_2 = K_BT/\Delta$ controlam as propriedades de escala do antiferromagneto. Aqui ρ_s é o spin *stiffness* referente ao estado fundamental da ordem de Néel, e Δ é o gap do estado quântico desordenado. 27

3.1 O fator do expoente da equation $m \propto H_s^{\gamma}$, como função do parâmetro de acoplamento g. 44

3.2 A energia em $T = 0$ como função do campo staggered para $g > g_c$. . . 44

3.3 A energia em $T = 0$ como função do campo staggered para $g < g_c$. . . 44

3.4 A energia em função da temperatura para $H_s = 0.1$ e $g < g_c$. 45

3.5 A energia em função da temperatura para $H_s = 0.1$ e $g > g_c$. 45

4.1 A curva 1 corresponde a (H=0.95) e a curva 4 para (H=0.1). No limite $h \to 0$ a curva correspondente é a 5, na qual é diferente da curva 4, mas seu comportamento no infinito é fornecido pela equação (4.10). Quando $H \approx 1$, as curvas 2 e 3 são qualitativamente semelhantes a distribuição dos vortices num super-fluido de Gross-Pitaevskii. . . . 51
4.2 O gráfico da largura de linha EPR em função da temperatura para H=0.2J, devido a interação sóliton-magnon. 61
4.3 O gráfico do logaritmo da largura de linha EPR em função da temperatura para H=0.2J, H=0.4J e H=0.6J. 62

C.1 Estes gráficos foram feitos para um sóliton de carga topológica $q = 1$. 71

Capítulo 1

Introdução

1.1 Materiais Magnéticos de baixa dimensão

Sabemos que sistemas constituídos de muitos corpos dependem das coordenadas das partículas interagentes que o constituem, e por sua vez, os graus de liberdade das partículas estão associados com o número de dimensões. Existem materiais na natureza, que apesar de possuírem um aspecto físico tridimensional, o caráter magnético é unidimensional ou bidimensional. Particularmente, materiais magnéticos de baixas dimensões servem como modelos em física do estado sólido, tanto no ponto de vista teórico quanto do experimental. Nos últimos anos, estes sistemas de baixas dimensões estão sendo muito estudados, devido a grande quantidade de novos materiais com tais propriedades sintetizados em laboratórios.

Existem dois argumentos, um experimental e outro teórico, que reforça a utilidade de estudarmos, por exemplo, a física bidimensional. O primeiro, é que um grande número de materiais na natureza tem um comportamento magnético bidimensional. Este consiste, geralmente, de uma grande rede de moléculas, na qual os átomos centrais das moléculas interagem ao longo da rede. Entretanto estes átomos são isolados de outros átomos pertencentes a outros grupos de moléculas intercaladas. Desta forma temos um material magnético tridimensional, porém os átomos isolantes fazem com que este material tenha um comportamento magnético bidimensional. Assim temos um material tridimensional subdividido em planos bidimensionais, com acoplamento fraquíssimo entre os planos. O segundo argumento, está baseado na teoria de transições de fases, especialmente na aproximação do

grupo de renormalização. Nesta teoria torna-se claro que a regra fundamental para as flutuações no equilíbrio depende da dimensionalidade do espaço. Em geral, à medida que a dimensionalidade espacial de um sistema físico diminui os efeitos das flutuações, tornam-se mais importantes. O limite extremo ocorre em uma dimensão, onde existe somente uma direção de interação, para cada átomo na rede, sendo assim, a flutuação de um átomo qualquer destrói a ordem entre as duas partes do sistema. Conseqüentemente é impossível manter a ordem de longo alcance num sistema unidimensional mesmo a temperatura zero.

Existe uma grande classe de materiais quase-bidimensionais tais como[5]: K_2CuF_4, Rb_2CrCl_4, $(CH_3NH_3)_2CuCl_4$ e $BaM_2(XO_4)_2$ com $M = Co$, Ni,...(metais da família $8B$ da tabela periódica) e $X = As$, P, etc.(elementos da coluna $5A$ da tabela periódica). Portanto, existe uma infinidade de materiais magnéticos com características magnéticas de baixas dimensões. Isto nos motiva a estudar materiais magnéticos de baixa dimensionalidade, principalmente no que se refere a física teórica. Um material típico com caráter magnético bidimensional é mostrado na Figura (1.1). Aqui existem dois efeitos que reduzem a interação entre os planos. O

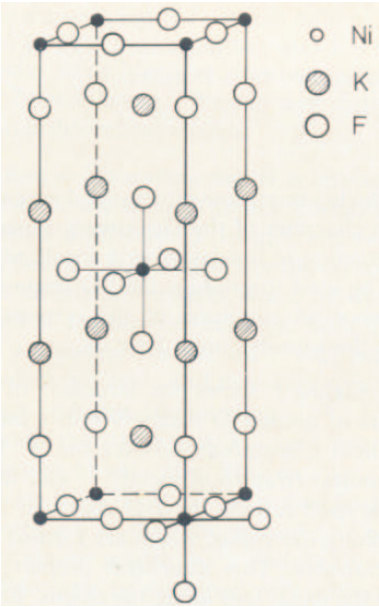

Figura 1.1: Estrutura típica de um material magnético isolante 2-D (K_2NiF_4)(M. Steiner and A. R. Bishop).

primeiro está relacionado ao plano-K intermediário que repele as camadas magnéticas distanciando-as. O segundo efeito é devido à camada indicada pelo íon de Ni no centro da célula, na qual efetivamente ameniza os choques entre as camadas magnéticas de cima e de baixo. Então o sistema tem um comportamento magnético bidimensional, isto é, um material quase-bidimensional.

1.2 Modelos Magnéticos

Uma característica fundamental do campo magnético é o seu carácter dipolar. Isto é uma conseqüência da ausência de uma carga magnética isolada, porque até então não há indícios de sua existência. O elétron é uma das partículas fundamentais da natureza, sendo um monopolo elétrico em relação aos campos elétricos e um dipolo em relação aos campos magnéticos. Associado ao momento de dipolo magnético do elétron existe um momento angular intrínseco denominado spin ($\vec{S}$). Devemos acrescentar também, que não podemos conhecer simultaneamente o momento linear do elétron e sua posição. Sendo assim, a dinâmica do elétron deve ser descrita por uma função de onda, que obedece à equação de Schrödinger[6].

Quando os átomos estão muito próximos uns dos outros, suas interações dão origem às moléculas, que por sua vez podem interagir para formar os sólidos. Sistemas macroscópicos contém milhares de átomos, que se organizam formando redes ordenadas com parâmetros bem definidos como o espaçamento de rede (distância entre dois átomos consecutivos). Em um sólido metálico, enquanto os elétrons nas camadas mais internas dos átomos estão fortemente ligados aos seus respectivos núcleos, os elétrons mais externos podem estar "livres"para se locomoverem através do sólido. Estes elétrons são responsáveis pela condução elétrica nos materiais condutores. Se os átomos que formam um determinado sólido, apresentam um momento angular total não nulo (que pode aparecer devido ao movimento dos elétrons ao redor do núcleo e também devido ao spin do elétron), então novas interações entre os átomos aparecem, e o sólido passa a exibir propriedades muito interessantes, que levam ao fenômeno do magnetismo[7, 8, 9].

As interações entre átomos magnéticos são basicamente de dois tipos. Uma interação aparece devido ao fato de existir associado ao momento angular total do elétron um momento de dipolo magnético. Esta interação é chamada de dipolo-

dipolo, e tem como principal característica o fato de ser uma interação de longo alcance. A interação de dipolo-dipolo é muito fraca, e não desempenha um papel importante no alinhamento dos spins. A outra interação é devido ao princípio de exclusão, e é chamada de interação de troca ou interação de Heisenberg[10, 11]. Esta interação, ao contrário da interação de dipolo-dipolo, é de curto alcance. A interação de troca é a principal responsável pelo alinhamento dos spins, e conseqüentemente é a principal responsável pela formação do magnetismo nos materiais magnéticos. A interação de troca é baseada no princípio de exclusão[10, 11]. O princípio de exclusão está fundamentado em dois argumentos. O primeiro afirma que duas ou mais partículas idênticas, que possuem spin semi-inteiro, não podem ocupar o mesmo estado quântico. O segundo argumento é que um sistema constituído de partículas com spin semi-inteiro, deve ser descrito por uma função de onda total anti-simétrica. Em outras palavras, todas as funções de onda anti-simétricas têm propriedades coerentes com as exigências do princípio de exclusão. Neste caso, se duas partículas são descritas por uma auto-função total anti-simétrica, elas não podem estar em um dado estado, com os mesmos números quânticos espaciais e de spin. A condição especificada no segundo enunciado do princípio de exclusão, é mais forte do que a especificada no primeiro enunciado, porque satisfaz tanto o primeiro enunciado, quanto à exigência da indistinguibilidade, que impõem auto-funções totais terem simetrias definidas. Por exemplo, se a auto-função total de um sistema de duas partículas não tiver simetria definida, as quantidades mensuráveis serão modificadas ao permutarmos as coordenadas de duas partículas. E qualquer quantidade mensurável, que pode ser obtida a partir de auto-funções totais simétricas ou anti-simétricas, não é afetada por uma troca das coordenadas das partículas.

As características de simetria das partículas são estabelecidas experimentalmente. Determinou-se que sistemas descritos por partículas com número quântico de spin semi-inteiro, devem ser descritos por auto-funções totais anti-simétricas, enquanto que sistemas descritos por partículas com número quântico de spin inteiro, devem ser descritos por autofunções totais simétricas. A auto-função total espacial de um sistema, é obtida pelo produto de todas as auto-funções espaciais de cada partícula, que constitui o sistema. Da mesma maneira a auto-função total de spin de um sistema, é também obtida pelo produto de todas as auto-funções de spin de cada partícula, que constitui o sistema. Assim sendo, a auto-função total que descreve

o sistema, é o produto entre a auto-função total espacial e a auto-função total de spin.

Para simplificar nosso raciocínio, vamos considerar um sistema constituído de apenas dois elétrons. A auto-função total espacial deste sistema, pode ser escrita através da auto-função a seguir:

$$\psi_{espacial} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2) \pm \psi_a(\vec{r}_2)\psi_b(\vec{r}_1)], \tag{1.1}$$

onde a e b representa um conjunto particular dos três números quânticos espaciais referentes a $\vec{r}_1$ e $\vec{r}_2$, que representam as coordenadas dos elétrons. Os sinais mais $(+)$ e menos $(-)$ representam as auto-funções espaciais simétrica e anti-simétrica respectivamente.

As formas das autofunções de spin, simétrica e anti-simétrica, constituem um problema um tanto distinto. A razão é que a variável de spin é discreta. Cada elétron pode ter apenas duas orientações de spin possíveis, uma para cima e outra para baixo, em relação a um eixo z de referência. Para o caso de dois elétrons que não interagem, haverá somente quatro diferentes estados de spin para o sistema. Conseqüentemente, somente quatro auto-funções de spin são possíveis, como pode ser visto na tabela.

Estado	S	S_z
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\mid\uparrow\downarrow\rangle - \mid\downarrow\uparrow\rangle)$	0	0
$\mid\uparrow\uparrow\rangle$	1	1
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\mid\uparrow\downarrow\rangle + \mid\downarrow\uparrow\rangle)$	1	0
$\mid\downarrow\downarrow\rangle$	1	-1

O módulo do momento angular total de spin para os dois elétrons é dado por

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2. \tag{1.2}$$

O vetor $\vec{S}$ e $\vec{S}_z$ são quantizados de acordo com as relações

$$\vec{S} = \sqrt{S(S+1)}\hbar,$$
$$\vec{S}_z = m_s\hbar. \tag{1.3}$$

A primeira auto-função na tabela representa um estado com $|\vec{S}| = 0$, conhecido como estado de singleto, onde os spins são antiparalelos. Neste caso a auto-função de spin

é anti-simétrica. Note que este estado muda de sinal, quando os spins dos elétrons são trocados. Enquanto que os outros três estados não mudam de sinal. Estes outros três estados, com $|\vec{S}| = 1$, são chamados de tripleto, e tem para auto-funções de spin um caráter simétrico. Nos estados de tripleto, os spins são essencialmente paralelos. As auto-funções de spin do tripleto obrigam que a auto-função espacial deva ser anti-simétrica, e no estado de singleto a auto-função espacial deva ser simétrica. A explicação para este fato, é que o produto de uma autofunção simétrica com uma autofunção anti-simétrica, terá como resultado uma auto-função total anti-simétrica, o que está de acordo com o princípio de exclusão. Portanto, quando os spins são paralelos, haverá uma probabilidade muito alta dos elétrons estarem afastados um do outro. Entretanto no caso dos spins estarem antiparalelos a probabilidade maior, é dos dois elétrons estarem próximos um do outro. A exigência de uma descrição precisa do sistema deva utilizar uma auto-função total anti-simétrica, pela troca das partículas, conduz a um acoplamento entre suas variáveis espaciais e de spin. As partículas comportam-se como se seu movimento fosse influenciado, por uma força cujo sinal depende da orientação relativa de seus spins. Esta é a chamada força de troca.

Denotaremos E_t e E_s os menores auto-valores de energia, referentes às auto-funções espaciais do singleto e do tripleto respectivamente, obtidas através da equação de Schrödinger. O estado fundamental terá spin zero ou um, dependendo somente se E_s for menor ou maior que E_t. Para um sistema de dois elétrons independentes existe um teorema elementar[12], afirmando que função de onda do estado fundamental deve ser simétrica. Então o estado fundamental deve ter spin total zero. Entretanto este teorema só assegura o caso para o sistema de dois elétrons, e conseqüentemente é importante encontrarmos uma forma para estimar e diferença $E_s - E_t$, que pode ser generalizada para um sólido de N átomos. Visto que, $E_s - E_t$ é a diferença entre os auto-valores de um Hamiltoniano contendo somente interações eletrostáticas, esta energia deverá ser da ordem da diferença de energias eletrostáticas, e conseqüentemente deverá ser capaz de dominar a origem das interações magnéticas.

Vamos ilustrar um método aproximado, que descreve a diferença $E_s - E_t$. Suponha resolver o problema de dois elétrons através da equação de Schrödinger utilizando a aproximação de elétron independente, isto é, vamos ignorar a interação coulombiana entre os elétrons no potencial, permanecendo somente a interação de

cada elétron com os dois íons, no qual estão fixos em posições R_1 e R_2. A equação de Schrödinger para dois elétrons assume a forma a seguir.

$$(H_1 + H_2)\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \tag{1.4}$$

onde

$$H_i = -\frac{\hbar}{2m}\nabla_i^2 - \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_1|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_2|} \qquad i = 1, 2. \tag{1.5}$$

Sendo o Hamiltoniano em (1.4) é a soma de Hamiltonianos de um único elétron, a solução pode ser construída através das soluções da equação de Schrödinger para um só elétron

$$H\psi(\vec{r}) = \varepsilon\psi(\vec{r}). \tag{1.6}$$

Se $\psi_0(\vec{r})$ e $\psi_1(\vec{r})$ são as duas soluções de (1.6) de mais baixa energia, com energias $\varepsilon_0 < \varepsilon_1$, então a solução simétrica de menor energia para a equação de Schrödinger aproximada (1.4) será:

$$\psi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_0(\vec{r}_1)\psi_0(\vec{r}_2) \qquad E_s = 2\varepsilon_0. \tag{1.7}$$

E a solução anti-simétrica de menor energia é dada por:

$$\psi_t(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_0(\vec{r}_1)\psi_1(\vec{r}_2) - \psi_0(\vec{r}_2)\psi_1(\vec{r}_1) \qquad E_t = \varepsilon_0 + \varepsilon_1. \tag{1.8}$$

A diferença de energia entre os estados de tripleto e singleto pode ser escrita como

$$E_s - E_t = \varepsilon_0 - \varepsilon_1. \tag{1.9}$$

Para prótons muito separados as soluções da equação (1.6), juntamente com o método de ligação compacta[11] especializado no caso para duas partículas, nos fornece uma excelente aproximação. O método de ligação compacta pega as funções de onda de um estado estacionário para um único elétron no sólido, e fazem combinações lineares com as funções de onda estacionárias atômicas centradas nos pontos R da rede. No caso de duas partículas, as combinações lineares corretas são escritas a seguir:

$$\psi_0(\vec{r}) = \phi_1(\vec{r}) + \phi_2(\vec{r}), \tag{1.10}$$

$$\psi_1(\vec{r}) = \phi_1(\vec{r}) - \phi_2(\vec{r}), \tag{1.11}$$

onde $\phi_i(\vec{r})$ é a função de onda eletrônica do estado fundamental, para um único átomo de hidrogênio, na qual o próton está fixo em R_i. A combinação linear com o sinal positivo terá menor energia, visto que, esta não possui nodos. Então as funções de onda (1.7) e (1.8), fornecidas pela aproximação de elétrons independentes, tornam-se:

$$\psi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) + \phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1) + \phi_1(\vec{r}_1)\phi_1(\vec{r}_2) + \phi_2(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2), \tag{1.12}$$

e

$$\psi_t(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = [2\phi_2(\vec{r}_1)\phi_1(\vec{r}_2) - \phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_1)]. \tag{1.13}$$

A equação (1.12) nos fornece uma excelente aproximação para o estado fundamental da equação de Schrödinger (1.4), onde as interações entre os elétrons são ignoradas. Entretanto, esta solução nos fornece uma péssima aproximação para equação original de Schrödinger, quando a interação entre os elétrons é considerada. No primeiro e segundo termo em (1.12), cada elétron está orbitando um núcleo diferente de átomos vizinhos. Quando os dois prótons estão afastados a energia de interação entre os dois elétrons é pequena, e então, para descrevermos uma molécula com dois átomos levemente perturbados, os dois primeiros termos são realmente muito bons. Entretanto, em cada um dos dois últimos termos em (1.12), ambos os elétrons estão localizados em órbitas sobre o mesmo próton. Sua energia de interação não é consideravelmente importante, quando os prótons estão muito afastados. Estes dois últimos termos descrevem um contexto incorreto, quando as interações entre os elétrons são consideradas.

O estado de tripleto terá menor energia que o estado de singleto, se introduzirmos a interação entre os elétrons no Hamiltoniano, ou quando os prótons estiverem mais afastados. Entretanto, isto não significa que seja verdadeiro o estado de tripleto representar o estado fundamental. Outro estado simétrico pode ser obtido baseado em uma outra aproximação considerando apenas os dois primeiros termos de (1.12). Neste estado os dois elétrons nunca se localizarão no mesmo próton, e conseqüentemente sua energia deve ser muito mais baixa que o estado fundamental da aproximação de elétrons independentes:

$$\bar{\psi}_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) + \phi_2(\vec{r}_1)\phi_1(\vec{r}_2). \tag{1.14}$$

A teoria que faz esta aproximação para o estado fundamental do tripleto (1.8), e do singleto (1.14) através da equação de Schrödinger, é conhecida como aproximação

de Heitler-London[11]. Evidentemente, para prótons muito afastados o estado de singleto Heitler-London é muito mais exato, do que no estado de singleto na aproximação de elétrons não interagentes. Por outro lado, quando os prótons são muito próximos a aproximação de elétrons independentes é mais exata para o estado fundamental que a aproximação de Heitler-London. O resultado do método de Heitler-London para $E_s - E_t$ é o ponto de partida para um tratamento mais refinado, e é a nomenclatura que mais aprofunda no assunto do magnetismo. A aproximação de Heither-London usa as funções de onda do tripleto (1.13) e do singleto (1.14) para estimar a diferença de energia entre os estados de tripleto e singleto como:

$$E_s - E_t = \frac{\langle \bar{\psi}_s | H | \bar{\psi}_s \rangle}{\langle \bar{\psi}_s | \bar{\psi}_s \rangle} - \frac{\langle \psi_t | H | \psi_t \rangle}{\langle \psi_t | \psi_t \rangle}, \tag{1.15}$$

onde H é o Hamiltoniano $P_1^2/2m + P_2^2/2m + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$. Devido ao fato dos elementos de matriz entre os dois estados diferirem totalmente na troca de coordenadas entre os dois elétrons, a diferença de energia entre o singleto e tripleto é referida como sendo uma diferença de troca, ou também vista como sendo uma fonte de interação magnética, isto é, uma *interação de troca*.

Este é um caminho para expressarmos a dependência do spin referente à diferença de energia entre os estados de tripleto-singleto num sistema de dois elétrons. Embora este exemplo não seja necessariamente muito complicado, é de fundamental importância na análise energética das configurações de spins num sólido isolante real. Primeiramente devemos notar que: quando os dois prótons estão afastados, o estado fundamental descreve dois átomos de hidrogênio, e conseqüentemente é quatro vezes degenerado, visto que cada elétron pode ter duas orientações de spin. Uma outra consideração é que: quando os prótons estão próximos o sistema também é quádruplamente degenerado. Após tais condições estes quatro estados, deverão ser uma regra dominante, para determinar muitas propriedades importantes da molécula, como por exemplo, nas propriedades do equilíbrio térmico quando kT é comparável a $E_s - E_t$. Esta simplificação, na qual o conjunto dos mais altos estados é ignorado, é freqüentemente utilizada, para representar a molécula como sendo um simples sistema de quatro estados. Se vamos representar um estado geral de uma molécula como uma combinação linear dos estados (tabela1), é conveniente expressarmos a interação eletromagnética, através de um operador conhecido como Hamiltoniano de spin. Neste caso, seus autovalores são iguais ao do Hamiltoniano

original dentro dos quatro estados, e cujas autofunções fornecem os estados de spin correspondentes.

Para construirmos o Hamiltoniano para o sistema de dois elétrons, devemos notar que cada elétron possui um operador de spin individual, que satisfaz $\vec{S}_i^2 = 1/2(1/2+1) = 3/4$. Assim sendo o spin total $\vec{S}$ satisfaz a relação a seguir:

$$\vec{S}^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = \frac{3}{2} + \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2. \tag{1.16}$$

Visto que $\vec{S}^2$ tem o autovalor $S(S+1)$ nos estados de spin $\vec{S}$, segue de (1.16) que o operador $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ tem autovalor $-3/4$ no estado de singleto ($S = 0$), e $+1/4$ nos estados de tripleto. Conseqüentemente o operador

$$H^{spin} = \frac{1}{4}(E_s + 3E_t) - (E_s - E_t)\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2, \tag{1.17}$$

tem autovalor E_s no estado de singleto, e E_t em cada um dos três estados de tripleto. Redefinindo o zero de energia podemos omitir a constante $(E_s + 3E_t)/4$ comum para todos os quatro estados, e reescrever o Hamiltoniano de spin como:

$$H^{spin} = -J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2, \text{ onde } J = (E_s - E_t). \tag{1.18}$$

O Hamiltoniano de spin é o produto escalar dos operadores $\vec{S}_1$ e $\vec{S}_2$. Note que J é positivo ou negativo dependendo somente, se E_t é menor ou maior que E_s. Isto simplesmente refere-se ao fato de que os spins são paralelos no estado de tripleto, e anti-paralelo no estado de singleto. É importante ressaltar, que em contraste com a interação magnética dipolar, o acoplamento do Hamiltoniano de spin depende somente da orientação relativa dos dois spins, mas não de suas direções com respeito a $\vec{R}_1 - \vec{R}_2$. O fato é que o Hamiltoniano tem simetria rotacional. Para quebrarmos a simetria rotacional devemos acrescentar ao Hamiltoniano um acoplamento anisotrópico tais como: interações dipolares ou acoplamento de spin-órbita. Tal anisotropia é de grande importância no entendimento da existência de direções fáceis e difíceis de magnetização, e desempenham uma regra importante no conceito da teoria de formações de domínios. Quando o número de íons é muito grande ($N \gg 1$), é mais fácil representarmos as interações entre os spins, através de uma soma entre todos os pares vizinhos, a fim de descrevermos o comportamento aproximado dos spins num sólido real.

Em geral, nossa atenção será focalizada em sistemas de duas dimensões, descrito pelo seguinte Hamiltoniano

$$H = -J \sum_{<ij>} [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \lambda S_i^z S_j^z], \tag{1.19}$$

onde a soma é sobre os sítios primeiros vizinhos (i, j) de uma rede quadrada bidimensional $(2D)$, J é a constante de troca, e pode representar um sistema ferromagnético($J > 0$) ou antiferromagnético ($J < 0$) dependendo do seu sinal, S^x, S^y e S^z são as componentes do vetor de spin, e o λ é o parâmetro de anisotropia. O Hamiltoniano (1.19), dependendo do valor da anisotropia λ, reproduz os seguintes modelos teóricos usados no estudo do magnetismo:
1)$\lambda = 0$, modelo XY e o modelo do rotor planar;
2)$0 < \lambda < 1$, modelo de plano-fácil;
3)$\lambda = 1$, modelo de Heisenberg isotrópico;
4)$\lambda > 1$, modelo de Heisenberg eixo-fácil.
Os valores de λ acima, descrevem a orientação preferencial para os spins, a fim de minimizar a energia do estado fundamental do sistema. Nos casos 1 e 2 os spins tendem a se orientar paralelamente ao plano xy. Seria interessante mencionar que o Hamiltoniano do caso 1 representa dois modelos distintos, são eles:modelo rotor planar e modelo XY. A distinção entre estes modelos é devido a dinâmica. Assim sendo, o modelo do rotor planar não possui dinâmica ao contrário do modelo XY. Uma característica comum aos modelos planares, é que os mesmos possuem simetria rotacional e translacional. Para uma rede descrita por um Hamiltoniano que possui simetrias rotacional e translacional, existe um teorema(LSM)[13], garantindo que se um sistema de spins semi-inteiro, sofrer uma quebra espontânea de simetria translacional, o estado fundamental será degenerado ou o espectro de excitação terá um gap de energia muitíssimo pequeno. Isto é muito importante no estudo de excitações não-lineares, uma vez que estas excitações podem quebrar a simetria translacional. Um campo magnético externo aplicado no sistema, pode quebrar a simetria rotacional do sistema, introduzindo novas características importantes. O caso 3, é chamado de isotrópico, porque os spins não tem uma direção preferencial para apontarem. No último caso($\lambda > 1$), a tendência dos spins é apontarem em uma direção perpendicular ao plano xy. Este tipo de anisotropia também quebra a simetria rotacional no plano.

A baixa dimensionalidade proporciona a origem das excitações topológicas, que se comportam como pseudo-partículas: vórtices para os modelos 1 e 2, e sólitons para os modelos 3 e 4. Um trabalho interessante, que mostra várias soluções de excitações topológicas para os modelos de plano-fácil e eixo fácil em uma e duas dimensões, foi escrito por Kosevich *et al.*[14]. Existem dois tipos de vórtices, os vórtices planares e os vórtices fora do plano. De acordo com Gouvêa *et al*[15], existe uma anisotropia crítica λ_c, na qual para valores inferiores a λ_c os vórtices estáveis são os planares, e para valores superiores são os vórtices fora do plano. Eles usaram simulação numérica para calcular as anisotropias críticas para as redes quadrada, hexagonal e triangular.

No modelo com anisotropia de plano-fácil o estado fundamental é ordenado mesmo no caso quântico, contudo para temperaturas diferentes de zero ele fica desordenado. Isto significa que não temos uma transição de fase do tipo Ising[16]. Entretanto nestes sistemas temos uma transição de fase de ordem topológica mais conhecida como transição de fase de Kosterlitz-Thouless[4], que será discutida com mais detalhes no capítulo 2. Já para o modelo de eixo-fácil o estado fundamental é caracterizado pelo ordenamento dos spins, isto é, possui uma magnetização diferente de zero, e conseqüentemente temos uma transição de fase do tipo Ising. Uma característica comum aos modelos planares é que eles não possuem ordem de longo alcance. Esta afirmação é baseada no teorema de Mermin e Wagner [17]. Este teorema afirma que simetrias globais contínuas não podem ser quebradas espontaneamente em sistemas com interação de curto alcance em $1D$ e $2D$. As flutuações térmicas de mais baixa energia (ondas de spin) é que são responsáveis pela destruição da ordem de longo alcance, em sistemas magnéticos planares de baixa dimensionalidade à temperatura próxima de zero.

Neste trabalho enfocamos nossa discussão para o modelo de Heisenberg isotrópico na presença do campo staggered. O campo staggered é um campo magnético, que pode ser simulado experimentalmente em laboratório, na qual o campo varia entre primeiros vizinhos de spin de forma alternada (h e $-h$) perpendicular ao plano xy. Ou seja, os spins tendem a se alinharem numa ordem puramente de Néel, caracterizando o estado fundamental do sistema. O Hamiltoniano de spin pode ser escrito

como

$$H = -J \sum_{<ij>} [\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + g_0 \mu_0 B (-1)^i S_i^z], \tag{1.20}$$

onde o vetor de spin que caracteriza o modelo em cada sítio (i) da rede, possui três componentes $\vec{S}_i = S_i^x \hat{\imath} + S_i^y \hat{\jmath} + S_i^z \hat{k}$. Devido a presença do campo staggered, os spins tem uma tendência a apontarem na direção de eixo-fácil. Aqui g_0 é a razão giromagnética, μ_0 é o magneton de Bohrn, e B representa o campo magnético.

1.3 Versão contínua do modelo antiferromagneto na presença do campo staggered

No limite de temperatura zero, a versão contínua para este modelo pode ser obtida por um processo análogo as referências[18, 19]. As variáveis de spin são tratadas como vetores clássicos de módulo constante, e satisfazendo a equação de movimento

$$\frac{\partial \vec{S}_{i,j}}{\partial t} = \vec{S}_{i,j} \times \vec{F}_{i,j}, \tag{1.21}$$

onde $\vec{S}_{i,j}^2 = S^2$. O campo efetivo $\vec{F}_{i,j}$ é determinado pela relação geral

$$\vec{F}_{i,j} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{S}_{i,j}}, \tag{1.22}$$

ou mais explicitamente

$$\vec{F}_{i,j} = -J(\vec{S}_{i+1,j} + \vec{S}_{i-1,j} + \vec{S}_{i,j+1} + \vec{S}_{i,j-1}) + g_0 \mu_0 (-1)^i B S \hat{z}. \tag{1.23}$$

A contribuição da interação de troca no campo efetivo(1.23), contém quatro termos referentes aos primeiros vizinhos de $\vec{S}_{i,j}$. Denotaremos $b = g_0 \mu_0 B$. Para propormos um estudo eficiente da dinâmica, vamos considerar uma aproximação contínua, no qual é possível termos uma anisotropia fraca

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{b}{J}} \ll 1. \tag{1.24}$$

Em uma dimensão o limite contínuo é obtido através de um processo de dimerização[18]. Uma rede quadrada pode também ser descrita, através de uma coleção de dimeres como ilustrado na Figura(1.2). Os sítios da rede original são divididos

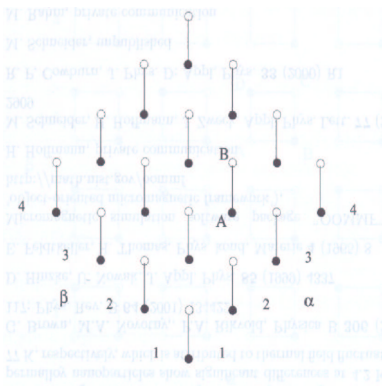

Figura 1.2: A dimerização da rede bidimensional. Cada par de círculos brancos e pretos correspondem a um dimer.

em dois conjuntos de círculos (pretos e brancos), que representam as subredes. Esta designação é usada meramente para indicar, que os dois spins de um mesmo dimer pertencem a subredes diferentes. Em particular, o estado fundamental (Néel) apresenta dois spins vizinhos em direções opostas, mas nas subredes dois vizinhos mais próximos, apontam na mesma direção.

Um dimer genérico AB é rotulado por um par de índices (α, β) numerado consecutivamente como $(\alpha, \beta = 1, 2, ..., N)$. Vamos supor que N é par. Denotaremos por $A_{\alpha,\beta}$ e $B_{\alpha,\beta}$ dois spins do dimer AB. Assim, a equação(1.21) é escrita como um sistema de duas equações acopladas

$$\frac{\partial \vec{A}_{\alpha,\beta}}{\partial t} = \vec{A}_{\alpha,\beta} \times \vec{F}_{\alpha,\beta}, \tag{1.25a}$$

$$\frac{\partial \vec{B}_{\alpha,\beta}}{\partial t} = \vec{B}_{\alpha,\beta} \times \vec{G}_{\alpha,\beta}, \tag{1.25b}$$

onde os campos efetivos $\vec{F}$ e $\vec{G}$ são dados por:

$$\vec{F}_{\alpha,\beta} = -J(\vec{B}_{\alpha,\beta} + \vec{B}_{\alpha-1,\beta} + \vec{B}_{\alpha,\beta-1} + \vec{B}_{\alpha-1,\beta-1}) + b\vec{A}_{\alpha,\beta}\hat{z}. \tag{1.26a}$$

$$\vec{G}_{\alpha,\beta} = -J(\vec{A}_{\alpha,\beta} + \vec{A}_{\alpha+1,\beta} + \vec{A}_{\alpha,\beta+1} + \vec{A}_{\alpha+1,\beta+1}) - b\vec{B}_{\alpha,\beta}\hat{z}. \tag{1.26b}$$

O primeiro passo para encontrarmos uma aproximação contínua é introduzirmos um conjunto de variáveis discretas

$$\vartheta = \sqrt{2}\varepsilon(\alpha - \alpha_0), \tag{1.27a}$$

$$\xi = \sqrt{2}\varepsilon(\beta - \beta_0), \tag{1.27b}$$

no qual torna-se contínua no limite $\varepsilon \to 0$, e relaciona-se com a medida da distância ao longo da diagonal da rede quadrada. As distâncias reais são dadas por $a\vartheta/\varepsilon$ e $a\xi/\varepsilon$, onde a é o parâmetro de rede. Finalmente é conveniente escolher $\alpha_0 = (N+1)/2 = \beta_0$ nas equações(1.27), tomando a origem do centro de coordenadas no centro da rede.

A principal hipótese assegurada por cálculos numéricos, é que as variáveis de spin $\vec{A}_{\alpha,\beta}$ e $\vec{B}_{\alpha,\beta}$ aproximam-se suavemente para o limite contínuo, assim como $\vec{A}(\vartheta,\xi)$ e $\vec{B}(\vartheta,\xi)$ no limite que $\varepsilon \to 0$. Então fazendo as substituições $\vec{A}_{\alpha,\beta} \to \vec{A}$ e $\vec{B}_{\alpha,\beta} \to \vec{B}$ nas equações(1.25) e (1.26) juntamente com as expansões em série de Taylor

$$\vec{A}_{\alpha\pm1,\beta} \to \vec{A} \pm \delta\vec{A}_\vartheta + \frac{1}{2}\delta^2\vec{A}_{\vartheta\vartheta}, \tag{1.28a}$$

$$\vec{A}_{\alpha,\beta\pm1} \to \vec{A} \pm \delta\vec{A}_\xi + \frac{1}{2}\delta^2\vec{A}_{\xi\xi}, \tag{1.28b}$$

$$\vec{A}_{\alpha\pm1,\beta\pm1} \to \vec{A} \pm \delta(\vec{A}_\vartheta + \vec{A}_\xi) + \frac{1}{2}\delta^2(\vec{A}_{\vartheta\vartheta} + \vec{A}_{\xi\xi} + 2\vec{A}_{\vartheta\xi}), \tag{1.28c}$$

onde também temos expansões semelhantes para o campo $\vec{B}$. Aqui os sub-escritos denotam a diferenciação com relação aos argumentos indicados, e $\delta = \sqrt{2}\varepsilon$ é usado como uma notação abreviada temporária. As equações(1.25) são aproximadas por

$$\frac{\partial\vec{A}}{\partial t} = \vec{A} \times \vec{F}, \tag{1.29a}$$

$$\frac{\partial\vec{B}}{\partial t} = \vec{B} \times \vec{G}, \tag{1.29b}$$

onde

$$\vec{F} = -J[4\vec{B} - 2\delta(\vec{B}_\vartheta + \vec{B}_\xi) + \delta^2(\vec{B}_{\vartheta\vartheta} + \vec{B}_{\xi\xi} + \vec{B}_{\vartheta\xi})] + bA_3z, \tag{1.30a}$$

$$\vec{G} = -J[4\vec{A} - 2\delta(\vec{A}_\vartheta + \vec{A}_\xi) + \delta^2(\vec{A}_{\vartheta\vartheta} + \vec{A}_{\xi\xi} + \vec{A}_{\vartheta\xi})] - bB_3z. \tag{1.30b}$$

Este sistema de equações não é, até então, completamente consistente, porque aparece uma mistura de potências diferentes de δ(ou ε). Sendo assim, para obtermos um modelo contínuo consistente, procedemos como no caso unidimensional estudado na referência[18]. Primeiramente, introduzimos uma combinação linear dos campos

$$\vec{m} = \frac{1}{2S}(\vec{A} + \vec{B}), \tag{1.31a}$$

$$\vec{n} = \frac{1}{2S}(\vec{A} - \vec{B}), \tag{1.31b}$$

no qual satisfaz os vínculos

$$\vec{m} \cdot \vec{n} = 0, \tag{1.32a}$$

$$\vec{m}^2 + \vec{n}^2 = 1. \tag{1.32b}$$

O segundo passo é definirmos uma variável temporal admensional

$$\tau = \delta S J t = 2\sqrt{2}\varepsilon S J t. \tag{1.33}$$

Escrevendo $\vec{A}$ e $\vec{B}$ em termos de $\vec{m}$ e $\vec{n}$, podemos obter uma forma equivalente das Equações(1.29) como:

$$\begin{aligned}\delta\frac{\partial\vec{m}}{\partial\tau} &= -\delta[(\vec{m}\times\vec{n})_\vartheta + (\vec{m}\times\vec{n})_\xi] + \frac{1}{2}\delta^2[\vec{n}\times(\vec{n}_{\vartheta\vartheta} + \vec{n}_{\xi\xi} + \vec{n}_{\vartheta\xi}) \\ &-\vec{m}\times(\vec{m}_{\vartheta\vartheta} + \vec{m}_{\xi\xi} + \vec{m}_{\vartheta\xi})] + \frac{b}{4}\delta^2[m_3(\vec{m}\times z) + n_3(\vec{n}\times z)],\end{aligned} \tag{1.34a}$$

$$\begin{aligned}\delta\frac{\partial\vec{n}}{\partial\tau} &= 4(\vec{m}\times\vec{n}) + \delta[\vec{m}\times(\vec{m}_\vartheta + \vec{m}_\xi) - \vec{n}\times(\vec{n}_\vartheta + \vec{n}_\xi)] \\ &+\frac{1}{2}\delta^2[\vec{m}\times(\vec{n}_{\vartheta\vartheta} + \vec{n}_{\xi\xi} + \vec{n}_{\vartheta\xi}) - \vec{n}\times(\vec{m}_{\vartheta\vartheta} + \vec{m}_{\xi\xi} + \vec{m}_{\vartheta\xi})] \\ &-\frac{b}{4}\delta^2[m_3(\vec{n}\times z) + n_3(\vec{m}\times z)].\end{aligned} \tag{1.34b}$$

Se inspecionarmos as equações acima, notamos que a consistência pode ser obtida, se $\vec{m}$ é da ordem de δ. Então podemos aproximar a segunda equação acima por:

$$\delta\frac{\partial\vec{n}}{\partial\tau} = 4(\vec{m}\times\vec{n}) - \delta[\vec{n}\times(\vec{n}_\vartheta + \vec{n}_\xi)], \tag{1.35}$$

Os vínculos das Equações(1.32) sem os termos de ordem δ^2, simplificam-se para

$$\vec{m} \cdot \vec{n} = 0, \tag{1.36a}$$

$$\vec{n}^2 = 1. \tag{1.36b}$$

Conseqüentemente, fazendo o produto vetorial de ambos os lados da Equação(1.35) com $\vec{n}$, e usando os vínculos $\vec{m}\cdot\vec{n} = 0$ e $\vec{n}^2 = 1$. O vetor $\vec{m}$ pode ser escrito somente em termos de $\vec{n}$ como:

$$\vec{m} = \frac{\varepsilon}{2\sqrt{2}}[-(\vec{n}_\vartheta + \vec{n}_\xi) + (\vec{n}\times(\partial\vec{n}/\partial\tau))], \tag{1.37}$$

onde restauramos o parâmetro ε de $\delta = \sqrt{2}\varepsilon$. Finalmente a Equação(1.37) é inserida na Equação(1.34a), com a finalidade de obtermos a seguinte equação diferencial no limite $\varepsilon \to 0$:

$$\vec{n} \times \vec{f} = 0, \tag{1.38a}$$

$$\vec{f} = \frac{\partial^2 \vec{n}}{\partial \tau^2} - \nabla^2 \vec{n} + b n_3. \tag{1.38b}$$

Aqui desprezamos os termos de ordem ε^2 nas Equações(1.36), (1.38), e ordem ε^3 na Equação(1.37). Conseqüentemente a aproximação contínua é fornecida pela Equações(1.38), no qual é uma simples extensão do modelo sigma não-linear a menos da inclusão do campo externo b. Fizemos a velocidade das ondas de spin ($c = 1$) na dedução. Em nossas convenções, o módulo do spin é um múltiplo da constante de Planck ($S = \hbar/2$), e portanto fornece a dimensão da ação, SJ a dimensão da freqüência, e $S^2 J$ a dimensão da energia. E recapitulando que as distâncias atuais são fornecidas por $a\vartheta/\varepsilon$ e $a\xi/\varepsilon$, concluímos que a velocidade é medida em unidades de $c = 2\sqrt{2}aSJ$. Esta velocidade coincide com a velocidade de ondas de spin puras no antiferromagneto, sobre uma rede quadrada no limite de grandes comprimentos de onda. A fórmula mais geral da velocidade das ondas de spin é dada por:

$$c = 2aSJ\sqrt{\frac{d}{2}}, \tag{1.39}$$

onde d é o número de coordenadas da rede. Uma conclusão importante da aproximação contínua para o modelo antiferromagnético, é que o modelo antiferromagnético pode ser mapeado através do modelo sigma não-linear. Como vimos que a equação de movimento(1.38), é uma extensão do modelo sigma não-linear. Assim, podemos escrever a densidade do Hamiltoniano para o modelo antiferromagnético bidimensional na presença do campo staggered como

$$H = \frac{J}{2}\int [(\partial_0 \vec{n})^2 - (\partial_\alpha \vec{n})^2 + h n_3] d^2x \qquad \alpha = 1, 2, \tag{1.40}$$

onde $h = b/(4JS)$, $\partial_0 = (1/c^2)\partial/\partial t$ e $\partial_\alpha = \partial/\partial x + \partial/\partial y$. Portanto, mapearemos o modelo antiferromagnético através do modelo sigma não-linear, com a inclusão do campo magnético staggered. Seria interessante mencionar que o termo do campo magnético modificaria para (hn_3^2), no caso do campo magnético uniforme aplicado perpendicularmente ao plano.

Neste capítulo, fizemos uma breve descrição da importância de estudarmos materiais magnéticos de baixa dimensão, apresentamos alguns modelos Hamiltonianos, que descrevem o magnetismo destes tipos de materiais com algumas particularidades, e introduzimos o limite contínuo do modelo, que será estudado neste trabalho.

Capítulo 2

Transições de fase

2.1 Transição de Fase de Kosterlitz-Thouless

Uma transição de fase magnética é caracterizada por uma descontinuidade ou uma divergência nas propriedades macroscópicas do sistema, como resposta às variações contínuas em alguma condição externa, como a temperatura ou um campo magnético. Na classificação original proposta por Ehrenfest[20], as transições de fase podem ser classificadas como sendo de primeira ordem, segunda ordem, terceira ordem e assim por diante, dependendo da ordem da derivada termodinâmica que é descontínua. Uma outra classificação devido a Fisher[21], define que uma transição de fase é de primeira ordem, se a primeira derivada é descontínua. Entretanto, se a primeira derivada for contínua e a segunda derivada for descontínua ou infinita, a transição de fase é dita como sendo crítica. Numa transição de fase crítica, o ponto onde ocorre a transição é chamado de ponto crítico. A classe de universalidade de uma transição de fase, nos informa sobre o comportamento das funções termodinâmicas tais como: o calor específico, a magnetização e a susceptibilidade do sistema, para temperaturas muito próximas à temperatura crítica. Por outro lado, informações sobre as propriedades dinâmicas do sistema, estão contidas no fator de estrutura dinâmico ou função de correlação dinâmica entre dois sítios do sistema. A comparação entre os cálculos teóricos e os experimentais, mostram que a descrição correta da dinâmica do sistema, está contida nas equações de movimento do Hamiltoniano.

Como foi mencionado anteriormente sistemas de baixa dimensões com sime-

trias planares, não possuem ordem de longo alcance, portanto não apresentam uma transição de fase usual, tipo magnetizado e desmagnetizado. Entretanto, existe um tipo de transição de fase denominada transição de Kosterlitz-Thouless(KT)[4] em homenagem aos descobridores, no qual acredita-se que seja uma transição de fase topológica, ou seja, uma transição causada por desligamentos de pares de vórtices. O modelo mais simples com simetria rotacional contínua, para descrever este tipo de transição, é o modelo do rotor planar. Para falarmos a respeito da transição KT, vamos considerar este modelo, que consiste de spins clássicos, que obedecem ao vínculo $S^2 = S_x^2 + S_y^2 = constante$. Parametrizando o vetor de spin $\vec{S}_n = S(\cos\phi_n, \sin\phi_n)$, o Hamiltoniano do modelo do rotor planar pode ser escrito sobre a forma

$$H = -J \sum_{<nm>} \cos(\phi_n - \phi_m) = -\frac{1}{2} J \sum_{<nm>} [e^{i(\phi_n - \phi_m)} + e^{-i(\phi_n - \phi_m)}], \tag{2.1}$$

onde ϕ_n representa o ângulo polar do n-ésimo spin em relação a um eixo particular no plano. Neste caso a função correlação entre os spins é dado por

$$\langle e^{i\phi_0} e^{i\phi_n} \rangle = \int \prod_m d\phi_m e^{i(\phi_0 - \phi_n)} \exp\left[\frac{J}{K_B T} \sum_{<mn>} \cos(\phi_n - \phi_m)\right] / Z, \tag{2.2}$$

onde Z é a função de partição, e K_B é a constante de Boltzmann. A função correlação pode ser estimada através da técnica de expansão de altas temperaturas, onde somente o primeiro termo da expansão contribui para integração. Note que

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} d\phi_m &= 2\pi, \\ \int_0^{2\pi} d\phi_m e^{i\phi_m} &= 0. \end{aligned} \tag{2.3}$$

Integrando a equação (2.2) em todos os ângulos ϕ, tendo em vista as relações (2.3), devemos associar para cada fator $e^{i\phi}$ um outro fator $e^{-i\phi}$, afim de obtermos uma contribuição não nula. Assim teremos:

$$e^{i\phi_0}(e^{-i\phi_0} e^{i\phi_a}) e^{-i\phi_a} \cdots e^{i\phi_k}(e^{-i\phi_k} e^{i\phi_n}) e^{-i\phi_n}.$$

Aqui, $(0, a, ..., k, n)$, são os sítios $(0, a, ..., k, n)$, respectivamente. Os termos de todos os pares dos parênteses referem-se a um fator $\cos(\phi_i - \phi_j)$, associados com a ligação entre os sítios i e j. Isto mostra existência de termos não nulos, através de um

caminho de ligações entre os sítios 0 e n. Tais termos fornecem uma contribuição da ordem $(J/K_BT)^{|N|}$ para expansão, onde N é o número de ligações ao longo do caminho entre os sítios 0 e n. O termo dominante é encontrado pela escolha do caminho mais curto, assim sendo N é aproximadamente r/a, onde a é o parâmetro de rede. Então temos:

$$\langle e^{i\phi_0} e^{i\phi_n} \rangle \approx (J/K_BT)^{|N|} = \exp[-|N| \ln(K_BT/J)]. \tag{2.4}$$

Portanto a função correlação no regime de altas temperaturas, decresce exponencialmente com a distância entre os spins, onde o comprimento de correlação entre os spins é $\xi = a/\ln(K_BT/J)$.

Para baixas temperaturas não temos flutuações térmicas significantes, neste caso as flutuações dominantes são regidas por grandes comprimentos de onda. Assim esperamos variações muito pequenas nos spins, isto é, o ϕ_n varia lentamente. Desta forma, somente configurações com ângulos dos spins adjacentes aproximadamente iguais darão uma contribuição significante para a função de partição. Conseqüentemente, podemos expandir a função co-seno em série, conservando apenas termos até segunda ordem. Desta forma, o Hamiltoniano (2.1) tem sua forma aproximada por

$$H = \frac{J}{2} \sum_n \sum_\mu [\partial_\mu \phi_n]^2. \tag{2.5}$$

Aqui, $\partial_\mu \phi_n = \phi_n - \phi_{n+\mu}$, onde $\phi_{n+\mu}$ é o vizinho mais próximo de ϕ_n. Como estamos tratando o sistema como sendo bidimensional, μ pode assumir apenas dois valores relacionados com as coordenadas. Para pequenos ângulos é conveniente tomarmos o limite contínuo ($n \to \vec{r}; \phi_n \to \phi(\vec{r})$), e a soma (2.5) é substituída por uma integral. Assim, obtemos a forma contínua para o Hamiltoniano

$$H = \frac{J}{2} \int [\vec{\nabla} \phi(\vec{r})]^2 d\vec{r}. \tag{2.6}$$

Vamos minimizar (2.6) em relação a $\phi(\vec{r})$, desta forma obtemos a seguinte equação de movimento

$$\vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\partial H}{\partial(\vec{\nabla}\phi)} - \frac{\partial H}{\partial \phi} \right] = 0 \Rightarrow \nabla^2 \phi = 0. \tag{2.7}$$

Duas soluções particulares para a equação de Laplace, que obedece ao vínculo $S^2 = S_x^2 + S_y^2 = constante$, são dadas por

$$\phi_v = \pm q \arctan\left(\frac{y - y_0}{x - x_0} \right). \tag{2.8}$$

A solução com sinal $(+)$ caracteriza a solução de vórtice, e a solução com sinal $(-)$ corresponde a um anti-vórtice. O ponto $\vec{r}_0 = (x_0, y_0)$ representa a localização do centro do vórtice (ou anti-vórtice). Estas estruturas podem ser visualizadas nas Figuras(2.1) e (2.2), respectivamente. De acordo com a teoria das equações diferen-

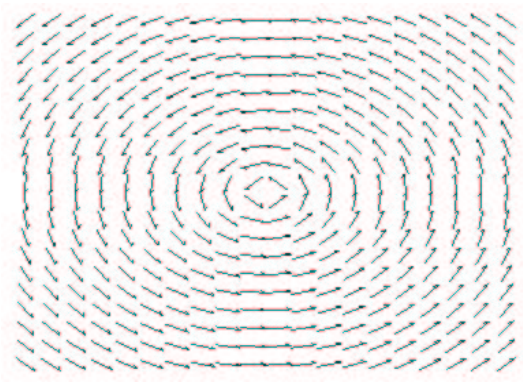

Figura 2.1: Configuração dos spins representando um vórtice.

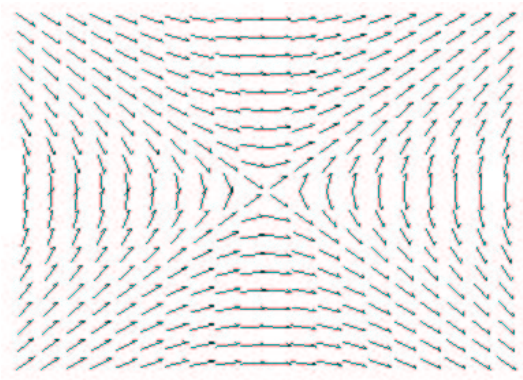

Figura 2.2: Configuração dos spins representando um anti-vórtice.

ciais quando temos duas soluções linearmente independentes, uma combinação linear destas soluções, Equação(2.8), também é uma solução para a equação de Laplace. Esta combinação linear representa a solução do par de vórtice e anti-vórtice, onde a estrutura do par pode ser visualizada na Figura(2.3).

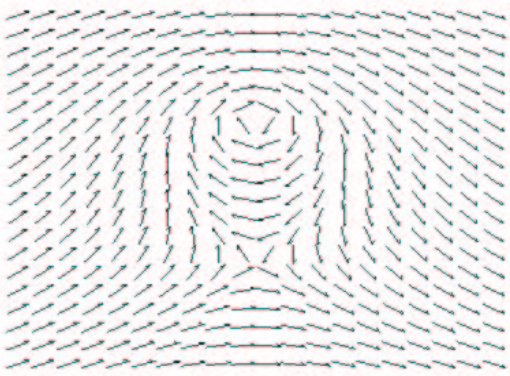

Figura 2.3: Configuração dos spins representando um par de vórtice e anti-vórtice.

Kosterlitz e o Thouless definiram a carga topológica de um vórtice, que é chamada de vorticidade q, como sendo

$$\oint \vec{\nabla}\phi_v \cdot d\vec{l} = 2\pi q, \qquad (q = 0, \pm 1, \pm 2, ...). \tag{2.9}$$

Inserindo (2.8) em (2.6) e integrando, obtemos a energia da excitação do vórtice como sendo

$$E_v = q^2 \pi J \ln\left(\frac{R}{a}\right), \tag{2.10}$$

onde a é o parâmetro de rede, e R é a dimensão do sistema. Além disso, o fato da energia divergir quando $a \to 0$, nos lembra que o vórtice é uma solução singular para versão contínua do modelo.

Através da aproximação (2.5) a função correlação no regime de baixas temperaturas pode ser calculada como

$$\langle e^{i\phi_0} e^{i\phi_n} \rangle = \int \prod_m d\phi_m e^{i(\phi_0 - \phi_n)} \exp\left[\frac{J}{2K_B T} \sum (\vec{\nabla}\phi)^2\right] / Z. \tag{2.11}$$

A integral em (2.11) tem a forma de uma integral Gaussiana para cada ϕ. A função de Green $G(\vec{r})$ para rede quadrada, que corresponde ao Hamiltoniano Gaussiano $\sum(\vec{\nabla}\phi)^2$ é dada por:

$$G(\vec{r}) = a^2 \int\int \frac{dk_x}{2\pi}\frac{dk_y}{2\pi} \frac{e^{-ik\cdot\vec{r}} - 1}{4 - 2\cos(k_x a) - 2\cos(k_y a)}. \tag{2.12}$$

Resolvendo a integral Gaussiana obtemos:

$$\langle e^{i\phi_0} e^{i\phi_n} \rangle \approx \exp\left[\frac{K_B T}{J} G(\vec{r})\right], \tag{2.13}$$

onde o $G(r)$ é a função de Green para a rede quadrada. No limite contínuo a função de Green satisfaz

$$-\nabla^2 G(\vec{r}) = \delta(\vec{r}), \tag{2.14}$$

na qual é a equação de Poisson em duas dimensões. Para resolver esta equação fazemos uma analogia a um problema da eletrostática, considerando um potencial devido a uma linha infinita de carga. O potencial satisfaz a equação $-\nabla^2 G(\vec{r}) = \lambda\delta(\vec{r})$, onde λ é a carga por unidade de comprimento. Usando o teorema de Gauss encontramos o seguinte campo elétrico $E(r) = \lambda/2\pi r$. A integral do campo elétrico em relação a r, nos fornece o potencial $V(r) = -(\lambda/2\pi)\ln(r)$. Analogamente obtemos a função de Green para rede quadrada como

$$G(r) \approx -\frac{1}{2\pi}\ln|r/a|. \tag{2.15}$$

Usando esta expressão em (2.13), obtemos a função de correlação no regime de baixas temperaturas como

$$\langle \exp[i(\phi_0 - \phi_n)]\rangle \approx \left(\frac{a}{|r|}\right)^{\frac{K_B T}{2\pi J}}. \tag{2.16}$$

No limite em que $|r| \to \infty$, o valor esperado do produto de dois spins aproxima do produto das médias. Então temos para a magnetização espontânea

$$\langle M\rangle = \lim_{|r|\to\infty}\langle e^{i(\phi_0-\phi_n)}\rangle = \langle e^{i\phi_0}\rangle\langle e^{-i\phi_n}\rangle \to 0. \tag{2.17}$$

Assim, o resultado (2.17) implica que o modelos do tipo xy, não apresentam magnetização espontânea, para qualquer temperatura diferente de zero em comum acordo com o teorema de Mermin-Wagner.

Os argumentos acima mostram que o modelo do rotor planar tem duas fases distintas; uma fase a baixa temperatura e outra a altas temperaturas, nas quais são diferentes uma da outra. Portanto, este sistema exibe uma transição de fase, mesmo não tendo uma ordem de longo alcance. Poderíamos pensar que como a energia dos vórtices divergem quando $R \to \infty$, os vórtices deveriam ser irrelevantes para termodinâmica do modelo. Contudo, para certificarmos a sua importância, consideraremos a energia livre de um vórtice.

$$F = E - TS, \tag{2.18}$$

onde S é a entropia de um vórtice livre. A entropia é o logaritmo da multiplicidade da configuração. A multiplicidade é o número de sítios da rede, uma vez que o vórtice é completamente caracterizado pela localização da sua origem. Portanto a entropia é dada por

$$S = K_B \ln \left(\frac{R}{a}\right)^2. \tag{2.19}$$

Para baixas temperaturas, em (2.18) o termo da energia do vórtice domina a energia livre em relação ao termo de entropia. Assim, a probabilidade de aparecer um vórtice livre é muito pequena em um sistema muito grande. Em altas temperaturas, o termo da entropia domina a energia livre diante do termo da energia do vórtice, portanto a probabilidade de aparecer um vórtice livre no sistema é muito maior. A temperatura crítica estimada para transição de fase é obtida na mudança do sinal da energia livre

$$T_{kT} = \frac{\pi J}{2K_B}. \tag{2.20}$$

A temperatura da transição de fase para o modelo do rotor planar calculada por métodos de Monte Carlo é $0.89J$[22].

O carácter topológico da transição produz uma divergência exponencial do comprimento de correlação, e na susceptibilidade no plano. O comportamento da susceptibilidade e do comprimento de correlação para $T > T_{KT}$ é dado por

$$\xi(T) \propto \exp\left[\frac{\pi}{2}\left(\frac{T - T_{KT}}{T_{KT}}\right)^{-1/2}\right], \quad \chi(T) \propto \xi^{7/4}. \tag{2.21}$$

Para $T < T_{KT}$, ξ e χ divergem indicando que o sistema possui infinitos pontos críticos. Nenhuma singularidade ocorre para o calor específico. Entretanto, resultados de Monte Carlo mostram um pico finito no calor específico em uma temperatura aproximadamente 10% acima de T_{KT}[22].

Resumindo o quadro da transição KT, associamos a esta transição o desligamento de pares de vórtices. Para baixas temperaturas a termodinâmica é controlada por ondas de spin, e uma baixa densidade de pares de vórtice-antivórtice. Esta densidade é aproximadamente dada por $\exp(-E_0/K_BT)$, onde $E_0 = \pi^2 J$ é a energia de criação do par distanciada num único parâmetro de rede. A medida em que a temperatura aumenta, estes pares tendem a aumentar seu tamanho. Os pares de excitações interagem através de um potencial, que depende do logaritmo da distância

entre os centros do vórtice e do anti-vórtice. A energia devido a interação é

$$E_{vv} = \pi^2 J q^2 + 2\pi q^2 J \ln\left(\frac{d}{a}\right), \tag{2.22}$$

onde d é a distância entre o vórtice e o antivórtice. Acima da temperatura crítica os vórtices que constituem o par desligam-se, de tal forma que somente vórtices livres aparecem no sistema. Tais vórtices desordenam significativamente o sistema caracterizando assim a transição de fase.

2.2 Transição de Fase Quântica

O antiferromagnetismo quântico bidimensional tem sido vastamente evidenciado nos últimos anos, devido ao intenso interesse no entendimento das propriedades das camadas CuO_2 nos supercondutores em altas temperaturas. Experimentalmente a motivação é ilimitada para estes materiais cupratos. Inúmeros outros materiais são certamente muito bem descritos em baixas temperaturas pelo Hamiltoniano de Heisenberg.

O conjunto de trabalhos existentes para o antiferromagnetismo bidimensional pode ser divididos em duas classes. Primeiro, os estudos das propriedades em baixas temperaturas dos antiferromagnetos mostram como a ordem Néel de longo alcance, é bem estabilizada no seu estado fundamental[23, 24, 25, 26]. Resultados definitivos foram obtido por Chakravarty *et al.*[27, 28]. Eles mostraram que para grandes comprimentos de onda(baixas energias), as propriedades foram bem descritas pelo Hamiltoniano de Heisenberg bidimensional clássico. Todos os efeitos das flutuações quânticas podem ser absorvidos nas renormalizações das constantes de acoplamento. Segundo, são vários trabalhos sobre estados fundamentais quânticos desordenados[29, 30, 31, 32, 33]. Estes são estados na qual as flutuações quânticas removem todos os vestígios da ordem de Néel, conseqüentemente antiferromagnetos próximo a criticalidade não apresentam nenhuma ordem. A ordem de Néel, se existe, é muito menor que o ordenamento do antiferromagneto clássico. Se o ordenamento não está presente, o estado fundamental quântico desordenado tem um gap de energia com respeito a excitações, que é muito menor em todas as escalas de energias microscópicas no problema. Os antiferromagnetos próximo à criticalidade foram considerados sucintamente por Chakravarty *et al*[27]; eles iden-

tificaram três regimes diferentes de comportamento. Em baixas temperaturas as flutuações do sistema tem um comportamento com caracteristícas semelhantes ao estado fundamental do ordenamento Néel (esta é a região clássica renormalizada), ou um estado fundamental quântico desordenado(região quântica desordenada). Para grandes temperaturas as flutuações quânticas críticas, podem ser extiguidas por efeitos térmicos passando para região acima de um dos crossovers do seus estados fundamentais(região crítica quântica). O diagrama de fase para o antiferromagneto é representado na Figura(2.4).

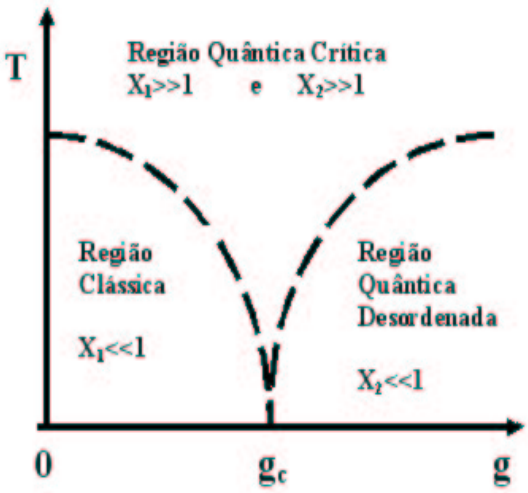

Figura 2.4: O diagrama de fase do Hamiltoniano de Heisenberg como uma função da temperatura e do acoplamento g. O acoplamento g mede a força das flutuações quânticas. Este é inversamente proporcional ao valor do spin S, e também depende da razão de J. Os parâmetros $X_1 = NK_BT/(2\pi\rho_s)$ e $X_2 = K_BT/\Delta$ controlam as propriedades de escala do antiferromagneto. Aqui ρ_s é o spin *stiffness* referente ao estado fundamental da ordem de Néel, e Δ é o gap do estado quântico desordenado.

Acima do estado fundamental três intercessões ocorrem em grande escala de comprimento próximo ao antiferromagnetismo crítico, sugerindo que suas propriedades sejam universais. Para grandes comprimentos de onda, baixas energias, a susceptibilidade staggered são completamente caracterizadas por funções de escala

universais.

Para analisarmos o diagrama, considere o antiferromagneto descrito pelo seguinte Hamiltoniano

$$H = \sum_{i<j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \tag{2.23}$$

onde i, j estendem-se sobre todos os sítios numa rede bidimensional, $\vec{S}_i$ representa o vetor de spin do sítio i, e J_{ij} são as constantes de acoplamento e diminuem seus valores rapidamente a medida que a distância de separação i e j aumenta. O J_{ij} tem invariância translacional. A escala de energia J será usada para denotar o maior J_{ij}. Os J_{ij} são predominantemente antiferromagnetos. Estamos interessados primeiramente em antiferromagnetos, na qual sofrem à temperatura zero, uma transição de fase quântica da fase ordenada Néel para um estado quântico desordenado, quando as proporções de J_{ij} são variadas, e as forças das flutuações quânticas aumentam. Vamos representar estas forças por uma constante de acoplamento g; o sistema assume uma ordem de Néel para g muito menor que um acoplamento crítico g_c, e uma fase quântica desordenada para $g > g_c$. Assumiremos que o estado fundamental crítico $g = g_c$ é descrito por uma teoria de campo contínua. Para definirmos o parâmetro de ordem, assumimos que os spins se orientam nas direções $\pm z$, e definimos um campo quântico contínuo $\vec{n}(\vec{r})$, na qual será usado como variável de parâmetro de ordem, representando o vetor de Néel sobre cada sítio. A magnetização staggered N_0 será então

$$N_0 = \langle n_z(\vec{r}) \rangle_{T=0}. \tag{2.24}$$

Aproximando do ponto crítico em $T = 0$, esta magnetização desaparecerá com[27]

$$N_0 \sim (g_c - g)^{\beta}, \tag{2.25}$$

onde β é um expoente universal. Para $g > g_c$ temos $N_0 = 0$. Além disso $\langle n_z(\vec{r}) \rangle = 0$ em todas temperaturas finitas, porque não é possível quebrar a simetria contínua em um sistema bidimensional. No ponto crítico, $g = g_c$, as correlações decairão com uma lei de potência[34]

$$\langle \vec{n}(\vec{r}) \cdot \vec{n}(0) \rangle \sim \frac{1}{r^{D-2+\eta}}, \tag{2.26}$$

onde $D = 3$ é a dimensão do espaço-tempo. Uma outra variável importante é a magnetização $\vec{M}(\vec{r})$

$$\vec{M}(\vec{r_i}) = \frac{g_0 \mu_B}{a^2} \vec{S}_i, \tag{2.27}$$

onde a^2 é o volume por spin, e $g_0\mu_B$ é a razão giromagnética de cada spin. Embora o ordenamento não tenha magnetização na rede, flutuações decaem lentamente devido as leis de conservação sobre a magnetização total. O próprio Hamiltoniano H está associado com a conservação da energia total.

As propriedades do parâmetro de ordem e as flutuações da magnetização, podem ser determinadas pelas duas funções respostas retardadas:

$$\chi_s(k,\omega)\delta_{\ell,m} = -\frac{i}{\hbar}\int d^2r \int_0^\infty dt\langle[n_\ell(\vec{r},t), n_m(0,0)]\rangle e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}, \tag{2.28a}$$

$$\chi_u(k,\omega)\delta_{\ell,m} = -\frac{i}{\hbar}\int d^2r \int_0^\infty dt\langle[M_\ell(\vec{r},t), M_m(0,0)]\rangle e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}, \tag{2.28b}$$

onde todos os campos adquirem o aspecto do quadro de Heisenberg devido a dependência temporal, os índices ℓ, m estendem-se sobre todas as três direções, e a média é com relação ensemble de Gibbs para uma temperatura T. Estas funções de correlação são as susceptibilidades staggered e uniforme, respectivamente.

Apresentaremos agora as formas de escala satisfeitas por χ_s, χ_u e C_v nas vizinhanças de uma transição de fase quântica em $g = g_c$. Quando a temperatura for diferente de zero deve satisfazer

$$K_B T << J. \tag{2.29}$$

Uma temperatura diferente de zero implica na ausência de um spin condensado, e as funções respostas são conseqüentemente invariantes rotacionalmente. Descreveremos separadamente as propriedades de escala com e sem a ordem Néel no seu estado fundamental.

2.2.1 Estado Fundamental de Néel ordenado para o Antiferromagneto

As propriedades de escala dependem de uma variável, na qual mede a distância do estado fundamental à criticalidade. Esta váriavel é o spin *stiffness* ρ_s[35]. Este valor pode ser determinado através de experimentos e análises numéricas de modelos Hamiltonianos. Em duas dimensões, ρ_s tem dimensão de energia, e sua condição perto e também longe da criticalidade é

$$\rho_s << J. \tag{2.30}$$

Quando g aproxima de g_c, ρ_s obedece a escala Josephson[36]

$$\rho_s \sim (g_c - g)^{(D-2)\nu}, \tag{2.31}$$

onde ν é o expoente do comprimento de correlação. Para $g \leqslant g_c$, e sobre as condições acima referentes a temperatura e ρ, os valores χ_s, χ_u e C_v satisfazem as seguintes formas de escala:

$$\chi_s(k,\omega) = \frac{N_0^2}{\rho_s}\left(\frac{\hbar c}{K_B T}\right)^2\left(\frac{N K_B T}{2\pi\rho_s}\right)^\eta \Phi_{1s}\left(\frac{\hbar c k}{K_B T}, \frac{\hbar\omega}{K_B T}, \frac{N K_B T}{2\pi\rho_s}\right), \tag{2.32a}$$

$$\chi_u(k,\omega) = \left(\frac{g_0\mu_B}{\hbar c}\right)^2 K_B T \Phi_{1u}\left(\frac{\hbar c k}{K_B T}, \frac{\hbar\omega}{K_B T}, \frac{N K_B T}{2\pi\rho_s}\right), \tag{2.32b}$$

$$C_V = \frac{3\zeta(3)}{\pi} K_B \left(\frac{K_B T}{\hbar c}\right)^2 \Psi_1\left(\frac{N K_B T}{2\pi\rho_s}\right), \tag{2.32c}$$

onde N é o número de componentes do parâmetro de ordem, ζ é a funccão zeta de Reimann, Φ_{1s}, Φ_{1u} e Ψ_1 são funções admensionais universais(Φ_{1s} e Φ_{1u} são complexas, enquanto que Ψ_1 é real), definidas de maneira que permaneçam finitas com $T/\rho_s \to \infty$. O coeficiente de Ψ_1 em (2.32c) é o calor específico com único grau de liberdade referente a um Bose sem gap, que em duas dimensões têm dispersão $\omega = kc$. O número $\Psi_1(T \to 0)$ é então uma medida efetiva de tais modos no estado fundamental. Este número é dado por $\Psi_1(0)$ para fase de Néel ordenada, e por $\Psi_1(\infty)$ para o estado quântico crítico em $g = g_c$.

Note que todas as formas de escala continuam a serem válidas em $g = g_c$; o pré-fator de Φ_{1s} permanece não singular em $g = g_c$ devido aos resultados (2.25), (2.31), e a identidade do expoente[34]

$$2\beta = (D - 2 + \eta)\nu. \tag{2.33}$$

Os argumentos das funções de escala aparecem freqüentemente neste texto, conseqüentemente introduziremos as variáveis admensionais

$$\bar{k} = \frac{\hbar c k}{K_B T}, \bar{\omega} = \frac{\hbar\omega}{K_B T}, \tag{2.34}$$

onde representam medidas do momento, e da frequência em unidades de escala da temperatura absoluta. O terceiro argumento é

$$x_1 = \frac{N K_B T}{2\pi\rho_s}, \tag{2.35}$$

que determina se o antiferromagneto, é melhor descrito nas maiores distâncias com um estado crítico quântico, ou um modelo renormalizado clássico (região clássica). O fator N na definição de x_1 é para facilitar o limite de N grande onde $\rho_s \sim N$. Para x_1 grande, a escala de energia $K_B T$ é a energia mais alta, na qual a linha que corta representa as flutuações críticas do spin, e o sistema nunca percebe, que g é de fato diferente de g_c, e que o estado fundamental é ordenado: as flutuações dos spins são quânticas críticas em escalas curtíssimas, e são eventualmente extiguidas em um caminho universal pela temperatura. Para x_1 pequeno, o antiferromagneto é caracterizado pela região clássica. Nesta região o antiferromagneto apresenta uma longa ordem de Néel com escala indeterminada, eventualmente fortes flutuações térmicas destroem a ordem de Néel.

Iniciaremos uma discussão qualitativa da natureza das correlações entre os spins na região clássica. As flutuações de spin agora caem em três diferentes regimes para o espaço dos vetores de onda e freqüências. Para k e ω muito grande as flutuações dos spins são essencialmente idênticas as da região quântica crítica. Para longas distâncias nas escalas de comprimento e tempo ξ_J, uma primeira intercessão acontece para o regime de Goldstone, onde a dinâmica dos spins é muito bem descrita, pela média rotacional das ondas de spin sobre o estado fundamental ordenado de Néel. A escala ξ_J, que controla a intercessão Goldstone crítica, é o comprimento de correlação Josephson[36], e determina a vizinhança do estado fundamental do antiferromagneto para a transição de fase quântica. Próximo a g_c, ξ_J diverge com

$$\xi_J \sim (g_c - g)^{-\nu}. \tag{2.36}$$

A segunda intercessão, que ocorre na região clássica, para o comprimento de correlação, é devida a fortes flutuações térmicas bidimensionais, que ocorrem para destruir a ordem de longo alcance de Néel. O antiferromagneto novamente aparece desordenado, e a função de correlação decai exponencialmente

$$\xi \sim \xi_J \exp\left(\frac{N}{(N-2)x_1}\right). \tag{2.37}$$

Para x_1 pequeno, ξ é claramente muito maior que ξ_J, e conseqüentemente os três regimes são bem separados.

2.2.2 Estado Fundamental Quântico Desordenado para o Antiferromagneto

Agora vamos considerar o caso $g \geqslant g_c$. Assumiremos que o estado quântico desordenado tem um gap para todas excitações. Favorecendo, em $T = 0$, esta excitação deve ter um tempo infinito de vida, para vetores de onda suficientemente pequenos. A distância da criticalidade é especificada pelo gap Δ. O parâmetro de ordem decairá exponencialmente, em uma escala ξ na qual é inversamente proporcional ao gap. Conseqüentemente Δ desaparecerá com

$$\Delta \sim (g - g_c)^{\nu} \tag{2.38}$$

próximo a criticalidade. Longe da criticalidade $\Delta \ll J$. Necessitamos de um observável, que representa flutuações do parâmetro de ordem. No lodo ordenado isto foi feito através do N_0. Uma escolha conveniente para o lado desordenado é o uso de uma amplitude local sobre o sítio, ou susceptibilidade dinâmica χ_L. Esta susceptibilidade é definida por

$$\chi_L(\omega)\delta_{\ell,m} = -\frac{i}{\hbar}\int d^2r \int_0^{\infty} dt\langle[S_{i\ell}(t), S_{im}(0)]\rangle \approx \delta_{\ell m}\int \frac{d^2k}{4\pi^2}\chi_s(k,\omega) \tag{2.39}$$

Em princípio χ_u também contribui para χ_L, mas quando $\Delta \ll J$ é satisfeito esta contribuição é sub-dominante em relação a χ_s, e conseqüentemente pode ser desprezada. Para $g > g_c$ podemos mostrar que para $T = 0$, χ_L tem a seguinte parte imaginária, para ω pequeno o bastante nas proximidades do gap Δ:

$$Im\chi_L(\omega)\mid_{T=0} = \frac{A}{4} sgn(\omega)\theta(\hbar \mid \omega \mid -\Delta), \tag{2.40}$$

onde θ é uma função de passo unitário, e $A/4$ é uma amplitude com dimensão inversa da energia. Quando g aproxima de g_c

$$A \sim (g - g_c)^{\eta\nu}. \tag{2.41}$$

As formas de escala para $g \geqslant g_c$ são

$$\chi_s(k,\omega) = A\left(\frac{\hbar c}{K_B T}\right)^2 \left(\frac{K_B T}{\Delta}\right)^{\eta} \Phi_{2s}\left(\frac{\hbar c k}{K_B T}, \frac{\hbar\omega}{K_B T}, \frac{K_B T}{\Delta}\right), \tag{2.42a}$$

$$\chi_u(k,\omega) = \left(\frac{g_0\mu_B}{\hbar c}\right)^2 K_B T \Phi_{2u}\left(\frac{\hbar c k}{K_B T}, \frac{\hbar\omega}{K_B T}, \frac{N K_B T}{\Delta}\right), \tag{2.42b}$$

$$C_V = \frac{3\zeta(3)}{\pi} K_B \left(\frac{K_B T}{\hbar c}\right)^2 \Psi_2 \left(\frac{N K_B T}{\Delta}\right), \tag{2.42c}$$

onde Φ_{2s}, Φ_{2u} e Ψ_2 são funções completamente universais, nas quais são finitas no limite $T/\Delta \to \infty$. As funções respostas são determinadas completamente pelos três parâmetros termodinâmicos: Δ, c, e A. Todas as formas de escala continuam sendo válidas para $g = g_c$; o pré-fator de Φ_{2s} em (2.42a) permanece não singular em $g = g_c$ devido aos resultados (2.38) e (2.41). Por conveniência introduzimos a variável

$$x_2 = \frac{K_B T}{\Delta}, \tag{2.43}$$

onde determina em qual região o antiferromagneto está, isto é, se é na região quântica crítica, ou na região quântica desordenada. Para x_2 pequeno, o sistema apresenta-se na região quântica desordenada, onde o estado fundamental representado pelo gap, desaparece as flutuações dos spins. Para x_2 grande, a temperatura T predomina o pequeno gap, assim o sistema encontra-se na região quântica crítica.

Para $T = 0 (x_2 = 0)$, o estado fundamental do antiferromagneto tem um gap, o que não acontece nas demais regiões, conseqüentemente para T finito, é quase sempre uma perturbação fraca sobre os resultados em $T = 0$. Todas correções para temperaturas finitas são acompanhadas por fatores de $\exp[-\Delta/(K_B)] = \exp(-1/x_2) \ll 1$. Além disso, o estado fundamental é muito bem descrito pela teoria $N = \infty$.

2.2.3 Região Quântica Crítica para o Antiferromagneto ($x_1 \ll 1$ ou $x_2 \gg 1$)

Em escalas de comprimento e tempo curtas, as flutuações de spins próximo a criticalidade deverão ser indistinguíveis. A propriedade especial da região quântica crítica, é que os desvios na criticalidade em escalas de comprimentos e tempos grandes, aparece na presença de uma temperatura finita. O fato é que o estado fundamental deste sistema não é exatamente no ponto crítico, e o sistema não apresenta comportamento característico, de modo idêntico, ao estado fundamental em alguma escala de comprimento e energia. As flutuações críticas dos spins são extiguidas por efeitos de relaxação térmicos. Consequentemente, é evidente dois tipos distintos de flutuações de spin no espaço dos vetores de onda e freqüência. Com $\hbar ck$ ou $\hbar\omega$ significantemente maior que $K_B T$, a dinâmica dos spins é regida por uma

teoria de campo em $(2+1)$ dimensões no ponto crítico. Por outro lado, o amortecimento das ondas de spin termicamente excitadas, produz um regime quântico de relaxação.

A intercessão do comportamento quântico de relaxação $(2+1)$ é claramente evidente na susceptibilidade staggered. Na região crítica dimensional $(2+1)$, para $k \gg 1$ ou $\omega \gg 1$ temos:

$$\Phi_{1s}(k, \omega, \infty) = \frac{A_Q}{(k^2 - \omega^2)^{1-\eta/2}}, \tag{2.44}$$

onde A_Q é um número universal, e o expoente $\eta = 8/(3\pi^2 N)$ em ordem de $1/N$[34]. Para $N = 3$ nesta mesma referência, simulações de Monte Carlo fornecem um valor para η próximo de $\eta \approx 0.028$; o valor é extremamente pequeno, entretanto de grande avalia para experimentos. Note que neste regime $Im(\Phi_{1s})$ é diferente de zero somente para $\omega > k$, onde temos um vasto espectro de ondas de spin. O valor pequeno de η implica num amortecimento pequeno das vibrações, e o espectro é quase uma função δ. No regime de relaxação quântico ($k \ll 1$ e $\omega \ll 1$), acontece um forte amortecimento das vibrações, e conseqüentemente as ondas de spin e excitações não são bem definidas. No ponto crítico as relações, que caracterizam o ponto crítico são: $\Phi_{2s}(\bar{k}.\bar{\omega}, x_1 = \infty) = Z_Q \Phi_{1s}(\bar{k}.\bar{\omega}, x_2 = \infty)$; $\Phi_{2u}(\bar{k}.\bar{\omega}, x_1 = \infty) = Z_Q \Phi_{1u}(\bar{k}.\bar{\omega}, x_2 = \infty)$ e $\Psi_2(\infty) = \Psi_1(\infty)$. Aqui, $Z_Q = 1 - 0,229191243/N$ é um número universal.

Resumindo a transição de fase quântica para o antiferromagneto, temos um acoplamento g, que mede as forças das flutuações quânticas. Existe um valor para o acoplamento crítico g_c, onde há uma distinção entre duas fases. Uma fase representa uma região clássica ($g < g_c$), e a outra representa uma região quântica desordenada ($g > g_c$). Na região clássica, a temperatura zero, as flutuações quânticas são pequenas, conseqüentemente os spins apresentam um certo ordenamento tipo Néel, sem a presença de um gap na energia. Já na região quântica desordenada as flutuações quânticas são grandes, mesmo a temperatura zero, portanto a fase não é ordenada, e apresenta um gap na energia. No próximo capítulo, calcularemos a energia do gap para o modelo antiferromagnético bidimensional na presença do campo magnético staggered.

Capítulo 3

Antiferro com campo staggered e a energia de ponto zero

3.1 Introdução

Neste capítulo estudaremos o comportamento da energia à temperatura zero, referente ao modelo antiferromagnético bidimensional na presença do campo staggered[1].

Alguns materiais magnéticos de baixa dimensionalidade sintetizados em laboratórios, tais como o Nd_2BaNiO_5 e o Pr_2BaNiO_5, apresentam a atuação de um campo magnético staggered efetivo interno. De acordo com Haldane[37] cadeias de spins semi-inteiro descritas por Hamiltonianos, que tem simetria rotacional e translacional não tem gap, ou tem o estado fundamental degenerado correspondendo a uma quebra de simetria translacional. Entretanto, redes constituídas de spins inteiros apresentam um gap de excitação do espectro.

Recentemente tem havido algum interesse experimental e teórico no estudo de antiferromagnetos na presença de um campo staggered [38, 39]. Um campo magnético uniforme induz o desdobramento das linhas espectrais de energia do material. Desta forma, a ordem antiferromagnética deve aparecer na fase com um gap, permanecendo estável com magnetização nula. Portanto o estudo dos efeitos de um campo magnético staggered parece ser interessante. As excitações magnéticas do espectro no antiferromagneto unidimensional na presença de um campo magnético staggered, foi estudado na literatura para spins 1/2 [40, 39] e spin 1 [38, 41]. Para $H_s = 0$ o $(1+1)$ modelo sigma não-linear, tem um estado fundamental desorde-

nado formado por flutuações quânticas. No caso dimensional $(2+1)$ estudado aqui, a simetria contínua pode ser quebrada em $T = 0$, e é restaurada pelas flutuações térmicas em um T finito. A ordem ou desordem do sistema no estado fundamental é determinada pelos parâmetros do Hamiltoniano. O modelo sigma não-linear bidimensional na ausência de campo staggered, foi estudado em detalhes nas referências[42, 34]. Nas referências[38, 41] o campo staggered foi considerado para o caso unidimensional.

3.2 O modelo

Neste trabalho estaremos interessados em estudar o comportamento do antiferromagneto bidimensional na presença de um campo magnético staggered. Como é bem conhecido, neste caso os resultados são independentes dos valores dos spins. Para este fim, iniciaremos com o seguinte Hamiltoniano

$$H = \sum_{i<j} [J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \vec{H}_s \cdot (-1)^i \vec{S}_i], \tag{3.1}$$

onde J_{ij} são constantes de acoplamento, o qual decai rapidamente com a separações entre i e j. A escala de energia J será usada para denotar o maior dos J_{ij}. O campo magnético staggered $\vec{H}_s$ inclui o magneton de Bohr e o fator giromagnético. Os J_{ij} são invariantes sobre simetria translacional na rede. Estaremos interessados primeiramente em antiferromagnetos, que a temperatura zero sofrem uma transição de fase quântica. Como vimos no capítulo anterior, a transição é detectada quando no mesmo sistema temos a presença de um estado de Néel ordenado e um estado quântico desordenado, devido ao aumento das forças das flutuações quânticas, uma vez que os J_{ij}'s variam. Vamos representar estas forças pela constante de acoplamento $g = N\hbar c/\rho_s$, onde $\rho_s \ll J$ é o spin *stiffness*. O sistema tem ordem de Néel para g menor que um valor de acoplamento crítico g_c, e quântico desordenado para $g > g_c$. Assumiremos também que o estado fundamental crítico em $g = g_c$ é descrito por uma teoria de campo contínuo de excitações, na qual se propagam ondas de spin com velocidade c.

3.3 Introdução do vínculo

Como vimos no capítulo 1, o antiferromagneto na sua versão contínua, pode ser mapeado através do modelo sigma não-linear, com o vínculo $n^2(\vec{x}) = 1$, onde $[\vec{x} = (x, y, \tau)]$. Este vínculo pode ser implementado no funcional através de um multiplicador de Lagrange $\lambda = \lambda(\vec{x})$. Assim, fazendo a transformação na lagrangeana $L \rightarrow \bar{\mathrm{L}} = L + \lambda(\vec{x})F(\vec{n})$, podemos escrever a função de partição como $Z = Tr[\exp(-\beta H)]$ do modelo no limite contínuo como a integral de caminho[43]:

$$Z = \int [D\vec{n}] \left[\frac{D\lambda}{2\pi}\right] \exp(-S_{efetivo}), \tag{3.2}$$

onde a ação efetiva $S_{efetivo}$ é dada por

$$S_{efetivo} = \frac{1}{2g} \int d^2\vec{r} \int_0^{\frac{1}{T}} d\tau [(\nabla_r n_l)^2 + (\partial_\tau n_l)^2 - 2gS\vec{H}_s \cdot \vec{n} - i\lambda(n_l^2 - 1)]. \tag{3.3}$$

O leitor deve notar que a introdução do vínculo não afeta as equações de movimento finais do campo. Isto ocorre porque $F(\vec{n})$ não depende das derivadas do campo $\vec{n}$. Introduzimos na integral de caminho a integração sobre o novo campo $\lambda(\vec{x})$, porque a integração em λ aparece incluindo o vínculo de uma maneira mais direta $\delta(n^2 - 1)$. Usaremos unidades tais que $K_B = \hbar = c = 1$ (onde c é a velocidade de onda de spin) e l varia de 1 até N. Para $N = 3$, $n(\vec{r}, \tau)$ é um vetor de três componentes representando a orientação antiferromagnética do parâmetro ordem na posição espacial $\vec{r}$ e no tempo imaginário τ. Sabemos que a ação efetiva, pode ser calculada para cada trajetória. A trajetória seguida será aquela para qual a ação efetiva é mínima, este é o famoso Princípio da ação mínima. Na realidade, a condição é de que a ação deve ser um extremo para trajetória correta, isto é, dada uma pequena modificação na trajetória clássica, a ação deve permanecer invariante em primeira ordem. Portanto, dado um certo δx, tem-se $\delta S = 0$ em $O(\delta x)$. É conveniente considerar o tempo imaginário, pois assim transformamos as fases oscilatórias da integral de caminho em exponenciais decrescentes, facilitando a identificação das trajetórias importantes no limite clássico. Entretanto, a maior vantagem em fazermos a rotação para tempos imaginários reside possibilidade de uma correspondência entre a teoria quântica e a mecânica estatística.

3.4 Expansão $1/N$

A necessidade de introduzirmos a expansão $1/N$, é porque a ação efetiva não é quadrática em λ. Assim, introduzimos a expansão no modelo, para podermos calcularmos a integral através do método de ponto de sela, que será abordado na seção (3.6). Introduzimos a expansão N^{-1}, através de um campo reescalado $\tilde{\mathrm{n}}_l = \sqrt{N} n_l$. Aqui, N é o número de componentes do espaço interno. Sabemos que $\sum_{l=1}^{N}(n_l)^2 = 1$, e do campo reescalado temos $\sum_{l=1}^{N}(\tilde{\mathrm{n}}_l)^2 = N$, assim $\langle (n_l)^2 \rangle = 1/N$ e $\langle (\tilde{\mathrm{n}}_l)^2 \rangle = 1$. Portanto, no limite que $N \to \infty$, o valor de $\langle (\tilde{\mathrm{n}}_l)^2 \rangle$ fica inalterado. Mesmo que o campo divirja, o quadrado do campo permanece finito. Tomaremos $N \to \infty$ pois, como veremos, N aparecerá multiplicando a parte em λ, não quadrática na integral de caminho, onde aplicaremos a expansão em N^{-1}. Assim, podemos escrever a função de partição como:

$$Z = \int\int \frac{D\tilde{\mathrm{n}}_l}{N^{N/2}} D\lambda \exp\left[\frac{-1}{2gN}\int d^2r[(\partial_\mu \tilde{\mathrm{n}}_l)^2 - 2ig\lambda(\tilde{\mathrm{n}}_l^2 - N) - 2gS\vec{H}\cdot\tilde{\mathrm{n}}_l]\right]. \quad (3.4)$$

Aqui fizemos a simplificação da notação $(\partial_\mu \tilde{\mathrm{n}}_l)^2 = (\vec{\nabla}\tilde{\mathrm{n}}_l)^2 + (\partial_\tau \tilde{\mathrm{n}}_l)^2$. Assumiremos as seguintes condições de contorno para $\tilde{\mathrm{n}}_l$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathrm{n}}(\vec{r},\tau) &= 0 \qquad \text{para } (\vec{r} \to \infty), \\ \tilde{\mathrm{n}}(\vec{r},0) &= 0, \\ \tilde{\mathrm{n}}(\vec{r},\tau) &= 0 \qquad \text{para } (\tau \to \infty). \end{aligned} \quad (3.5)$$

As duas últimas condições, se aplicam para cálculos em $T = 0$ e $T \neq 0$, respectivamente. Fazendo a integração por partes no expoente da equação (3.4), temos:

$$\begin{aligned} \int d^2r(\partial_\mu \tilde{\mathrm{n}}_l)^2 &= \int d^2r[\partial_\mu(\tilde{\mathrm{n}}_l\partial_\mu\tilde{\mathrm{n}}_l) - \tilde{\mathrm{n}}_l\partial_\mu^2\tilde{\mathrm{n}}_l] \\ &= \tilde{\mathrm{n}}_l\partial_\mu\tilde{\mathrm{n}}_l\Big|_{\text{fronteira}} - \int d^2r\tilde{\mathrm{n}}_l\partial_\mu^2\tilde{\mathrm{n}}_l \\ &= -\int \tilde{\mathrm{n}}_l\partial_\mu^2\tilde{\mathrm{n}}_l d^2r. \end{aligned} \quad (3.6)$$

As condições de contorno anulam o termo de fronteira do espaço-tempo. Inserindo (3.6) em (3.4), obtemos:

$$Z = \int\int \frac{D\tilde{\mathrm{n}}_l}{N^{N/2}} D\lambda \exp\left[\frac{-1}{2gN}\int d^2r[Nn_l(-\partial_\mu^2 - 2ig\lambda)n_l + 2igN\lambda - 2gNS\vec{H}\cdot n_l]\right]. \quad (3.7)$$

Note que fizemos $\sqrt{N} \sim N$, no último termo, no limite que $N \to \infty$. O quadrado pode ser completado redefinindo o campo n_l como:

$$n_l = n_l^{'} + \bar{\mathrm{n}}_l, \tag{3.8}$$

onde

$$\bar{\mathrm{n}}_l = S \int d^2r^{'} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'}) H(\mathbf{x}^{'}), \tag{3.9}$$

e

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'}) = -2gN \frac{\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'})}{-\partial_\mu^2 - 2gi\lambda}. \tag{3.10}$$

A função $G(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'})$ é a função de Green, também conhecida como propagador de Feynman. Na equação (3.7) temos a seguinte integral:

$$\begin{aligned}\int d^2r[n_l(-\partial_\mu^2 - 2ig\lambda)n_l] &= \int d^2r[n_l G^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'})n_l] = \int d^2r[(n_l^{'} + \bar{\mathrm{n}}_l)G^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'})(n_l^{'} + \bar{\mathrm{n}}_l)] = \\ &= \int d^2r[n_l^{'} G^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'})n_l^{'} + 2\bar{\mathrm{n}}_l G^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'})n_l^{'} + \bar{\mathrm{n}}_l G^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'})\bar{\mathrm{n}}_l].\end{aligned} \tag{3.11}$$

Substituindo (3.9) em (3.11), obtemos:

$$\begin{aligned}\int d^2r[n_l(-\partial_\mu^2 - 2ig\lambda)n_l] = \int d^2r \Bigg[& n_l^{'} G^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'})n_l^{'} + 2S \int d^2r^{'} H(\mathbf{x}^{'}) G^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'}) n_l^{'} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'}) \\ & + S^2 \int d^2r^{'} H(\mathbf{x}^{'}) G^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'}) G(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'}) G(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'}) H(\mathbf{x}^{'}) \Bigg].\end{aligned} \tag{3.12}$$

Usando o fato que $G^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'})G(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'})$, podemos fazer a integração em $r^{'}$. Assim a equação (3.12) torna-se:

$$\begin{aligned}\int d^2r[n_l(-\partial_\mu^2 - 2ig\lambda)n_l] = \int d^2r \Bigg[& n_l^{'} G^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'})n_l^{'} + 2gSH(\mathbf{x})n_l^{'} \\ & + S^2 \int d^2r^{'} H(\mathbf{x}) G(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'}) H(\mathbf{x}^{'}) \Bigg].\end{aligned} \tag{3.13}$$

Substituindo (3.13) em (3.7) a função de partição torna-se:

$$Z = \int \left[\frac{Dn_l^{'}}{N^{N/2}} \right] \left[\frac{D\lambda}{2\pi} \right] \exp(-S[\lambda, H]), \tag{3.14}$$

onde

$$S[\lambda, H] = \int d^2r \Bigg[n_l^{'} G^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'})n_l^{'} + i\lambda(\mathbf{x}) + S^2 \int d^2r^{'} H(\mathbf{x}) G(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{'}) H(\mathbf{x}^{'}) \Bigg].$$

3.5 A solução da Integral Gaussiana

O primeiro termo na ação efetiva é o único termo da ação que depende do campo $n_l^{'}$, assim podemos efetuar primeiramente a integral no campo $n_l^{'}$. Para este fim, discretizamos o campo contínuo $n_l^{'}$, onde o mesmo torna-se um vetor cujas componentes são os valores do campo em cada sítio da rede no espaço-tempo discreto. O operador $G(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{'})$, transforma-se em uma matriz G_{ij}, e a integral dupla passa a ser uma soma dupla $n_i G_{ij} n_j$, que pode ser escrita matricialmente como $n_l^{\dagger} G n_l$. Portanto, podemos integrar o campo $n_l^{'}$, usando a relação $\int Dn_l^{'} = \lim_{N\to\infty} M_N \int \prod_{i=1}^{N} dn_l^{'}$. A matriz G_{ij} possui autovalores reais, portanto é um operador hermitiano. Logo existe uma operação unitária $\mathbf{U}$ que diagonaliza $\mathbf{G}$, isto é, $\mathbf{G} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{U}$. Seja a transformação de variáveis $\psi = \mathbf{U} n_l^{'}$, aplicando na ação temos:

$$n_l^{'\dagger}\mathbf{U}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{U}n_l^{'} = (n_l^{'}\mathbf{U})^{\dagger}\mathbf{D}(\mathbf{U}n_l^{'}) = \psi_i^{\dagger}\mathbf{D}_{ij}\psi_j = \psi_i a_i \delta_{ij}\psi_j = a_i\psi_i^2, \tag{3.15}$$

onde os $a_i^{'}s$ são os auto-valores de $\mathbf{G}$. Além disso, temos:

$$\prod_{i=1}^{N} d\psi_i = \prod_{i=1}^{N} \frac{\partial\psi}{\partial n_l^{'}} dn_l, \tag{3.16}$$

onde $\partial\psi/\partial n_l^{'}$ é o jacobiano da transformação, que é exatamente o determinante da matriz unitária $\mathbf{U}$. Entretanto, o determinante da matriz unitária é igual a unidade, portanto $d\psi_i \to dn_l$. Finalmente, podemos escrever a seguinte integral

$$c \lim_{N\to\infty} \frac{M_N}{N^{N/2}} \int \prod_{i=1}^{N} d\psi_i e^{-\frac{1}{2gN}a_i\psi_i^2}, \tag{3.17}$$

resolvendo esta integral Gaussiana, obtemos:

$$c \lim_{N\to\infty} \frac{M_N}{N^{N/2}} (2\pi g N)^N \prod_{i=1}^{N} \left(\frac{1}{\sqrt{a_i}}\right),$$

$$c \lim_{N\to\infty} \frac{M_N}{N^{N/2}} (2\pi g N)^N \prod_{i=1}^{N} (Det\mathbf{G})^{-N/2}. \tag{3.18}$$

Aqui, $M_N = N^{N/2}(2\pi g N)^N$ de forma a fazer a função de partição finita. Usando a propriedade dos determinantes $Det\mathbf{G} = \exp[\frac{-N}{2} Tr(\ln \mathbf{G})]$, podemos escrever agora a função de partição como:

$$Z = \int \frac{D\lambda}{2\pi} \exp(-NS[\lambda, H]) \tag{3.19a}$$

$$S[\lambda, H] = \frac{3}{2}Tr[\ln(G(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{'}))] + i\int d^2r\lambda(\mathbf{x}) + S^2\int d^2r^{'}d^2rH(\mathbf{x})G(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{'})H(\mathbf{x}^{'})\Big]. \tag{3.19b}$$

3.6 Método do Ponto de Sela

Na equação (3.19b) podemos observar que a ação não é quadrática em λ, e portanto não pode ser resolvida exatamente. Usaremos aqui, o método do ponto de sela retendo termos até segunda ordem, o que se justifica no limite que $N \to \infty$ no expoente de (3.19a). Em outras palavras, quando $N \to \infty$ a exponencial decrescente em (3.19a) só sobrevive quando tomamos pequenos desvios em relação ao extremo $\lambda = \lambda_c$, entorno do qual a expansão $S[\lambda, H]$ é feita. Vamos explorar uma interessante conseqüência do ponto de sela, a geração da massa ou gap da teoria. Com esta finalidade, apresentamos a seguinte equação, que determina o ponto de sela

$$\left(\frac{\delta S[\lambda, h]}{\delta\lambda(\mathbf{x})}\right)_H = 0, \tag{3.20}$$

onde $(\ldots)_H$ é funcionalmente diferenciável, conservando H como constante. Diferenciando a ação $S[\lambda, H]$ em relação a λ, encontramos a equação do ponto de sela na forma

$$3G(\mathbf{x},\mathbf{x}) + S^2\int d^2rd^2r^{''}G(\mathbf{x},\mathbf{x}^{'})G(\mathbf{x}^{'},\mathbf{x}^{''})[H(\mathbf{x})\cdot H(\mathbf{x}^{''})] = 1. \tag{3.21}$$

Para tratarmos a energia, é conveniente trabalharmos agora no espaço de Fourier, na qual é definido como:

$$\tilde{\mathrm{n}}(\vec{k}, n) = \int_0^L d^2r\int_0^\beta d\tau e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\Omega_n\tau)}n(\vec{r},\tau), \tag{3.22}$$

onde as freqüências $\Omega_n = 2\pi n/\beta$ são as freqüências de Matsubara, semelhantemente para o campo λ e o propagador $\mathbf{G}$. Assim a equação do ponto de sela torna-se:

$$\frac{3}{2(\beta L)}\sum_{\vec{k},n}\tilde{\mathrm{G}}(\vec{k}, n) = 1 - \frac{S^2H^2}{4}[\tilde{\mathrm{G}}(\vec{k}=0, n=0)]^2, \tag{3.23}$$

onde

$$\tilde{\mathrm{G}}(\vec{k}, n) = \frac{2g}{k^2 + \Omega_n^2 - i\lambda 2g}. \tag{3.24}$$

Fazendo agora $m^2 = i\lambda 2g$, com m^2 real e positivo, aqui m representará a energia. A soma dos momentos é divergente no ultravioleta, portanto usaremos um corte Λ no limite de integração do momento, e assumimos que o mesmo é muito maior que a temperatura. Desta forma a equação (3.23), pode ser reescrita da seguinte maneira

$$T\sum\int\frac{d^2k}{4\pi^2}\left(\frac{2g}{k^2+\Omega_n^2+m^2}-\frac{2g}{k^2+\Omega_n^2+\Lambda^2}\right)=1-\frac{S^2H^2}{4}[\tilde{\mathrm{G}}(\vec{k}=0,n=0)]^2. \tag{3.25}$$

Tomando o limite termodinâmico, e o limite de temperatura zero ($L,\beta\to\infty$), finalmente podemos fazer a integração, afim de obtermos a energia m como:

$$\left(\frac{gT}{2\pi}\right)\ln\left[\frac{\sinh(\Lambda/2T)}{\sinh(m/2T)}\right]=1-\frac{a^2}{m^4}, \tag{3.26}$$

onde $a^2 = S^2g^2H_s^2$. Explicitando a energia na equação (3.26), podemos escrevê-la como

$$m=2Tarcsinh\left[\frac{1}{2}\exp\left[-\frac{2\pi}{T}\left(\frac{G}{g}-\frac{1}{g_c}\right)\right]\right], \tag{3.27}$$

onde $G = 1-a^2/m^4$ e $g_c = 4\pi/\Lambda$. Chamamos a atenção que para $H_s \neq 0$ na equação (3.27), onde esta deve ser resolvida auto-consistentemente, porque temos a energia dependendo da própria energia. Para $H_s = 0$, temos duas fases distintas em $T = 0$, uma para $g > g_c$, na qual m aproxima de um valor finito quando $T \to 0$, enquanto que para $g < g_c$, m vai a zero quando $T \to 0$. Definindo $\Delta = G/g - 1/g_c$, a equação (3.27) pode ser reescrita como

$$m=2Tarcsinh\left[\frac{1}{2}\exp\left[-\frac{2\pi}{T}\Delta\right]\right]. \tag{3.28}$$

3.7 Resultados

Vamos ver se é possível ter $m = 0$ em $T = 0$ na equação (3.28). A condição para isto é $\Delta \geqslant 0$. Isto implica em $(1-\frac{a^2}{m^4})\frac{1}{g}-\frac{1}{g_c}\geqslant 0$. É claro que para $H_s = 0$ a condição é satisfeita para $g_c > g$. Agora para $H_s \neq 0$, $m = 0$ implica que o lado esquerdo da desigualdade é $-\infty$, uma impossibilidade. Portanto, concluímos que neste caso temos somente uma fase quântica a temperatura zero. Se $\Delta < 0$ podemos usar a relação

$$2arcsinh\left(\frac{1}{2}e^{\alpha/2}\right)=\alpha+2e^{-\alpha}, \tag{3.29}$$

e obter para $T \to 0$

$$m = 4\pi\left(\frac{1}{g_c} - \frac{1 - a^2/m^4}{g}\right). \tag{3.30}$$

Fazendo $A = 4\pi/g_c$, $B = 4\pi/g$, $D = 4\pi a^2/g$, podemos escrever a equação(3.30) como

$$m^5 + (B - A)m^4 - D = 0, \tag{3.31}$$

na qual pode ser resolvida numericamente. Se $H_s = 0$, $m = 0$ é uma solução. A outra solução possível é

$$m = 4\pi\left(\frac{1}{g_c} - \frac{1}{g}\right), \tag{3.32}$$

que é uma solução física somente para $g > g_c$. Se $g = g_c$ encontramos um resultado diferente para (3.31)

$$m = (4\pi S^2 g)^{1/5} H_s^{2/5}. \tag{3.33}$$

Para $g < g_c$, e $T = 0$, encontramos que m varia com H_s como $m \propto H_s^{\gamma}$, onde o coeficiente γ é igual a $2/5$ para $g = g_c$ e tende a $1/2$, quando $g \ll g_c$. Na Figura(3.1), mostramos o expoente γ como função de g/g_c. Como pode ser visto, para $g/g_c = 0.4$ o γ é praticamente igual a $1/2$. Antes de continuarmos, seria interessante observarmos que a teoria de onda de spin padrão fornece um gap proporcional a $H_s^{1/2}$, em comum acordo.

Para $g > g_c$, Figura(3.2), o comportamento da energia m como função de H_s, é completamente diferente como mostra a Figura(3.3) correspondendo a $g < g_c$. Entretanto, em ambos os casos energia aumenta a medida em que o campo magnético staggered aumenta. Algo que deve ser chamado a atenção nestes gráficos, é que para campo magnético staggered nulo, temos duas fases distintas. Note que para campo nulo o gráfico (3.2) tem gap($m \neq 0$) em $g > g_c$, enquanto que no gráfico (3.3) não tem gap ($m = 0$) para $g < g_c$. Finalmente nos gráficos(3.4) e (3.5), apresentamos a energia m, como função da temperatura para $g < g_c$ e $g > g_c$, respectivamente. Embora a energia seja menor na região $g < g_c$ em ambos os casos, na temperatura zero e com campo staggered diferente de zero, os gráficos apresentam uma energia com um gap diferente. Assim, podemos observar uma característica importante do modelo, onde o mesmo não tem uma transição de fase quântica na presença do campo magnético staggered, porque nos dois limites existe a presença do gap. Notamos também que a energia como função da temperatura aumenta, a medida em que a temperatura aumenta.

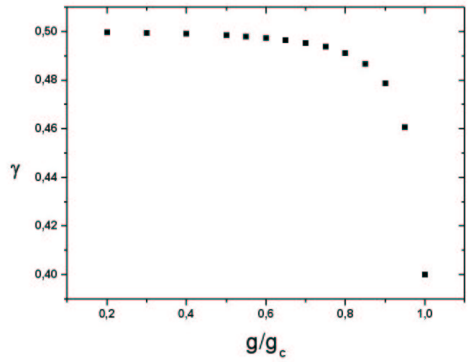

Figura 3.1: O fator do expoente da equation $m \propto H_s^{\gamma}$, como função do parâmetro de acoplamento g.

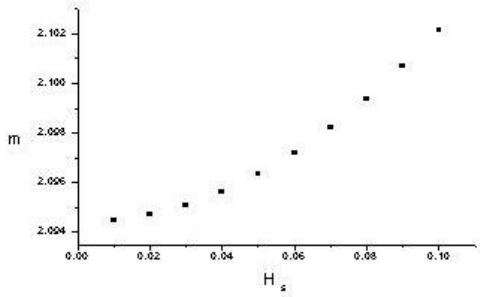

Figura 3.2: A energia em $T = 0$ como função do campo staggered para $g > g_c$.

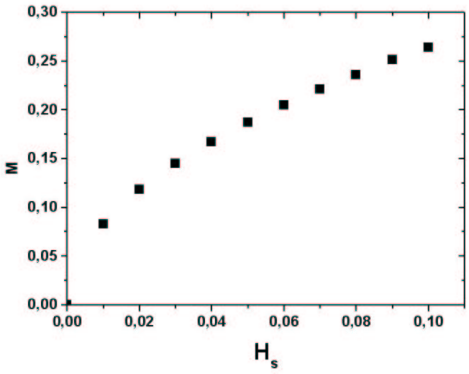

Figura 3.3: A energia em $T = 0$ como função do campo staggered para $g < g_c$.

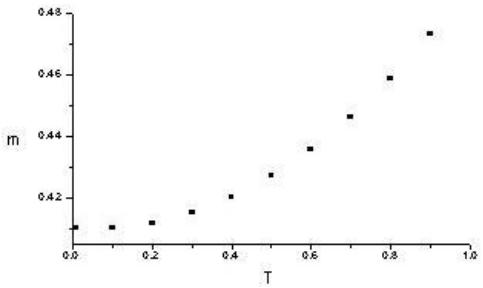

Figura 3.4: A energia em função da temperatura para $H_s = 0.1$ e $g < g_c$.

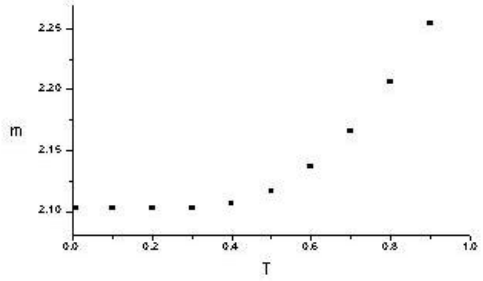

Figura 3.5: A energia em função da temperatura para $H_s = 0.1$ e $g > g_c$.

3.8 Conclusões

Para concluirmos este capítulo, calculamos a energia do em função da temperatura nas excitações do espectro magnético no antiferromagneto bidimensional na presença de um campo magnético staggered. Apresentamos o método para solução da integral de caminho, onde através do método do ponto de sela obtemos a energia. Encontramos somente uma fase quântica para $T = 0$ na presença do campo staggered, fase esta, que representa a fase quântica desordenada, na qual nos referimos no capítulo 2. Aqui, não temos a fase clássica renormalizada, porque tanto para $g > g_c$, quanto para $g < g_c$ o sistema apresenta um gap à temperatura zero. Entretanto, para campo nulo temos duas fases distintas, isto é, ocorre uma transição de fase quântica. Observamos também que a energia aumenta com o aumento do campo staggered ou com o aumento da temperatura.

Capítulo 4

Antiferromagneto 2D na presença de um campo staggered

4.1 Introdução

Neste capítulo estudaremos a interação entre ondas de spin e um sóliton, no modelo antiferromagneto bidimensional na presença de um campo magnético staggered uniforme, aplicado perpendicularmente ao plano[2, 3].

O estudo de interações entre ondas de spin e excitações topológicas em sistemas magnéticos clássicos é de importância fundamental, como mostrado por Currie et al.[44] é o início da análise termodinâmica do sistema. Como apontado por Zaspel et al.[45] as interações são importantes no estudo da dinâmica de vórtice. Uma evidência de excitações topológicas pode ser detetada através de experimentos, de largura de linha EPR(Electron Paramagnetic Resonance)[45]. O EPR é proporcional a integral da função correlação de quatro spins[45, 46], e a determinação desta função depende da excitação do sóliton, e das auto-funções das ondas de spin na presença do sóliton. A importância de conhecermos o comportamento da solução topológica a as auto-funções das ondas de spin, devido a interação com o sóliton, é que nos motivou a fazer este trabalho. Sólitons interagindo com ondas de spin tem sido estudados nos últimos anos, através do modelo $2D$ sigma não-linear (isotrópico[47] e anisotrópicos[48, 49]).

O ferromagneto clássico com simetria de plano-fácil na presença de um campo magnético aplicado na direção-z, e o isotrópico antiferromagneto na presença de um

capo staggered tem algumas semelhanças. Eles são semelhantes no ponto de vista termodinâmico, embora no comportamento dinâmico sejam diferentes. Muitos trabalhos tem sido dedicados a estudar materiais na presença de campos externos[50, 42, 51]. Este estudo é muito importante, porque em geral experimentos utilizam campos externos. O interesse em campos staggered apareceu na literatura após o trabalho de Oshikahawa e Affleck[52]. Um estudo de redes antiferromagnéticas para $S = 1/2$ em um efetivo campo staggered, foi escrito por Sato *et al.*[53]. Os mecanismos para gerar campos staggered em magnetos reais foi discutido em [52, 54, 55, 56]. Recentemente muitos trabalhos foram publicados, enfocando a importância deste estudo[34, 41]. A maioria dos materiais estudados são unidimensionais ou quase unidimensionais. Até o presente momento não encontramos resultados experimentais para o antiferromagneto bidimensional na presença do campo staggered. Embora haja um grande número de trabalhos teóricos dedicados ao antiferromagneto $1D$ na presença do campo staggered, o número de trabalhos relacionados ao antiferromagneto $2D$ é pequeno [2, 1]. Isto nos motivou a estudar este trabalho. Sendo assim, como vimos no capítulo 1, descrevemos o modelo de spin, através do seguinte Hamiltoniano

$$H = \sum_{<ij>} [-J\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \frac{1}{2} g_0 \mu_0 (-1)^i \vec{B} \cdot S^z_{i,j}], \tag{4.1}$$

onde a soma estende-se sobre todos o sítios de uma rede quadrada, J é uma constante negativa, $\vec{S}_i$ e $\vec{S}_j$ são os vetores de spin para o sítios (i) e (j), g_0 é a razão giromagnética, $\mu_0 = e/2mc$ é o magneton de Bohr, e $\vec{B}$ é o campo magnético, o qual é aplicado na direção-z ($\vec{B} = B\hat{z}$). Como vimos na seção (1.3) do capítulo 1, a versão contínua deste modelo, pode ser mapeada através do modelo sigma não-linear com campo externo

$$H = \frac{J}{2} \int [(\partial_0 \vec{n})^2 - (\partial_\alpha \vec{n})^2 + h n_3] d^2x \qquad \alpha = 1, 2, \tag{4.2}$$

onde $h = \mu_0 g_0 B/4JS$. É importante ressaltar que a introdução do campo magnético staggered quebra a invariância de escala do modelo. Usando parametrização esférica para o vetor de spin $\vec{n} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$, podemos reescrever o Hamiltoniano em termos dos campos θ e ϕ, lembrando que estes campos são funções das coordenadas e do tempo. Esta passagem foi feita em detalhes no apêndice B. Assim

temos:

$$H = \frac{J}{2}\int\left[\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)^2 - (\vec{\nabla}\theta)^2 + \sin^2\theta\left[\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)^2 - (\vec{\nabla}\phi)^2\right] + h\cos\theta\right]d^2x, \quad (4.3)$$

onde $c = 2aJS$ é a velocidade da onda de spin. Para obtermos as equações de movimento para os campos θ e ϕ, usamos as equações de Hamilton para campos. O desenvolvimento mais detalhado das equações de movimento pode ser visto no apêndice B. As equações de movimento provenientes do Hamiltoniano (4.3) são:

$$\nabla^2\theta - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\theta}{\partial t^2} = \sin\theta\cos\theta\left[(\vec{\nabla}\phi)^2 - \frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)^2\right] + h\sin\theta, \quad (4.4)$$

$$\nabla^2\phi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = -2\cot\theta\left[(\vec{\nabla}\theta\cdot\vec{\nabla}\phi) - \frac{1}{c^2}\frac{\partial\phi}{\partial t}\frac{\partial\theta}{\partial t}\right]. \quad (4.5)$$

4.2 Solução sóliton para o modelo

Vamos denotar a solução para o sóliton como ϕ_s e θ_s. A solução sóliton deve satisfazer simultaneamente as equações(4.4) e (4.5). A solução ϕ_s representa a projeção do sóliton no plano, e é dada por: $\phi_s = q\arctan(y/x)$. Aqui o parâmetro $q = 1, 2, 3...$ é a carga topológica do sóliton. Note que esta solução é a mesma solução de vórtice apresentada no capítulo 2, e pode ser visualizada na Figura(2.1). Portanto podemos escrever as soluções localizadas das equações(4.4) e (4.5) em coordenadas polares na forma

$$\theta = \theta_s(r),\ \theta_s(0) = 0,\ \theta_s(\infty) = \pi/2,\ \phi_s(\varphi, t) = q\varphi - \Omega t. \quad (4.6)$$

Aqui, Ω é a freqüência de precessão interna do sóliton. O sóliton precessional corresponderá para um mínimo da energia (4.3), para um dado número N de ondas de spin ligadas ao sóliton

$$N = \frac{N_2\Omega^2 q}{c^2}\int_0^R rdr[1 - \cos\theta_s(r)], \quad (4.7)$$

na qual é conservado para o caso uniaxial, $N_2 = 2\pi JS^2/\hbar\omega_\theta$ é o número característico de magnons ligados ao sóliton em duas dimensões[57], sendo ω_θ a freqüência das ondas de spin. A freqüência de precessão é totalmente determinada pelo número de

N de magnons ligados. Para sólitons grandes($N \gg N_2$) temos uma precessão muito baixa($\Omega \ll \omega_\theta$), já para sólitons pequenos($N_2 \gg N$) a freqüência de precessão tende para freqüência dos magnons($\Omega \to \omega_\theta$). A freqüência de magnos(ondas de spin) será tratada mais adiante na próxima seção, por enquanto o leitor deve ficar atento somente no conceito físico em questão.

Substituindo as equações(4.6) nas equações(4.4) e (4.5), notamos que a equação(4.5), é automaticamente satisfeita. Então, como resultado proveniente da equação(4.4) será

$$\frac{1}{k_0^2}\left(\frac{d^2\theta_s}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{d\theta_s}{dr}\right)+\left(1-\frac{q^2}{k_0^2r^2}\right)\sin\theta_s\cos\theta_s-\frac{h}{k_0^2}\sin\theta_s=0, \tag{4.8}$$

onde $k_0^2 = \Omega^2/c^2$. Por conveniência faremos $l_0^2 = 1/k_0^2$ e $H = h/k_0^2$, a fim de adaptarmos nossa equação, a uma outra já conhecida na literatura[58]. A solução da equação(4.8) descreve uma distribuição de magnetização com um gradiente de fase em circulação fixa $\nabla\varphi$, isto é, com uma dada circulação de spin (onda de spin) com fluxo ao redor eixo-z. A equação(4.8) obtida para a solução fora do plano, é idêntica à equação para o ferromagneto com campo magnético perpendicular ao plano xy. Isto ressalta que o antiferromagneto bidimensional com campo staggered, possui mais uma semelhança ao caso ferromagnético com campo perpendicular ao plano. A solução desta equação foi obtida por Kosevich et al.[59].

Há uma magnetização de equilíbrio ($\theta_s(r) = \theta_0 \ll 1$) para o sóliton no limite($r \to \infty$). Neste caso com ($H < 1$) temos uma fase angular, na qual corresponde a uma degenerescência no campo ϕ e um valor para o ângulo $\theta_0 = \arccos(H)$. Se ($H \geqslant 1$) então ($\theta = 0$) e não temos degenerescência, portanto não teremos sólitons. Se ($H \lesssim 1$) then $\theta \simeq [2(1-H)]^{1/2} \ll 1$. Na origem o sóliton é $\theta_s(r) = 0$. Desta forma quando $r \to 0$ a solução para equação(4.8) será

$$\theta_s(r) = (r/r_0)^{|q|}, r_0 = constante \tag{4.9}$$

onde $r_0 = 1/k_0$. Note $\theta_s(r)$ não depende de H, entretanto o comportamento para $r \to \infty$ depende de H. Para $H \neq 0$ e 1 a solução tem o seguinte comportamento no infinito:

$$\theta_s(r) = \theta_0 - \frac{q^2H^2}{\sqrt{1-H^2}}\left(\frac{l_0}{r}\right)^2 .H \neq 0,1 \tag{4.10}$$

Entretanto para $H = 0$ a magnetização aproxima de uma direção de equilíbrio no

infinito exponencialmente:

$$\theta_s(r) = \frac{\pi}{2} + \frac{constant}{\sqrt{r}} e^{-r/l_0}, H = 0. \tag{4.11}$$

Quando $H = 1$, temos $\theta = 0$ para o infinito, e a dependência da coordenada do vetor de magnetização para $r = \infty$ desaparece. Neste caso sólitons com carga topológica ($q \neq 0$) não podem existir. A forma assimptótica para $\theta_s(r)$ pode ser visualizada na Figura(4.1), para diferentes valores de campo staggered. A distribuição de mag-

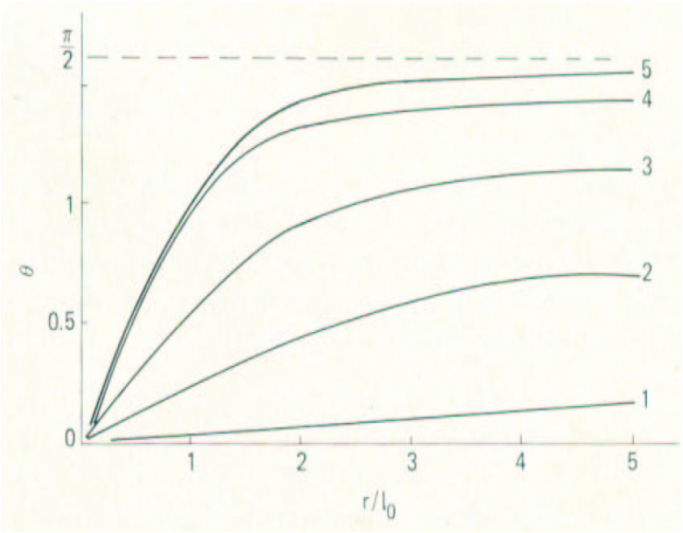

Figura 4.1: A curva 1 corresponde a (H=0.95) e a curva 4 para (H=0.1). No limite $h \to 0$ a curva correspondente é a 5, na qual é diferente da curva 4, mas seu comportamento no infinito é fornecido pela equação (4.10). Quando $H \approx 1$, as curvas 2 e 3 são qualitativamente semelhantes a distribuição dos vortices num super-fluido de Gross-Pitaevskii.

netização para o sóliton com ($q = 1$) foi calculada numericamente por Kosevich et al.[59]. Quando $H \sim 1$ o comportamento $\theta_s(r)$ é qualitativamente semelhante a densidade de distribuição da componente de um vórtice, dentro de um super-fluido descrito por Pitaevskii[60]. Para $H \to 1$ suas semelhanças tornam-se mais proeminentes. Visto que $\theta_s \lesssim \sqrt{1-H}$, para $H \to 1$ a equação (4.4) pode ser substituída por expansões em séries de potências de θ_s. Então, temos

$$l_0^2 \nabla^2 \theta_s + (1-H)\theta_s - \frac{1}{2}\theta_s^3 = 0. \tag{4.12}$$

Usando as variáveis $\theta_s(r) = \sqrt{2(1-H)}\psi(\xi)$, $\xi = \sqrt{1-H}(r/l_0)$, a equação(4.12) pode ser reduzida a equação de Gross-Pitaevskii da função $\psi(\xi)$[61, 60]. Portanto a solução sóliton para $(H = 1)$ é análoga a solução de vórtice para o super-fluido de Gross-Pitaevskii.

A característica macroscópica do sóliton é sua energia. Para calcularmos a energia efetuamos a integral(4.3). Assim temos:

$$\begin{aligned} E_s &\approx 2\pi J \frac{M_0^2}{2} a \int_0^R dr \sin^2\theta_s(r) \left[\frac{\Omega^2}{c^2} - \frac{q^2}{r}\right] \\ &\approx \pi J q^2 (1-H^2) a M_0^2 \left[\frac{R^2\Omega^2}{c^2} - q^2 \ln\left(\frac{R}{l_0}\right)\right], \end{aligned} \tag{4.13}$$

onde a é parâmetro de rede, M_0 é a magnetização-z e R é o raio do sóliton. O corte l_0 é necessário, porque o centro soliton é uma singularidade no limite contínuo. Aqui temos um grave problema, porque a energia diverge com a área do sistema. Em relação a divergência logarítmica esta não tem muita importância, pois com uma densidade finita de sólitons, a quantidade R pode ser entendida como sendo a distância média entre os sólitons. Então a função $E_s(R)$ não tem um mínimo para valores finitos de $R \neq 0$, na qual implica em uma instabilidade para o colapso. Assim é de se esperar que a precessão do sóliton não deva existir, ou até mesmo o próprio sóliton! Contudo a condição de mínimo de energia não é um fato essencial para estabilidade do sóliton. Se assumirmos que o material magnético é puramente uniaxial, este terá uma integral de movimento $K_z = \int(1-m_z)d^2r$. Isto corresponde a equação(4.7), em outras palavras o número de magnons ligados é conservado para um material uniaxial. Então a energia do sóliton pode ter um mínimo para um valor fixo de magnons ligados. Fixando N(ou outras integrais de movimento, tal como o momento angular de magnetização do campo) isto previne o colapso. Assim a análise da estrutura do sóliton reduz para o problema de condição de extremo, na qual a inserção de um multiplicador de Lagrange[57] pode ser interpretado como a freqüência de precessão do sóliton. Portanto, teremos:

$$\delta[E_s - N\hbar\Omega] = 0. \tag{4.14}$$

Fazendo $\varsigma = \pi J q^2 (1-H^2) a M_0^2$, obtemos o valor finito para raio do sóliton:

$$R(\Omega) = \frac{cq\sqrt{\varsigma\Omega}}{\sqrt{2\varsigma\Omega^3 - 2\hbar c^4 N}} \tag{4.15}$$

Agora como o raio do sóliton é finito isto nos garante um mínimo para a energia do sóliton.

4.3 Auto-funções para as ondas de spin na presença do sóliton

Para determinarmos o comportamento das ondas de spin na presença de um sóliton, assumimos que os spins tenham um ângulo polar dado por $\theta(\vec{r},t) = \theta_s(r) + \eta(\vec{r},t)$ e no plano $\phi = \vec{k}\cdot\vec{r} - \omega_\phi t$, onde $\vec{k}$ é o vetor de onda. Aqui, $\eta(\vec{r},t)$ é uma quantidade pequena, isto é, $\eta(\vec{r},t) \ll 1$, na qual reduz as soluções de magnons (ondas de spin). Na presença de um sóliton, $\eta(\vec{r},t)$ fornece a mudança na configuração do sóliton, como resultado de uma interação sóliton$-$magnon. Considerando que o centro do sóliton é o principal responsável pelo espalhamento, levaremos em conta somente o comportamento assintótico na região($r \to 0$) o que implica em $\theta_s(r) = 0$ [equações(4.6) e (4.9)]. Assim substituímos $\theta(\vec{r},t)$ na equação(4.4). Após a substituição, expandimos as funções $\sin\eta \approx \eta$ e $\cos\eta \approx 1$, onde desprezamos os termos quadráticos em $\eta(\vec{r},t)$. Assim, obtemos a equação de movimento para as ondas de spin na presença de um sóliton como

$$\nabla^2\eta - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\eta}{\partial t^2} = \eta\left[(\vec{\nabla}\phi_s)^2 - \frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\phi_s}{\partial t}\right)^2 + h\right]. \tag{4.16}$$

As soluções para equação(4.16) representam as ondas de spin fora do plano. Note que, a equação(4.16) contém o termo de potencial $V(r) = (\vec{\nabla}\phi_s)^2 = (q/r)^2$ devido ao sóliton. Substituindo a equação(4.6) na equação(4.16), e tomando o limite em que $r \to \infty$, a equação (4.16) admite soluções de ondas planas, cuja relação de dispersão é

$$\omega_\theta^2 = k^2c^2 - \Omega^2 + hc^2. \tag{4.17}$$

No referencial dos magnons a freqüência é

$$\tilde{\omega}_\theta^2 = k^2c^2 + hc^2. \tag{4.18}$$

Nestas equações, $k = |\vec{k}|$, com $\vec{k}$ sendo o vetor de onda. É claro que, o potencial na equação(4.16) é cilindricamente simétrico, porque estamos lidando com um problema de um único centro. Conseqüentemente, a matriz dos desvios de fase é diagonal.

Podemos então escrever as soluções $\eta(\vec{r},t)$, como $\eta(\vec{r},t) = B(r,\varphi)\exp(-i\omega_\theta t)$. Desta forma, a equação(4.16) pode ser reescrita como:

$$\nabla^2 B + \left[\frac{\omega_\theta^2}{c^2} - (\vec{\nabla}\phi_s)^2 + \frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\phi_s}{\partial t}\right)^2 - h\right]B = 0. \tag{4.19}$$

As soluções exatas da equação(4.19) representam as ondas de spin fora do plano na presença do sóliton. As soluções da equação(4.19) são apresentadas no Apêndice C, e podem ser escritas como:

$$\eta(\vec{r},t) = C_1 J_\mu(kr)e^{-i[n\varphi+\omega t]}, \tag{4.20}$$

onde $J_\mu(kr)$ é a função de Bessel, $\mu = \sqrt{n^2+q^2}$, e $n = 0,1,2,3,..$ representa número quântico de momento angular para as ondas de spin. O parâmetro k obedece a equação(4.17). A constante C_1 é determinada através da normalização das autofunções.

4.4 Os desvios de fase

O centro do sóliton produz um espalhamento elástico nas ondas de spin, e portanto calcularemos agora os desvios de fase referentes as ondas de spin espalhadas. Assim estudaremos o comportamento de $J_\mu(kr)$ no limite $r \to \infty$. As funções $J_\mu(kr)$ podem ser escritas como

$$J_\mu(kr) = \frac{1}{2}[H_\mu^{(1)}(kr) + H_\mu^{(2)}(kr)], \tag{4.21}$$

onde $H_\mu^{(1)}(kr)$ e $H_\mu^{(2)}(kr)$ são as funções de Hankell de primeiro e segundo tipo, respectivamente. Estas funções podem ser escritas como:

$$H_\mu^{(1)}(kr) = \sqrt{\frac{2}{k\pi r}}e^{i[kr-(\mu+\frac{1}{2})\frac{\pi}{2}]}, \tag{4.22a}$$

$$H_\mu^{(1)}(kr) = \sqrt{\frac{2}{k\pi r}}e^{-i[kr-(\mu+\frac{1}{2})\frac{\pi}{2}]}. \tag{4.22b}$$

As funções de Hankell do primeiro e segundo tipo correspondem a uma onda circular entrando e uma onda circular saindo da origem em $r \to \infty$, respectivamente. Nestas regiões temos ondas planas, de modo que as ondas nestas regiões deverão ser descritas

por uma combinação linear das funções de Hankell. Assim a equação(4.21) pode ser escrita como:

$$J_\mu(kr) = \sqrt{\frac{2}{k\pi r}}\cos[kr - (\mu + \frac{1}{2})\frac{\pi}{2}]. \tag{4.23}$$

A diferença entre $\eta(kr) = J_\mu(kr)$(solução na presença de um sóliton) e $J_n(kr)$(solução na ausência de um sóliton) é fisicamente clara. Quando uma onda de spin aproxima-se da zona de influência do potencial, esta é cada vez mais perturbada por esse potencial. Após o espalhamento a onda de spin é transformada em uma onda emergente, e esta acumula um desvio de fase $S_n(k)$ relativo a onda incidente sem a influência do potencial. A função $S_n(k)$ obedece a relação $|S_n(k)|^2 = 1$, isto porque existe a exigência da conservação do fluxo. Toda função que respeita a relação $|S_n(k)|^2 = 1$, pode ser escrita como $S_n(k) = e^{-2i\Delta_n(k)}$. O fato, é que o fator $e^{-2i\Delta_n(k)}$ resume o efeito total do potencial sobre o momento angular n da onda de spin, assim após o espalhamento podemos escrever

$$J_\mu(kr) = \frac{1}{2}[H^{(1)}_{|\mu|}(kr) + e^{-2i\Delta_n(k)}H^{(2)}_{|\mu|}(kr)] \text{ para } (r \to \infty), \tag{4.24}$$

ou

$$J_\mu(kr) = \sqrt{\frac{2}{k\pi r}}e^{i\Delta_n(k)}\cos[kr - (n + \frac{1}{2})\frac{\pi}{2} + \Delta_n(k)]. \tag{4.25}$$

Somando e subtraindo $kr - (n + \frac{1}{2})\frac{\pi}{2}$ no argumento do cosseno da equação (4.23), e comparando o resultado com a equação(4.25), obtemos os desvios de fase

$$\Delta_n(k) = (n - \sqrt{n^2 + q^2})\frac{\pi}{2} \text{ para } (n \geqslant 0), \tag{4.26}$$

$$\Delta_n(k) = -(n + \sqrt{n^2 + q^2})\frac{\pi}{2} \text{ para } (n \leqslant 0). \tag{4.27}$$

Note que $\Delta_{|n|}(k) = \Delta_{-|n|}(k)$, e que o desvio de fase da onda parcial $\eta_n(kr)$ não depende de k. Para avaliar o método de aproximação de Born, calculamos os desvios de fase $\Delta_n(k)$ usando a aproximação de Born, e comparamos o resultado da aproximação, com o resultado fornecido pelas equações(4.26) e (4.27). Podemos usar nossos resultados para checar a confiabilidade da aproximação de Born, e para isto usamos a técnica das referências[62, 47].

Os termos de primeira-ordem de Born para os desvios de fase são dados por

$$\Delta^{(1)}_n(k) = -\frac{\pi}{2}\int rdr\langle J_{|n|}(kr)e^{-in\varphi}V(r)e^{in\varphi}J_{|n|}(kr)\rangle_\varphi, \tag{4.28}$$

onde o símbolo $\langle ... \rangle \varphi$ denota uma média angular. As ondas de spin fora do plano "sentem" um potencial do sóliton da forma $V(r) = (q/r)^2$. Portanto, obtemos os desvios de fase para $n \neq 0$ através de

$$\Delta_n^{(1)} = -\frac{\pi}{2}\frac{q^2}{2|n|} \text{ para } (n \neq 0). \tag{4.29}$$

Comparação entre os resultados exatos e a aproximação de Born

Desvios de fase	Resultados Exatos	Aproximação de Born
Δ_1	$-0.414(\pi/2)$	$-0.5(\pi/2)$
Δ_2	$-0.236(\pi/2)$	$-0.25(\pi/2)$
Δ_3	$-0.162(\pi/2)$	$-0.166(\pi/2)$
Δ_4	$-0.123(\pi/2)$	$-0.125(\pi/2)$
Δ_5	$-0.099(\pi/2)$	$-0.1(\pi/2)$

Aqui, usamos $q = 1$, que representa sólitons de mais baixa energia, conseqüentemente são mais fáceis de aparecerem no sistema. Para $n = 0$, a integral (4.28) diverge, porque o centro do sóliton é uma singularidade no limite contínuo. Usualmente isto significa que para distâncias curtas um corte[3,4], deve ser aplicado *ad hoc*. Há uma boa concordância entre a aproximação (4.29) e os resultados(4.26) e (4.27), para canais de momentos angulares grandes $|n| \geqslant 1$ são apresentados na tabela acima. Para $|n| = 1$ o erro é de 21%.

Como esperávamos a aproximação de Born de primeira ordem não é boa para $n = 0, \pm 1$. Neste caso, a barreira de potencial aproxima de uma zona de forte influência do potencial do sóliton, onde a aproximação de Born pode falhar. Para $|n| \geqslant 2$, a barreira centrífuga é grande, e expele as ondas de spin do centro do sóliton onde $V(r) \gg 1$. Note que, quando $|n| \gg 1$, as equações(4.26) e (4.27) reduzem a equação(4.29). Este resultado é fisicamente importante, isto implica que uma onda de spin fora do plano no estado $\eta(\vec{r}, t)$ é praticamente afetada dentro de um círculo centrado na origem.

Para melhorarmos os cálculos para $\Delta_1^{(1)}(k)$, teríamos que levar em conta termos de segunda ordem na aproximação de Born. Entretanto, estes cálculos apresentam a mesma dificuldade, que encontraríamos calculando $\Delta_0^{(1)}(k)$, visto que o corte no limite de integração não é muito bem conhecido. Usando um valor proporcional a(parâmetro de rede), obteríamos um resultado artificial.

4.5 Correção quântica para energia clássica do sóliton

Pela generalização dos argumentos usados na quantização semi-clássica do sóliton em $(1+1)$ dimensões[47], podemos mostrar que a correção quântica para energia clássica do sóliton, é fornecida pela energia de ponto zero das ondas de spin medida com relação ao vácuo

$$E = E_s - \frac{\hbar}{2\pi}\int_0^{1/a} \frac{\partial\tilde{\omega}}{\partial k} tr\Delta_n(k)dk. \tag{4.30}$$

A energia E_s é a energia clássica do sóliton(4.13). O último termo do lado direito da equação(4.30) representa a contribuição dos estados contínuos no referencial dos spins. O traço é realizado sobre todos os índices de momento angular. Aqui, assumimos um modelo de Debye para excitações de ondas de spin, onde $1/a$ é um corte para o momento. O traço pode ser facilmente calculado, usando um corte para o momento angular dado por [47]. Encontramos o valor do traço dado por

$$tr\Delta_n^{(1)}(k) = -\frac{\pi q^2}{2}\int_a^R \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{J_{|n|}^2(kr)}{r}dr = -\frac{\pi q^2}{2}\ln\left(\frac{R}{a}\right). \tag{4.31}$$

Aqui usamos a relação $\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_{|n|}^2(kr) = 1$. Substituindo as equações(4.17) e (4.31) na equação(4.30) e calculando a integral, obtemos

$$E = E_s + \frac{\hbar q^2 c}{4}\ln(R/a)(\sqrt{(1/a^2)+h} - \sqrt{h}). \tag{4.32}$$

Para grandes campos staggered temos uma inibição das flutuações quânticas e conseqüentemente as correções para a energia do sóliton. Entretanto, para pequenos campos staggered temos maiores flutuações quânticas, e as correções quânticas são mais importantes.

4.6 Contribuição para largura de linha da ressonância paramagnética eletrônica (EPR)

Como é bem conhecido na literatura, excitações topológicas contribuem para o pico central na função de correlação dinâmica. Este pico pode ser detectado

através de experimentos de espalhamento de neutrons e ressonância magnética nuclear. Entretanto, a presença de excitações topológicas pode ser vista na largura de linha EPR[45, 63]. Nesta seção estaremos interessados em observar estas excitações através da largura de linha (EPR). Waldner[63] mostrou experimentalmente que compostos antiferromagnéticos clássicos exibem uma largura de linha EPR(Arrhenius) dada por $\Delta H \sim exp(E_s/T)$. Aqui E_s é a energia do sóliton, e T é a dependência da temperatura. Nas referências[63, 64] foi mostrado que a medida da energia E_s na largura de linha EPR em função da temperatura, está de acordo com a energia do sóliton do Belavin- Polyakov[65] para quatro compostos diferentes. É baseado neste fato que conclui-se que os sólitons contribuem para largura de linha EPR na região de flutuação crítica.

A largura de linha EPR está relacionada com a função dependente da temperatura da correlação entre os spins. Conseqüentemente sólitons estáticos não podem contribuir para largura de linha EPR. Para interpretar o comportamento Arrhenius observado, é necessário calcular a contribuição dinâmica dos sólitons para largura de linha EPR, ou equivalentemente encontrar a função de correlação dependente da temperatura na região crítica de flutuação. Gouvea *et al.*[15] através dos resultados da interação entre excitações topológicas e ondas de spin, mostrou um aumento para o pico central na função de correlação dependente da freqüência. Zaspel[66] mostrou que o movimento de excitações topológicas, também resulta em um pico central. Outra contribuição importante para dinâmica de excitações topológicas, é a interação entre as ondas de spin e as excitações topológicas. Conseqüentemente esta interação deve contribuir também para as funções de correlação.

Nosso propósito desta seção é estudar o comportamento da largura de linha EPR devido a interação entre as ondas de spin e os sólitons[3]. Asano *et al.* [67] escreveu um artigo sobre ressonância eletrônica de spin(ESR), para o modelo Heisenberg antiferromagnético de spin $S = 1/2$, Cu pirimidino. O efeito do campo staggered foi claramente observado para largura de linha ESR. Como vimos na seção(4.4) os efeitos de mais baixa ordem do sóliton produzem um espalhamento elástico nas ondas de spin. Através destes efeitos da interação entre sólitons e magnons, calculamos a largura de linha EPR para o modelo antiferromagnético $2D$ na presença do campo staggered.

Para calcularmos a função de correlação entre os spins, usamos o fator de

estrutura da rede

$$f^i(\vec{k},t) = \int n^i(\vec{r},t)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}d^2r, \tag{4.33}$$

onde $i = x, y$ é a componente i da sub-rede de magnetização, com dependência temporal devida a interação sóliton-magnon. Este fator de estrutura contém a contribuição estática do sóliton, e a contribuição dependente do tempo devido a interação entre o sóliton e as ondas de spin. Como $\eta \ll 1$ e $\theta_s \ll 1$, fizemos a aproximação $\sin[\theta_s + \eta] \approx \theta_s + \eta$. O termo $\vec{k}\cdot\vec{r}$ na equação (4.33) pode ser escrito na forma $\vec{k}\cdot\vec{r} = |\vec{k}||\vec{r}|\cos(\alpha_k - \varphi)$, onde α_k é o ângulo do vetor $\vec{k}$ com o eixo x, e o φ é o ângulo do vetor $\vec{r}$ com o eixo x. Para simplificar faremos $\alpha_k = 0$. Vamos calcular a largura de linha EPR para o estado fundamental ($n = 0$), e sóliton com carga topológica $q = 1$. Estes valores descrevem o estado de mais baixa energia. Então, podemos escrever o fator de estrutura como:

$$\begin{aligned} f^{x,y}(\vec{k},t) = &\left[\int_0^R J_1(kr)e^{-i\omega_\theta t} + \int_0^d \theta_{s_{r\to 0}}(r) + \int_d^\infty \theta_{s_{r\to\infty}}\right] \\ &\times \left\{ \begin{array}{c} \cos(\varphi + kr\cos\varphi - \omega_\phi t) \\ \sin(\varphi + kr\cos\varphi - \omega_\phi t) \end{array} \right\} e^{ikr\cos(\varphi)} r dr d\varphi. \end{aligned} \tag{4.34}$$

Aqui, $\theta_{s_{r\to 0}}$ e $\theta_{s_{r\to\infty}}$ são as equações (4.9) e (4.10), respectivamente. Fazemos a observação, que nesta equação f^x e f^y correspondem ao (cos) e o (sin), respectivamente. Na primeira integral R é um cutoff. O parâmetro d nos limites de integração é um número, onde as equações (4.9) e (4.10) tem o mesmo valor. Igualando as equações (4.9) e (4.10) obtemos

$$d = \frac{\sqrt[3]{r_0 H^2 l_0^2}}{(1-H^2)^{1/6}}. \tag{4.35}$$

Integrando as equações (4.34), obtemos:

$$f^x_{(1)}(k,t) = \frac{iR\pi e^{-i(\omega_\theta+\omega_\phi t)}}{3k}W_1(kR) + \frac{i\pi e^{-i\omega_\phi t}d^2}{2r_0}W_2(kd) - \frac{iH^2 l_0^2 e^{-i\omega_\phi t}}{\sqrt{1-H^2}}W_3(kd)\Bigg], \tag{4.36a}$$

$$f^y_{(1)}(k,t) = \frac{R\pi e^{-i(\omega_\theta+\omega_\phi t)}}{3k}W_1(kR) + \frac{\pi e^{-i\omega_\phi t}d^2}{2r_0}W_2(kd) - \frac{H^2 l_0^2 e^{-i\omega_\phi t}}{\sqrt{1-H^2}}W_3(kd)\Bigg], \tag{4.36b}$$

onde

$$W_1(kR) \equiv [J_0(kR)J_1(2kR) - 2J_0(2kR)J_1(kR)], \tag{4.37a}$$

$$W_2(kd) \equiv \frac{J_2(2kd)}{k}, \tag{4.37b}$$

$$W_3(kd) \equiv -kdF[(1/2);(3/2,2);-(kd/2)^2]+1. \tag{4.37c}$$

A função $F[(1/2);(3/2,2);-(kd/2)^2]$ é uma função hipergeométrica confluente. No limite $k \to 0$, as equações(4.36) são:

$$f^x_{(0)}(t) = -\frac{i\pi H^2 l_0^2 e^{-i\omega_\phi t}}{\sqrt{1-H^2}}, \tag{4.38a}$$

$$f^y_{(0)}(t) = -\frac{\pi H^2 l_0^2 e^{-i\omega_\phi t}}{\sqrt{1-H^2}}. \tag{4.38b}$$

A largura de linha EPR é a integral temporal da função de correlação de quatro spins, e é dada por [68, 45, 69, 70]

$$\Gamma = \frac{k_B T}{2\chi_\perp \hbar^2} \sum_{k,k'} A(k_0)$$
$$\times Re \int e^{-i\omega_r t} \langle n^i_k(t) n^i_{-k'}(t) n^i_{-k}(0) n^i_{k'}(0)\rangle dt, \tag{4.39}$$

onde $\chi_\perp$ é a susceptibilidade uniforme, ω_r é a freqüência de ressonância, e $A(k_0)$ está relacionado com os coeficientes de fourier da interação dipolar, calculada através do vetor de onda antiferromagnético ($k_0 = \pi/a$).

Vamos considerar somente espalhamentos incoerentes de sólitons independentes[70, 71] para diferentes centros $\mathbf{r}_j$. Então $n^i(\vec{r},t) = \sum_j n(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j,t)$, e as somas sobre todos os pares de centros, que produzem $N\langle f(k,t)f(-k,t)f(k,0)f(k,0)\rangle$ para a função de correlação[72], onde $f = (f^x + f^y)/2$ é um fator de estrutura simetrizado[70, 71], e N é a densidade de sóliton. Assim, a contribuição do sóliton para largura de linha EPR é[45, 70]

$$\Gamma \sim \frac{N k_B T}{\chi_\perp} \frac{S^4}{2\pi} \sum_k^2 Re\left[\int_0^\infty \langle f^2_{(0)}\rangle \langle f_{(0)} f_{(1)}\rangle e^{i4\omega_\phi t} e^{i\omega_r t} dt\right], \tag{4.40}$$

com $f_{(0)} = (f^x_{(0)} + f^y_{(0)})/2$, $f_{(1)} = (f^x_{(1)} + f^y_{(1)})/2$. Vamos assumir que a magnetização relaxa, através da difusão de uma freqüência de magnon complexa $\omega_\phi = ck + iDk^2/2$, onde D é o coeficiente de difusão. Na equação(4.40), como há existência da simetria temporal, fizemos uma mudança no sinal das exponenciais para facilitar os resultados. A densidade de sóliton é proporcional a $e^{-E_s/2T}$, onde E_s é a energia do sóliton. Para uma primeira aproximação, podemos usar o coeficiente de

difusão obtido através da dinâmica de escala calculada por Chakravarty *et al.*[73], $D = \xi\sqrt{T/\chi_\perp}$, e o comprimento de correlação calculado por Takahashi [74], onde este usou a teoria de onda de spin modificada para o antiferromagneto bidimensional, $\xi = (1/8\sqrt{2}e^{\pi/2})e^{E_s/2T}$.

Calculando a integral temporal, obtemos:

$$\Gamma \sim \frac{Nk_BT}{\chi_\perp}\frac{S^4\pi^4H^6l_o^6}{2\pi\sqrt{1-H^2}} \times \sum_k^2 \left[\frac{DRk^2}{24(1-H^2)}\frac{W_1(kR)}{(\omega_r+\omega_\theta+4ck)^2+4D^2k^4}\right.$$
$$\left. -\frac{Dk^2d^2}{16r_o(1-H^2)}\frac{W_2(kd)}{(\omega_r+4ck)^2+4D^2k^4} + \frac{Dk^2H^2l_0^2}{8(1-H^2)^4}\frac{W_3(kR)}{(\omega_r+4ck)^2+4D^2k^4}\right]. \quad (4.41)$$

A soma na equação(4.41) pode ser convertida em uma integral em duas dimensões. O limite inferior da integral em k é $1/a$. Note que esta integral é complicada, portanto integramos k numericamente. Na Figura (4.2), apresentamos o comportamento

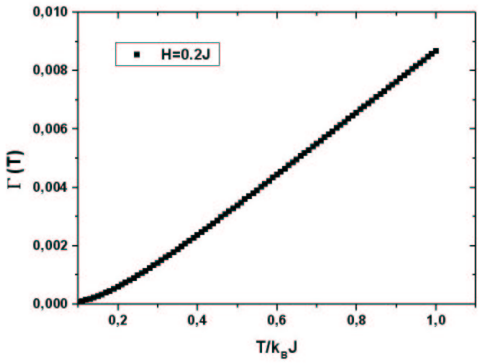

Figura 4.2: O gráfico da largura de linha EPR em função da temperatura para H=0.2J, devido a interação sóliton-magnon.

da largura de linha EPR como uma função da temperatura, para um campo staggered igual a $0.2J$. Aqui, fizemos $J = k_B = \hbar = 1$. O comportamento da largura de linha EPR é muito semelhante ao apresentado na literatura. Na Figura (4.3), temos o comportamento do logaritmo da largura de linha EPR em função da temperatura. Nesta figura, podemos observar um aumento na largura de linha EPR, com o aumento do campo staggered. Nossos cálculos teóricos podem ser comparados

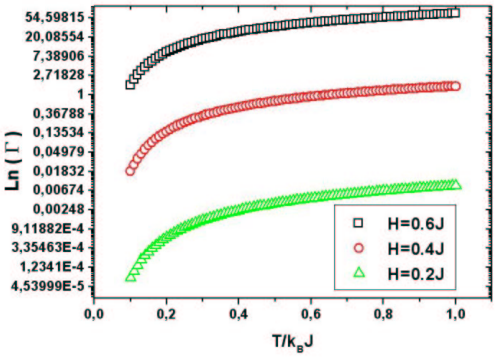

Figura 4.3: O gráfico do logaritmo da largura de linha EPR em função da temperatura para H=0.2J, H=0.4J e H=0.6J.

diretamente, com os resultados experimentais através da equação(4.41).

4.7 Conclusões

Neste capítulo estudamos interações entre ondas de spin e um sóliton, em um modelo clássico bidimensional antiferromagneto com um campo magnético staggered aplicado perpendicularmente ao plano xy. Apresentamos uma solução sóliton para o modelo descrito. Obtivemos as soluções das ondas de spin no plano e fora do plano na presença do sóliton. Os desvios de fase para as ondas de spin, devido a interação com o sóliton, foi obtido através do limite assintótico e através da aproximação de Born. A correção quântica para a energia do sóliton foi encontrada, e vimos que o aumento do campo staggered inibe as flutuações quânticas. Consequentemente, com o aumento do campo staggered a correção quântica da energia diminui. Finalmente, mencionamos que a largura de linha EPR prevê um método indireto experimental, para detectar estruturas topológicas, tais como sólitons e vórtices. Os compostos R_2BaNiO_5 e Cu Benzoato, por exemplo, podem ser tratados como um modelo antiferromagneto unidimensional imerso em um campo staggered efetivo forte. Em resumo, sólitons interagindo com ondas de spin em um antiferromagneto bidimensional na presença do campo staggered, resulta numa largura de linha EPR, com uma dependência dominante da temperatura na forma $exp(E_s/T)$. Esta

dependência ocorre apenas na região de flutuação.

Capítulo 5

Conclusões

Nesta tese, estudamos o antiferromagneto bidimensional na presença de um campo magnético staggered. No primeiro trabalho, calculamos a energia em função da temperatura para $g > g_c$ e $g < g_c$. Calculamos também a energia como função do campo staggered para $g > g_c$ e $g < g_c$. Para campo staggered nulo, vimos que o modelo apresenta duas fases distintas. Entretanto, na presença do campo staggered, tanto para $g > g_c$ quanto $g < g_c$, o modelo apresenta gap, portanto concluímos que o sistema apresenta apenas uma única fase quântica. Foi possível notar, que a energia do sistema aumenta com o aumento da temperatura, e também com o aumento do campo staggered.

O segundo trabalho, estudamos a interação entre ondas de spin e o sóliton. Obtivemos os desvios de fase para as ondas de spin, devido a interação sóliton-magnon. Os desvios de fase não dependem do vetor de onda $\vec{k}$, isto é, da energia. Notamos que a aproximação de Born em primeira ordem falha para números quânticos pequenos. Talvez, para números quânticos pequenos seja necessário termos de segunda ordem na aproximação de Born, a fim de melhorarmos os resultados para os desvios de fase. A correção quântica para energia do sóliton mostra, que para campos pequenos as flutuações quânticas são mais fortes. Conseqüentemente a energia do sóliton aumenta por causa da correção quântica. Entretanto, para grandes valores de campos staggered a correção quântica tende a diminuir, isto porque as flutuações quânticas são inibidas. Portanto a energia do sóliton para grandes campos é a própria energia clássica. A largura de linha EPR também foi calculada para o modelo. Vimos que a largura de linha apresenta um comportamento dominante da temperatura da forma

$\exp(E_s/T)$, similar aos encontrados na literatura[45]. Foi possível verificar, que a largura de linha EPR aumenta com o aumento do campo staggered.

Um outro trabalho interessante, que pode ser feito é estudar este modelo na presença de impurezas, neste caso o potencial de impureza pode atrair ou repelir o sóliton. Pretendemos também trabalhar com sistemas finitos, uma vez que nos últimos anos nano-estruturas vem merecendo destaque em sistemas relacionados a matéria condensada. É importante ressaltar que sistemas Hamiltonianos, que descrevem as nano-estruturas, podem ser explorados em várias geometrias diferentes, ou seja, têm uma infinidade de trabalhos, que podem ser feitos nesta linha de pesquisa.

Apêndice A

Desenvolvimento da Equação(4.3)

Neste apêndice fizemos o desenvolvimento da Eq.(4.3) partindo do modelo sigma não-linear, e usando parametrização esférica para o vetor de spin $\vec{n} = S(\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$. Podemos reescrever o Hamiltoniano em termos dos campos θ e ϕ. Assim, temos:

$$H = \frac{J}{2}\int\left[\left(\frac{\partial(\sin\theta\cos\phi)}{c\partial t}\right)^2 + \left(\frac{\partial(\sin\theta\sin\phi)}{c\partial t}\right)^2 + \left(\frac{\partial(\cos\theta)}{c\partial t}\right)^2 \right.$$
$$\left. -(\vec{\nabla}(\sin\theta\cos\phi))^2 - (\vec{\nabla}(\sin\theta\sin\phi))^2 - (\vec{\nabla}(\cos\theta))^2 + h\cos\theta\right] d^2x. \tag{A.1}$$

Fazendo as derivadas temporais obtemos:

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial(\sin\theta\cos\phi)}{c\partial t}\right)^2 &= \left[\cos\theta\cos\phi\frac{1}{c}\frac{\partial\theta}{\partial t} - \sin\theta\sin\phi\frac{1}{c}\frac{\partial\phi}{\partial t}\right]^2 \\ &= \cos^2\theta\cos^2\phi\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)^2 + \sin^2\theta\sin^2\phi\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)^2 \\ &\quad - \cos\theta\sin\theta\cos\phi\sin\phi\frac{1}{c^2}\frac{\partial\phi}{\partial t}\frac{\partial\theta}{\partial t},\end{aligned} \tag{A.2}$$

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial(\sin\theta\sin\phi)}{c\partial t}\right)^2 &= \left[\cos\theta\sin\phi\frac{1}{c}\frac{\partial\theta}{\partial t} + \sin\theta\cos\phi\frac{1}{c}\frac{\partial\phi}{\partial t}\right]^2 \\ &= \cos^2\theta\sin^2\phi\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)^2 + \sin^2\theta\cos^2\phi\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)^2 \\ &\quad + \cos\theta\sin\theta\cos\phi\sin\phi\frac{1}{c^2}\frac{\partial\phi}{\partial t}\frac{\partial\theta}{\partial t},\end{aligned} \tag{A.3}$$

$$\left(\frac{\partial(\cos\theta)}{c\partial t}\right)^2 = \sin^2\theta\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)^2. \tag{A.4}$$

Somando as Eqs.(A.2), (A.3) e (A.4), temos:

$$\left(\frac{\partial(\sin\theta\cos\phi)}{c\partial t}\right)^2 + \left(\frac{\partial(\sin\theta\sin\phi)}{c\partial t}\right)^2 + \left(\frac{\partial(\cos\theta)}{c\partial t}\right)^2 = \frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)^2 + \sin^2\theta\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)^2. \tag{A.5}$$

Analogamente, fazendo as derivadas espaciais, obtemos:

$$(\vec{\nabla}(\sin\theta\cos\phi))^2 = [\cos\theta\cos\phi\vec{\nabla}\theta - \sin\theta\sin\phi\vec{\nabla}\phi]^2 = \cos^2\theta\cos^2\phi(\vec{\nabla}\theta)^2 + \sin^2\theta\sin^2\phi(\vec{\nabla}\phi)^2 - \sin\theta\sin\phi\cos\theta\cos\phi\vec{\nabla}\theta\cdot\vec{\nabla}\phi, \tag{A.6}$$

$$(\vec{\nabla}(\sin\theta\sin\phi))^2 = [\cos\theta\sin\phi\vec{\nabla}\theta + \sin\theta\cos\phi\vec{\nabla}\phi]^2 = \cos^2\theta\sin^2\phi(\vec{\nabla}\theta)^2 + \sin^2\theta\cos^2\phi(\vec{\nabla}\phi)^2 + \sin\theta\sin\phi\cos\theta\cos\phi\vec{\nabla}\theta\cdot\vec{\nabla}\phi, \tag{A.7}$$

$$[\vec{\nabla}(\cos\theta)]^2 = \sin^2\theta(\vec{\nabla}\theta)^2. \tag{A.8}$$

Somando as Eqs.(A.6), (A.7) e (A.8), temos:

$$(\vec{\nabla}(\sin\theta\cos\phi))^2 + (\vec{\nabla}(\sin\theta\sin\phi))^2 + (\vec{\nabla}(\cos\theta))^2 = (\vec{\nabla}\theta)^2 + \sin^2\theta(\vec{\nabla}\phi)^2. \tag{A.9}$$

Substituindo as Eqs.(A.9) e (A.5) na Eq.(A.1), obtemos o desenvolvimento da Eq.(4.3) dada por:

$$H = \frac{J}{2}\int\left[\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)^2 - (\vec{\nabla}\theta)^2 + \sin^2\theta\left[\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)^2 - (\vec{\nabla}\phi)^2\right] + h\cos\theta\right]d^2x. \tag{A.10}$$

Apêndice B

Obtenção das Eqs. de movimento para os campos (θ e ϕ)

Neste apêndice fizemos o desenvolvimento das Eqs.(4.4) e (4.5) de movimento, partindo da equação de Hamilton para campos. Sendo assim, as equações de Hamilton para os campos θ e ϕ são as seguintes:

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial H}{\partial(\partial\theta/\partial t)} - \vec{\nabla}\cdot\left[\frac{\partial H}{\partial(\vec{\nabla}\theta)}\right] - \frac{\partial H}{\partial\theta} = 0, \tag{B.1a}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial H}{\partial(\partial\phi/\partial t)} - \vec{\nabla}\cdot\left[\frac{\partial H}{\partial(\vec{\nabla}\phi)}\right] - \frac{\partial H}{\partial\phi} = 0, \tag{B.1b}$$

Faremos primeiro o desenvolvimento da equação de movimento para o campo θ. Fazendo a derivada temporal do funcional (3.23) temos:

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial H}{\partial(\partial\theta/\partial t)} = \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{J}{c^2}\frac{\partial\theta}{\partial t}\right) = \frac{J}{c^2}\frac{\partial^2\theta}{\partial t^2}. \tag{B.2}$$

Analogamente, faremos a derivada em relação a parte espacial. Assim, temos:

$$\vec{\nabla}\cdot\left[\frac{\partial H}{\partial(\vec{\nabla}\theta)}\right] = J\vec{\nabla}\cdot(\vec{\nabla}\theta) = J\nabla^2\theta, \tag{B.3}$$

e o termo

$$\frac{\partial H}{\partial\theta} = J\cos\theta\sin\theta\left[(\vec{\nabla}\phi)^2 - \frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)^2\right] - Jh\sin\theta. \tag{B.4}$$

Substituindo (B.2), (B.3) e (B.4) em (B.1.a) obtemos a equação de movimento (4.4) para o θ como:

$$\nabla^2\theta - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\theta}{\partial t^2} = \sin\theta\cos\theta\left[(\vec{\nabla}\phi)^2 - \frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)^2\right] + h\sin\theta, \tag{B.5}$$

Agora podemos fazer um desenvolvimento semelhante para equação de movimento do campo ϕ. Assim, fazendo a derivada temporal do funcional (3.23) temos:

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial H}{\partial(\partial\phi/\partial t)} = \frac{\partial}{\partial t}\left(\sin^2\theta\frac{J}{c^2}\frac{\partial\phi}{\partial t}\right) = \sin^2\theta\frac{J}{c^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} + 2\sin\theta\cos\theta\frac{J}{c^2}\frac{\partial\phi}{\partial t}\frac{\partial\theta}{\partial t}. \tag{B.6}$$

Analogamente, faremos a derivada em relação a parte espacial. Assim, temos:

$$\vec{\nabla}\cdot\left[\frac{\partial H}{\partial(\vec{\nabla}\phi)}\right] = J\vec{\nabla}\cdot(\sin^2\theta\vec{\nabla}\phi) = J\sin^2\theta\nabla^2\phi + 2\sin\theta\cos\theta(\vec{\nabla}\phi\cdot\vec{\nabla}\theta), \tag{B.7}$$

e o termo

$$\frac{\partial H}{\partial\phi} = 0. \tag{B.8}$$

Substituindo (B.6), (B.7) e (B.8) em (B.1.b), e dividindo tudo por $J\sin^2\theta$, obtemos a equação de movimento (4.5) para o campo ϕ como:

$$\nabla^2\phi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = -2\cot\theta\left[(\vec{\nabla}\theta\cdot\vec{\nabla}\phi) - \frac{1}{c^2}\frac{\partial\phi}{\partial t}\frac{\partial\theta}{\partial t}\right]. \tag{B.9}$$

Apêndice C

Solução da equação das ondas de spin

Neste apêndice, apresentamos a solução da equação:

$$\nabla^2 B + \left[\frac{\omega_\theta^2}{c^2} - (\vec{\nabla}\phi_s)^2 + \frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial \phi_s}{\partial t}\right)^2 - h\right] B = 0. \tag{C.1}$$

Esta equação é uma equação diferencial parcial homogênea, porque sua solução $B(r,\varphi)$ contém duas variáveis. Primeiramente escrevemos a função $B(r,\varphi) = R(r)T(\varphi)$, onde $R(r)$ e $T(\varphi)$ são funções das variáveis r e φ respectivamente. Substituindo $B(r,\varphi)$, $(\vec{\nabla}\phi_s)^2 = (q/r)^2$ e $(1/c^2)(\partial\phi_s/\partial t)^2 = \Omega^2/c^2$ na equação(C.1) temos:

$$T(\varphi)\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{T(\varphi)}{r}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{R(r)}{r^2}\frac{d^2T(\varphi)}{d\varphi^2} + \left[\frac{\omega_\theta^2}{c^2} - \frac{q^2}{r^2} + \frac{\Omega^2}{c^2} - h\right] R(r)T(\varphi) = 0. \tag{C.2}$$

Multiplicando a equação (C.2) por $r^2/R(r)T(\varphi)$, obtemos:

$$\frac{r^2}{R(r)}\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{r}{R(r)}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{1}{T(\varphi)}\frac{d^2T(\varphi)}{d\varphi^2} + \left[\frac{\omega_\theta^2}{c^2} - \frac{q^2}{r^2} + \frac{\Omega^2}{c^2} - h\right] r^2 = 0. \tag{C.3}$$

O leitor deve ter observado, que estamos resolvendo a equação (C.1), através do processo de separação de variáveis. Sendo assim notamos que o terceiro termo, é apenas função da variável φ. Portanto podemos escrever este termo como:

$$\frac{1}{T(\varphi)}\frac{d^2T(\varphi)}{d\varphi^2} = -n^2, \tag{C.4}$$

e assim obtemos a seguinte equação diferencial

$$\frac{d^2T(\varphi)}{d\varphi^2} + n^2 T(\varphi) = 0. \tag{C.5}$$

Resolvendo esta equação (C.5), obtemos a seguinte solução

$$T(\varphi) = e^{-in\varphi}, \tag{C.6}$$

onde $n = 0, 1, 2, ...$ é o número quântico de momento angular para as ondas de spin. Note que a função $T(\varphi)$ é uma função oscilatória. Agora que encontramos a solução angular $T(\varphi)$, falta apenas resolver a parte radial $R(r)$. Substituindo a relação de dispersão $\omega_\theta^2 = k^2c^2 - \Omega^2 + hc^2$ na equação (C.3) podemos reescrevê-la como:

$$\frac{r^2}{R(r)}\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{r}{R(r)}\frac{dR(r)}{dr} - n^2 + \left[k^2 - \frac{q^2}{r^2}\right]r^2 = 0. \tag{C.7}$$

Multiplicando a equação (C.7) por $R(r)/r^2$, obtemos:

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{dR(r)}{dr} + \left[\frac{k^2r^2 - \mu^2}{r^2}\right]R(r) = 0, \tag{C.8}$$

onde $\mu^2 = n^2 + q^2$. A equação (C.8) é conhecida como a equação de Bessel, cuja solução finita no limite que $r \to 0$ é

$$R(r) = C_1 J_\mu(kr). \tag{C.9}$$

O comportamento assintótico da função $R(r)$ pode ser visto na figura (C.1). A

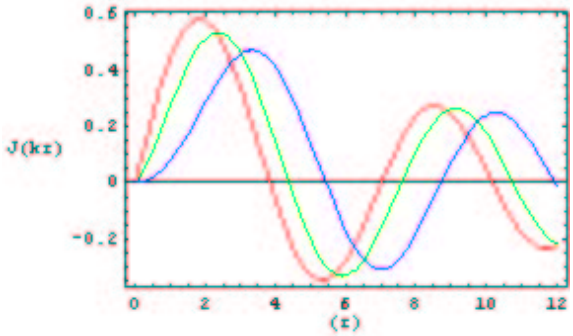

Figura C.1: Estes gráficos foram feitos para um sóliton de carga topológica $q = 1$.

curva vermelha representa um momento angular $n = 0$, a azul um momento angular $n = 1$, e a verde $n = 2$.

Finalmente apresentamos a solução geral da equação (C.1) como:

$$B(r,\varphi) = C_1 J_\mu(kr) e^{-in\varphi}, \tag{C.10}$$

onde $\mu = \sqrt{n^2 + q^2}$ e número quântico angular $(n = 0, 1, 2, 3...)$.

Bibliografia

[1] M. P. P. Fonseca, A. S. T. Pires. *J. Magn. Magn. Matter.*, 297:17–20, 2006.

[2] M. P. P. Fonseca, A. S. T. Pires. *Phys. Rev. B*, 73:12403–12407, 2006.

[3] M. P. P. Fonseca, A. S. T. Pires. *J. Phys. Condens. Matter*, 19:276211, 2007.

[4] J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless. *J. Phys. C*, 6(1181), 1973.

[5] M. Steiner, A. R. Bishop. Nonlinear effects in low-dimensional magnets. pages 787–853.

[6] Robert Eisberg, Robert Resnick. A teoria de schröedinger da mecânica quântica. *Física Quântica*, (Capítulo 5):169, 1979.

[7] Robert Eisberg, Robert Resnick. A teoria de schröedinger da mecânica quântica. *Física Quântica*, (Capítulo 14):618, 1979.

[8] John R. Reitz, Frederick J. Milford, Robert W. Christy. Teoria microscópica do magnetismo. *Fundamentos da Teoria Eletromagnética*, (Capítulo 10):217, 1991.

[9] C. Kittel. *Introduction to Solid State Physics*, (Capítulo 14 e 15), 1976.

[10] Robert Eisberg, Robert Resnick. A teoria de schröedinger da mecânica quântica. *Física Quântica*, (Capítulo 9):387–404, 1979.

[11] Neil W. Ashcroft, N. Deivid Mermin. *Solid State Physics*, (Capítulo 32):693, 1976.

[12] E. Lieb, D. Mattis. *Phys. Rev.*, 125:164, 1962.

[13] E. Lieb, T. D. Schultz, D. C. Mattis. *Ann. Phys.*, 16:407, 1961.

[14] A. M. Kosevich, B. A. Ivanov. *Phys. Reports*, 125(3 e 4):117–238, 1990.

[15] M. E. Gouvêa, G. M. Wysin, A. R. Bishop, F. G. Mertens. *Phys. Rev. B*, 39(16):11840, 1989.

[16] Sílvio R. A. Salinas. Transições de fases e fenômenos críticos:teorias clássicas. *Introdução à Física Estatística*, (Capítulo 12):291, 1999.

[17] N. D. Mermin, H. Wagner. *Phys. Rev. Lett.*, 17:1133, 1966.

[18] N. Papanicolau. *Phys. Rev. B*, 51:15062, 1995.

[19] F. D. M. Haldane. *J. Appl. Phys.*, 57:3359, 1985.

[20] P. Ehrenfest. *Prog. Amsterdam Acad.*, 36:153, 1933.

[21] M. E. Fisher. *Rept. Prog. Phys.*, 30:615, 1967.

[22] Tobochnik, J. e Chester. *Phys. Rev. B*, 20:3761, 1979.

[23] S. Chakravarty. *High-Temperature Superconductivity*, page 136, 1990.

[24] E. Manousakis. *Rev. Mod. Phys.*, 63:1, 1991.

[25] A. F. Andreev, V. I. Marchenko. *Usp. Fis. Nauk*, 130:39, 1980.

[26] V. L. Pokrovskii. *Adv. Phys.*, 28:595, 1979.

[27] S. Chakravarty, B. I. Halperin, D. R. Nelson. *Phys. Rev. Lett.*, 60:1057, 1988.

[28] S. Tyc, B. I. Halperin, S. Chakravarty. *Phys. Rev. Lett.*, 62:835, 1989.

[29] V. Kalmeyer, R. B. Laughlin. *Phys. Rev. Lett.*, 62:2095, 1987.

[30] N. Read, S. Sachdev. *Phys. Rev. Lett.*, 66:1773, 1991.

[31] N. Read, S. Sachdev. *Phys. Rev. Lett.*, 62:1694, 1989.

[32] P. Chandra, P. Coleman, A. I. Larkin. *J. Phys. Condens. Matter*, 2:7933, 1990.

[33] I. Affleck, J. Brad Marston. *Phys. Rev. B*, 37:3774, 1988.

[34] A. V. Chubukov, S. Sachdev, J. Ye. *Phys. Rev. B*, 49:11919, 1994.

[35] M. E. Fisher, M. N. Barber, D. Jasnow. *Phys. Rev. A*, 8:1111, 1973.

[36] B. D. Josephson. *Phys. Rev. Lett.*, 21:608, 1966.

[37] Ian Affleck. *J. Phys. Condens. Matter*, 1:3047–3072, 1989.

[38] E. Ercolessi, G. Morandi, P. Pieri, M. Roncaglia. *Europhys. Lett.*, 52:435, 2000.

[39] A. S. T. Pires. *Solid State Comun.*, 129:297, 2004.

[40] I. Affleck, M. Oshikawa. *Phys. Rev. B*, 60:1038, 1999.

[41] E. Ercolessi, G. Morandi, P. Pieri, M. Roncaglia. *Phys. Rev. B*, 62:14860, 2000.

[42] Subir Sachdev, T. Senthil, R. Shankar. *Phys. Rev. B*, 50:258, 1994.

[43] Mariana Mallard. Modelo sigma não-linear e a integral de caminho. *Dissertação de Mestrado-UFMG*, 2003.

[44] J. F. Currie, J. A. Krumhansl, A. R. Bishop, S. E. Trullinger. *Phys. Rev. B*, 22:477, 1980.

[45] C. E. Zaspel, T. E. Grigereit, J. E. Drumheller. *Phys. Rev. Lett.*, 74:4539, 1995.

[46] D. Huber. *Phys. Rev. B*, page 3180, 1972.

[47] J. P. Rodriguez. *Phys. Rev. B*, 39:2906, 1989.

[48] A. R. Pereira, A. S. T. Pires, M. E. Gouvêa. *Phys. Rev. B*, 51:15974, 1995.

[49] A. R. Pereira, A. S. T. Pires, M. E. Gouvêa. *Phys. Lett. A*, 176:279, 1993.

[50] M. P. P. Fonseca, A. R. Pereira. *Phys. Rev. B*, 66:052102, 2002.

[51] B. A. Ivanov, D. D. Sheka. *Phys. Rev. Lett.*, 72:404, 1994.

[52] M. Oshikawa, I. Affleck. *Phys. Rev. Lett.*, 79:2883, 1997.

[53] M. Sato, M. Oshikawa. *Phys. Rev. B*, 69:054406, 2004.

[54] Y. J. Wang, F. H. L. Essler, M. Fabrizio, A. A. Nersesyan. *Phys. Rev. B*, 66:024412, 2002.

[55] A. Zheludev et al. *Phys. Rev. Lett.*, 80:3630, 1995.

[56] S. Maslov, A. Zheludev. *Phys. Rev. B*, 57:68, 1998.

[57] D. D. Sheka, B. A. Ivanov, F. G. Mertens. *Phys. Rev. B*, 64:024432–1, 2001.

[58] V. M. Agranovich, A. A. Maradudin. Solitons. *Modern Problems in Condensed Matter Sciences*, 17:592–594, 1986.

[59] A. M. Kosevich, V. P. Voronov, I. V. Manzhos. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 84:148, 1983.

[60] L. P. Pitaevskii. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 40:646, 1961.

[61] E. P. Gross. *Phys. Rev.*, 106:161, 1957.

[62] A. R. Pereira, F.O. Coelho, A. S. T. Pires. *Phys. Rev. B*, 54(9):6084, 1996.

[63] F. Waldner. *J. Magn. Magn. Mater.*, (31-34):1203, 1983.

[64] F. Waldner. *J. Magn. Magn. Mater.*, (104-107):793, 1992.

[65] A. A. Belavin, A. M. Polyakov. *JETP Lett.*, 22:245, 1975.

[66] C. E. Zaspel. *Phys. Rev. B*, 48:926, 1993.

[67] T. Asano et al. *Physica B*, 329(31-34):1006, 2003.

[68] K. Kawasaki. *Prog. Theor. Phys.*, 39:285, 1968.

[69] R. Orbach S. Chakravarty,. *Phys. Rev. Lett.*, 64:224, 1990.

[70] A. S. T. Pires A. R. Pereira,. *Phys. Rev. B*, 60:6226–9, 1999.

[71] J. E. R. Costa A. R. Pereira,. *J. Magn. Magn. Mater.*, 162:219, 1996.

[72] A. R. Bishop, G. M. Wysin, C. Kawabata F. G. Mertens,. *Phys. Rev. B*, 39:591, 1989.

[73] S. Chakravarty, B. I. Halperin, D. R. Nelson. *Phys. Rev. B*, 39:2344, 1989.

[74] M. Takahashi. *Phys. Rev. B*, 40:2494, 1989.

Livros Grátis

(http://www.livrosgratis.com.br)

Milhares de Livros para Download:

Baixar livros de Administração
Baixar livros de Agronomia
Baixar livros de Arquitetura
Baixar livros de Artes
Baixar livros de Astronomia
Baixar livros de Biologia Geral
Baixar livros de Ciência da Computação
Baixar livros de Ciência da Informação
Baixar livros de Ciência Política
Baixar livros de Ciências da Saúde
Baixar livros de Comunicação
Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE
Baixar livros de Defesa civil
Baixar livros de Direito
Baixar livros de Direitos humanos
Baixar livros de Economia
Baixar livros de Economia Doméstica
Baixar livros de Educação
Baixar livros de Educação - Trânsito
Baixar livros de Educação Física
Baixar livros de Engenharia Aeroespacial
Baixar livros de Farmácia
Baixar livros de Filosofia
Baixar livros de Física
Baixar livros de Geociências
Baixar livros de Geografia
Baixar livros de História
Baixar livros de Línguas

Baixar livros de Literatura
Baixar livros de Literatura de Cordel
Baixar livros de Literatura Infantil
Baixar livros de Matemática
Baixar livros de Medicina
Baixar livros de Medicina Veterinária
Baixar livros de Meio Ambiente
Baixar livros de Meteorologia
Baixar Monografias e TCC
Baixar livros Multidisciplinar
Baixar livros de Música
Baixar livros de Psicologia
Baixar livros de Química
Baixar livros de Saúde Coletiva
Baixar livros de Serviço Social
Baixar livros de Sociologia
Baixar livros de Teologia
Baixar livros de Trabalho
Baixar livros de Turismo