



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA – CCEN
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

TESE DE DOUTORADO

MODELOS ESFÉRICOS QUÂNTICOS DE SPIN

por

Mário Henrique Bento Gonçalves e Oliveira

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Física.

Banca Examinadora:

Prof. Maurício Domingues Coutinho Filho (Orientador-UFPE)
Prof. Ernesto Carneiro P. Raposo (Co-orientador UFPE)
Prof. Marcelo Andrade de Filgueiras Gomes (UFPE)
Prof. Jairo Rolim Lopes de Almeida (DF - UFPE)
Prof. Silvio Roberto de Azevedo Salinas (IF – USP)
Prof.^a Alba Graciela Rivas de Theumann (IF – UFRGS)

Recife - PE, Brasil
Fevereiro – 2006

Oliveira, Mário Henrique Bento Gonçalves e
Modelos esféricos quânticos de SPIN / Mário
Henrique Bento Gonçalves e Oliveira. - Recife : O
Autor, 2006.
xv, 213 folhas : il., fig., graf.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de
Pernambuco. CCEN. Física, 2006.

Inclui bibliografia e apêndices.

1. Física. 2. Física do estado sólido. 3.
Magnetismo - Propriedades magnéticas. 4. Modelos
esféricos de SPIN. I. Título.

538.955
538.4

CDU (2.ed.)
CDD (22.ed.)

UFPE
BC2006-223



Universidade Federal de Pernambuco
Departamento de Física - CCEN
Programa de Pós-Graduação em Física
Cidade Universitária - 50670-901 Recife PE Brasil
Fone (++ 55 81) 2126-8449/2126-8450 - Fax (++ 55 81) 3271-0359
<http://www.df.ufpe.br/pg> e-mail: posgrad@df.ufpe.br

Parecer da Banca Examinadora de Defesa de Tese de Doutorado

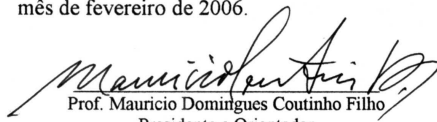
Mário Henrique Bento Gonçalves e Oliveira

MODELOS ESFÉRICOS QUÂNTICOS DE SPIN

A Banca Examinadora composta pelos Professores Maurício Domingues Coutinho Filho (Presidente e Orientador), Ernesto Carneiro P. Raposo (Co-orientador), Marcelo Andrade de Filgueiras Gomes, Jairo Rolim Lopes de Almeida todos da Universidade Federal de Pernambuco, Silvio Roberto de Azevedo Salinas do Instituto de Física da Universidade de São Paulo e Alba Graciela Rivas de Theumann, do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, consideram o candidato:

() Aprovado com Distinção (X) Aprovado () Reprovado

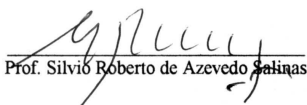
Secretaria do Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal de Pernambuco aos dois dias do mês de fevereiro de 2006.


Prof. Maurício Domingues Coutinho Filho
Presidente e Orientador


Prof. Ernesto Carneiro P. Raposo
Co-orientador


Prof. Marcelo Andrade de Filgueiras Gomes


Prof. Jairo Rolim Lopes de Almeida


Prof. Silvio Roberto de Azevedo Salinas


Prof. Alba Graciela Rivas de Theumann

DEDICATÓRIA

Dedico esta Tese a minha bisavó Maria e meu bisavô Manoel.

AGRADECIMENTOS ESPECIAIS

Agradeço a Santíssima Trindade por esta enorme oportunidade, que é a vida.

Agradeço a meus pais, meus avós, meus tios, meus irmãos, meus primos e amigos; enfim, agradeço a toda a minha família que sempre confiou e esperou muito de mim.

Agradeço ao Prof. Maurício Coutinho pela orientação cuidadosa e amiga.

Agradeço ao Prof. Ernesto Rapôso pela ajuda amiga e essencial nos pontos chave da tese.

Agradeço aos colegas de trabalho: Renê Montenegro, Carlindo Vitoriano, Lucian Bejan, Sérgio Azevedo, Marcelo Sardelich, Carlos Alberto, Antônio Sandoíldo, Francisco Fidelis, Mardson, Gustavo Camelo, Matias Rufino, Janete, Alexandre Carvalho, Cláudio Furtado, Leonardo Viana e Diego Cortês pelos comentários e socorros amigos e valiosos.

Agradeço a Pedro Hugo, Ailton Macedo, Cibelle Campos, Daniela Collier, José Ferraz, Cássia Donato, Priscila Albuquerque pelas conversas amistosas durante o lanche.

Agradeço pela amizade sempre presente dos meus colegas de graduação: Antônio de Pádua, Mércia Liane, Renato Soares, Charles, Fernando Parísio e Laércio Dias.

Agradeço aos Professores: José Tabosa, Flávio Aguiar, Rios Leite, Francisco Brad, Marcelo Gomes, Antônio Azevedo, Sérgio Coutinho, Antônio Murilo, Lúcio Accioli, Fernando Moraes por toda a contribuição dada a minha formação.

Agradeço aos meus amigos: Carlos André, Glauco Maciel, Edilson Falcão, Frederico Toscano, Fernando Randau; pela amizade e conversas valiosas sobre música.

Agradeço aos médicos Gilson Augustinho e Shirley Freitas pela ajuda terapêutica.

Agradeço aos funcionários: João Carlos, Blênio, Joaquim, Ivo, Humberto, Joana, Ana e Paula Frassinete pelo apoio logístico e pela amizade.

Agradeço ao Capes, CNPq e Facepe pelo apoio financeiro e confiança.

Resumo

Desde a descoberta de Stanley de que o modelo esférico é o limite de dimensionalidade de spin infinita do modelo de Heisenberg clássico, este tem atraído mais atenção do que meramente ser uma alternativa ao modelo de Ising. Como é bem conhecido, o modelo esférico clássico contradiz a terceira lei da Termodinâmica. Este defeito pode ser corrigido através de uma quantização do modelo. Nesta tese, escolhemos a proposta de Obermair que permite o controle das flutuações quânticas através do parâmetro g . Em particular, utilizamos o modelo esférico quântico de spin como laboratório da influência das flutuações quânticas sobre o comportamento magnético e termodinâmico da rede hipercúbica d -dimensional e das cadeias AB e AB_2 antiferromagnéticas. A cadeia AB_2 tem como motivações experimentais polímeros ferrimagnéticos e compostos de oxocupratos, dentre outras.

Através da análise de observáveis como magnetização, susceptibilidade, comprimento de correlação e funções de correlação obtivemos no caso da rede hipercúbica que o modelo apresenta quebra espontânea de simetria a temperatura finita e para o estado fundamental ($T = 0$). Através de cálculos detalhados dos observáveis mencionados acima pudemos obter os expoentes críticos associados às transições de fase térmica e quântica ($T = 0$) da rede hipercúbica d -dimensional. Verificamos também que o calor específico em baixas temperaturas não viola a terceira lei da termodinâmica, e também confirma que o sistema possui um “gap” finito no espectro para qualquer g finito. Para o caso da cadeia AB , o estado fundamental antiferromagnético é obtido com a presença, e posterior anulamento, do campo magnético *staggered* e nas ausências de flutuações térmicas e quânticas e de campo uniforme. Por outro lado, o modelo esférico na cadeia AB_2 apresenta estado fundamental

ferrimagnético para $g = T = h = 0$ mesmo na ausência de campo *staggered*. Entretanto, apesar das cadeias AB e AB_2 não apresentarem transição de fase térmica ou quântica, os valores locais de spin da cadeia AB podem apresentar um comportamento antiferromagnético de curto alcance para flutuações térmicas e quânticas pouco intensas e baixos valores do campo magnético uniforme quando comparados com os do campo magnético *staggered*; no caso da cadeia AB_2 , destacamos comportamento ferrimagnético de curto alcance para fracas flutuações quânticas e térmicas e campo magnético baixo. Esses comportamentos antiferromagnético e ferrimagnético desaparecem com o aumento das flutuações térmicas e quânticas ou da presença do campo magnético. Tais resultados foram confirmados pelo comportamento assintótico das funções de correlação.

Finalmente, obtivemos que os comportamentos em baixas temperaturas do modelo esférico quântico podem ser comparados com aquele da cadeia Heisenberg quântica XXZ , através da análise de observáveis como entropia e calor específico. Além disso o calor específico demonstra que o modelo possui um “gap” finito no espectro para qualquer g finito, fato este confirmado pelo decaimento exponencial com a distância das funções de correlação. A termodinâmica de altas temperaturas do modelo esférico quântico se assemelha à de um oscilador harmônico quântico, cuja frequência depende da temperatura e do parâmetro quântico g .

Abstract

Since Stanley's discovery that the spherical model is the limit of infinite spin dimensionality of the Heisenberg classical model, it has attracted more attention than merely being an alternative to the Ising model. It is well known that the classical spherical model contradicts the third law of thermodynamics. However, this drawback can be fixed through a suitable quantization of the model. In this thesis we choose the proposal by Obermair that allows the control of quantum fluctuations through the parameter g . In particular, we use the quantum spherical spin model as a laboratory for studying the influence of quantum fluctuations on the thermodynamic behavior of the hypercubic d -dimensional lattice and the AB and AB_2 antiferromagnetic chains. The AB_2 chains have experimental motivation on ferrimagnetic polymers and oxocuprates, among others.

Through the analysis of observables such as magnetization, susceptibility, correlation length and correlation functions we have obtained, in the case of hypercubic lattices, that the model presents spontaneous symmetry breaking at finite temperature, as well as at the ground state ($T = 0$). Detailed calculation of the mentioned observables has provided the critical exponents associated with the thermal and quantum ($T = 0$) phase transitions. We have also verified that the low-temperature specific heat does not violate the third law of thermodynamics and also confirms that the system presents a finite gap in the spectrum for any finite g . For the AB chain, the antiferromagnetic ground state is obtained in the presence of a nullifying staggered magnetic field and in the absence of thermal and quantum fluctuations as well as uniform field.

On the other hand, the spherical model on the AB_2 chain presents ferrimagnetic

ground state at $g = T = h = 0$ even in the absence of staggered field. However, although AB and AB_2 chains do not present thermal or quantum phase transition, the local spin average of the AB chain may display short-range antiferromagnetic behavior for weak thermal and quantum fluctuations and low uniform magnetic field when compared to the staggered one; conversely, in the AB_2 case, we have found a short-range ferrimagnetic behavior for weak thermal and quantum fluctuation and low magnetic field. These antiferro and ferrimagnetic behaviors disappear for more intense thermal and quantum fluctuations and in the presence of a field. Such results have been confirmed by the asymptotic behavior of the correlation functions.

Finally, we have obtained that the low-temperature behaviors of the quantum spherical models can be compared to that of the XXZ quantum Heisenberg chain, through the analysis of the specific heat and entropy. Moreover, the specific heat demonstrates that the model displays a finite gap in the spectrum for any finite g , in agreement with the exponential decay of the correlation functions. The high-temperature thermodynamics of the quantum spherical model is similar to that of the quantum harmonic oscillator, whose frequency depends on the temperature and the quantum parameter g .

Lista de Figuras

2.1	Representação esquemática do modelo esférico. Os pontos pretos representam duas variáveis de spin de Ising e o círculo duas variáveis de spin do modelo esférico.	7
4.1	Representação esquemática de um estado antiferromagnético da cadeia AB . $d/2 \equiv 1/2$ é a constante de rede da cadeia.	64
4.2	(a) Spin médio nos sítios $A(-\bigcirc-)$ e $B(-\square-)$ e (b) magnetização da célula em função de h/J para $g = 0.05J$, $T = 0$ e $h' = J$	76
4.3	Cumulante entre spins A em células primeiro-vizinhas [sítios $A(-\bigcirc-)$, sítios $B(-\bullet-)$ e sítios A e $B(-\square-)$] (a) em função de h/J para $g = T = 0.05J$ e $h' = J$ e (b) em função de g/J para $T = h = 0.05J$ e $h' = J$	78
4.4	Valor absoluto do cumulante entre spins nos sítios $A(-\bigcirc-)$, sítios $B(-\bullet-)$ e entre spins em sítios A e $B(-\square-)$ em função da distância em unidades de d ; para $g = T = 0.05J$ e $h' = J$. As linhas retas indicam o decaimento exponencial.	86

4.5	(a) Entropia em função de T/J para $g = 0.1J$ e $h = h' = 0$, e (b) calor específico em função de T/J para $g = 0.1J$ e $h = h' = 0$ (gráfico inscrito $g = h = h' = 0$).	96
4.6	Espaço de parâmetros do modelo Heisenberg quântico unidimensional. Δ representa a anisotropia do modelo em unidades de energia ($J = 1$), $\Delta = 1$ corresponde ao Heisenberg antiferromagnético quântico isotrópico, $\Delta = 0$ corresponde ao modelo XY e $\Delta = -1$ corresponde ao modelo Heisenberg quântico ferromagnético, $\Delta = \infty$ corresponde ao modelo de Ising antiferromagnético e $\Delta = -\infty$ corresponde ao modelo de Ising ferromagnético. H_0 é o campo magnético externo em unidades de energia. Na região A o calor específico em baixas temperaturas tem um comportamento que indica a presença de um “gap” no espectro do modelo, valendo o mesmo para a região C e linha d . Na região B o calor específico se anula linearmente com a temperatura. Nas linhas b e c o calor específico se anula como $C \sim T^{1/2}$, indicando uma dispersão quadrática e sem gap. Na linha e e no ponto P o calor específico se anula linearmente com a temperatura. Na linha a temos dois comportamentos: similar ao da região A para pontos à esquerda do ponto R e $C \sim T^{1/2}$ para pontos à direita do ponto R . Diagrama obtido da Ref. [44].	101
5.1	Representação esquemática de um estado ferrimagnético na cadeia AB_2 . Consideramos $d = 1$ neste capítulo.	104
5.2	Frequências naturais do modelo para $g = T = 0.05J$ e $h = 0.05J$	108
5.3	Potencial químico em função de: (a) h/J para $g = T = 0.05J$ e (b) g/J para $T = h = 0.05J$	119

5.4	Potencial químico em função de g para $T = h = 0.05J$	121
5.5	(a) Magnetização da célula e (b) spin médio nos sítios A ($-\bigcirc-$) e $B_{1,2}$ ($-\square-$) em função de h/J , para $g = 0.05J$ and $T = 0.05J$	131
5.6	(a) Magnetização da célula para $g = T = J$ em função de h/J , para $g = T = J$. (b) Spin médio no sítio A , $\langle S_A \rangle$ ($-\bigcirc-$) e spin médio no sítio $B_{1,2}$, $\langle S_B \rangle$ ($-\square-$) em função de h/J , para $g = T = J$	132
5.7	(a) Magnetização da célula em função de g/J para $T = h = 0.05J$. (b) Spin médio em um sítio A $\langle S_B \rangle$ ($-\bigcirc-$), spin médio em um sítio $B_{1,2}$ em função de g/J $\langle S_B \rangle$, para $T = h = 0.05J$	134
5.8	Diagramas de fase da superfície $\langle S_A \rangle = 0$ que delimita a mudança de sinal nos sítios A (para $\mu = 2J$) : (a) T/J em função de h/J para $g = 0.05J$ e (b) g/J em função de h/J para $T = 0.05J$	140
5.9	(a) Susceptibilidade da célula em função de g/J , para $T = h = 0.05J$ e para $T = h = 0$ no gráfico inscrito. (b) Susceptibilidade da célula em função de T/J , para $g = h = 0.05J$ e para $g = h = 0$ no gráfico inscrito.	143
5.10	Susceptibilidade da célula em função de h/J , para $g = T = 0.05J$ e para $g = T = 0$ no gráfico inscrito.	146

- 5.11 Cumulante entre spins B_1 e B_2 na mesma célula ($-\bullet-$) e entre spins em células primeiro-vizinhas [sítios A ($-\triangle-$), $B_{1,2}$ ($-\bigcirc-$), e A com $B_{1,2}$ ($-\square-$)]: (a) em função de g/J , para $T = 0.05J$ e $h = 0.05J$; (b) em função de h/J , para $g = 0.05J$ e $T = 0.05J$. Os gráficos inscritos demonstram a convergência para limites paramagnéticos dos cumulantes multiplicados por (a): $(g/J)^2$ (os três primeiros cumulantes) e $(g/J)^3$ (último cumulante); e (b): $(h/J)^{5/2}$ (os três primeiros cumulantes) e $(h/J)^{7/2}$ (último cumulante). 154
- 5.12 Valor absoluto dos cumulantes entre spins nos sítios A ($-\triangle-$), sítios $B_{1,2}$ ($-\bigcirc-$), sítios B_1 e B_2 ($-\bullet-$); e sítios A e $B_{1,2}$ ($-\square-$) em função da distância (em unidades de d); para $g = 0.05J$, $T = 0.05J$ e $h = 0.05J$. As linhas retas indicam o decaimento exponencial. . . . 157
- 5.13 Correlação entre spins B_1 e B_2 na mesma célula ($-\bullet-$) e entre spins em células primeiro-vizinhas [sítios A ($-\triangle$), $B_{1,2}$ ($-\bigcirc-$), e A com $B_{1,2}$ ($-\square-$)]: (a) em função de g/J , para $T = h = 0.05J$; (b) em função de h/J , para $g = T = 0.05J$ 159
- 5.14 (a) Comprimento de correlação em função de g/J para $T = h = 0.05J$ e para $T = h = 0$ no gráfico inscrito. (b) Comprimento de correlação em função de T/J para $g = h = 0.05J$ e para $g = h = 0$ no gráfico inscrito. 160
- 5.15 Comprimento de correlação em função de h/J , para $g = T = 0.05J$ e para $g = T = 0$ no gráfico inscrito. 162
- 5.16 (a) Entropia e (b) calor específico em função de T , para $g = 0.1J$ e $h = 0$ (gráfico inscrito: $g = h = 0$). 166

Sumário

Folha de rosto	ii
Dedicatória	iii
Agradecimentos Especiais	iv
Resumo	vi
Abstract	viii
Lista de Figuras	x
1 Introdução	1
2 Modelo Esférico Clássico Ferromagnético em Redes Hipercúbicas	6
2.1 Introdução	6
2.2 Modelo Esférico	9
2.2.1 Energia Livre e Condição Esférica	9
2.2.2 Potencial químico	13
2.3 Magnetização e Susceptibilidade	16
2.3.1 Susceptibilidade	19
2.4 Funções de Correlação	20
2.4.1 Comprimento de correlação	24
2.5 Entropia e Calor Específico	25

3	Modelo Esférico Quântico de Spin em Redes Hipercúbicas	28
3.1	Introdução	28
3.2	Modelo Esférico Quântico	29
3.3	Energia Livre e Condição Esférica	29
3.3.1	Potencial Químico	37
3.4	Magnetização e Susceptibilidade	42
3.4.1	Susceptibilidade	48
3.5	Funções de Correlação	51
3.5.1	Comprimento de Correlação	56
3.6	Entropia e Calor Específico	57
4	Modelo Esférico Quântico Antiferromagnético na Cadeia AB	63
4.1	Introdução	63
4.2	Modelo Esférico Antiferromagnético	64
5	Modelo Esférico Quântico na Cadeia AB_2	102
5.1	Introdução	102
5.2	Modelo Esférico	103
5.2.1	Diagonalização, Energia Livre e Condição Esférica	103
5.2.2	Potencial Químico	112
5.3	Magnetização e Susceptibilidade	128
5.3.1	Susceptibilidade	142
5.4	Funções de Correlação	152
5.4.1	Comprimento de Correlação	159
5.5	Entropia e Calor Específico	166
6	Conclusões e Perspectivas	171

A	Modelo Biesférico Quântico na Cadeia AB	176
B	Transformações de Bogoliubov	197
B.1	Modelos tipo A	197
B.1.1	Modelo A1	197
B.1.2	Modelo A2	199
B.2	Modelo tipo B	201
	Referências Bibliográficas	208

Capítulo 1

Introdução

O modelo esférico foi proposto por Berlin e Kac [1] como uma alternativa ao modelo de Ising. Entretanto, a descoberta de Stanley [2] de que o modelo esférico é o limite de um modelo de Heisenberg clássico com variáveis de spin de dimensão infinita tem atraído um interesse extra para o modelo esférico. De fato, como o modelo esférico é solúvel, ele tem sido utilizado para o entendimento de sistemas tais como antiferromagnetos [3], incluindo interações competitivas [4] e pontos de Lifshitz [5], fenômenos críticos, incluindo sistemas com interações de longo alcance [6,7] e considerações topológicas [8], efeitos de spin e carga no contexto do modelo de Hubbard [9], e sistemas desordenados [10], incluindo vidros de spin [11] e modelos de campo aleatório [12].

No capítulo 2, vamos apresentar o modelo esférico clássico ferromagnético em redes hipercúbicas, que foi a proposta inicial de Berlin e Kac [1]. Inicialmente vamos discutir, resumidamente, o procedimento necessário para obter a energia livre do modelo esférico, seguindo os argumentos de Joyce [6]. Em seguida, vamos obter a equação para o potencial químico, que representa a restrição esférica. De acordo

com Pathria [13], vamos reescrever a equação de uma maneira apropriada para comparações nos próximos capítulos. Podemos obter soluções da equação para o potencial químico em diversos regimes de interesse, conforme indicado por Thompson [7]. Com estas soluções, podemos obter o comportamento crítico de diversos observáveis, tais como magnetização, susceptibilidade, e calor específico em dimensões onde existe uma transição de fase, isto é $d = 3, 4, \dots$. Através destes cálculos podemos obter, com o objetivo de comparações futuras, os conhecidos expoentes críticos do modelo esférico clássico d -dimensional.

Como é bem conhecido, o modelo esférico clássico contradiz a terceira da lei da termodinâmica em baixas temperaturas [1]. Este defeito pode ser corrigido através de uma versão quântica do modelo. Existem diversas maneiras de quantizar o modelo esférico; a nossa escolha recaiu sobre a proposta de Obermair que é a mais utilizada [14–17, 19]. Esta quantização permite, entre outras coisas, o controle das flutuações quânticas através de um parâmetro (g). O modelo esférico quântico tem sido utilizado para estudar sistemas como vidros de spin [14], propriedades termodinâmicas [15], transições de fase quânticas em redes hipercúbicas [17], incluindo efeitos de tamanho finito [18] e campo aleatório [19] e acoplamentos ferromagnéticos com campo transversal [16]. No capítulo 3, vamos apresentar o modelo esférico quântico ferromagnético em redes hipercúbicas. Através da diagonalização do Hamiltoniano do modelo, obtivemos a energia livre de Helmholtz e a equação para o potencial químico. Através da solução da equação para o potencial químico, podemos obter o comportamento crítico do modelo esférico quântico tanto para transições térmicas ($d = 3, 4, \dots$) como quânticas ($d = 2, 3, \dots$). Através da análise do comportamento crítico de observáveis como magnetização, susceptibilidade, comprimento de correlação e calor específico reobteremos os expoentes crítico obtidos

por Vojta [17] através de um cálculo mais detalhado e preciso dos observáveis mencionados anteriormente. Salientamos que o estudo das transições quânticas tem atraído bastante interesse atualmente, tanto da perspectiva teórica como da experimental. Do ponto de vista teórico, temos a introdução de novos conceitos, tais como, temperatura de coerência, no contexto de férmions pesados; comportamento diferente de um líquido de Fermi, em sistemas eletrônicos na região crítica quântica; e transições de primeira ordem no estado fundamental; entre outros. Sob a ótica experimental, o estudo de sistemas em escalas próximas do tamanho atômico, tais como, nanotecnologia e computação quântica, ressalta a importância das transições a temperatura nula. Além disso, também apresentaremos o cálculo das funções de correlação e analisaremos o comportamento do modelo em baixas temperaturas, verificando a correção da discrepância do modelo esférico clássico em relação à terceira lei da termodinâmica.

No capítulo 4, vamos estudar com mais detalhes o comportamento do modelo esférico quântico antiferromagnético em uma dimensão, onde o modelo não apresenta transição de fase térmica ($T \neq 0$) ou quântica ($g \neq 0$). Apesar disso, observamos que através da presença de um campo magnético *staggered* e da ausência de campo magnético e de flutuações térmicas e quânticas o modelo apresenta quebra espontânea de simetria. Este resultado foi obtido através da análise de observáveis como magnetização, susceptibilidade, comprimento de correlação e funções de correlação. Ressaltamos ainda que o comportamento do modelo esférico quântico em baixas temperaturas permite comparações com o modelo de Heisenberg anisotrópico (modelo XXZ), através da análise de observáveis como o calor específico, entropia e funções de correlação.

No capítulo 5, vamos apresentar o modelo esférico antiferromagnético quântico na

cadeia AB_2 , que constituiu o objetivo inicial desta tese. As motivações experimentais da cadeia AB_2 incluem [20] polímeros inorgânicos ferrimagnéticos, nos quais os sítios A (B) podem representar um átomo de metal (ligante) [veja Silvestre e Hoffman na Ref. [20] para possíveis realizações] e compostos de oxocupratos, onde os sítios A (B) representam átomos de cobre em uma cadeia trimérica [veja Drillon et al. na Ref. [20]]. Apesar de todos os esforços empreendidos em estudos sobre a cadeia AB_2 no contexto de modelos tais como Hubbard e $t - J$ [24], Heisenberg quântico [25], Heisenberg clássico e Ising [26], a influência das flutuações quânticas quando comparadas com efeitos de temperatura e campo magnético ainda não foi bem compreendida. Nosso objetivo é usar o modelo esférico quântico como laboratório para o estudo da influência das flutuações quânticas, através do parâmetro g , no comportamento magnético da cadeia AB_2 . Obtivemos que o modelo esférico apresenta uma transição de fase apenas para o estado fundamental do modelo esférico clássico a campo nulo. No entanto, dependendo da maneira escolhida para atingir este único ponto crítico ($g = T = h = 0$) temos comportamentos diversos de observáveis tais como a susceptibilidade e o comprimento de correlação. O aumento das flutuações térmicas e/ou quânticas faz com que a magnetização do modelo apresente um comportamento tipicamente paramagnético. No entanto, para flutuações térmicas e quânticas pouco intensas os valores locais de spin podem apresentar comportamento ferrimagnético de curto alcance. O comportamento ferrimagnético é caracterizado por um aumento rápido da magnetização da célula para baixos valores do campo magnético. Este comportamento ferrimagnético desaparece com o aumento da intensidade das flutuações térmicas e/ou quânticas ou do campo magnético, fato este confirmado pela análise dos comportamentos assintóticos das funções de correlação. Finalmente, analisamos o comportamento do modelo esférico em baixas

e altas temperaturas através da análise de observáveis como o calor específico e a entropia.

A comparação com os resultados dos capítulos 3 e 4 para os modelos esféricos quânticos ferro e antiferromagnético na cadeia AB , respectivamente, permite observar algumas similaridades, tal como a eliminação da discrepância com a terceira lei da termodinâmica em baixas temperaturas, ao lado de distinções relevantes. Por exemplo, enquanto no modelo esférico quântico antiferromagnético AB a quebra espontânea de simetria só ocorre na presença de um campo magnético *staggered* e ausência de campo magnético uniforme, bem como de flutuações térmicas e quânticas, observamos que a topologia AB_2 induz um ordenamento ferrimagnético de longo alcance no estado fundamental sem flutuações quânticas e sem campo magnético uniforme *mesmo na ausência de campo magnético staggered*. Além disso, e também em contraste com os modelos esféricos quânticos AB , obtivemos que uma ordem ferrimagnética de curto alcance se sustenta na região de baixos campos e flutuações térmicas e quânticas pouco intensas do espaço de parâmetros $\{g, T, h\}$, conforme indicado pela análise das funções de correlação e das médias locais de magnetização.

Capítulo 2

Modelo Esférico Clássico Ferromagnético em Redes Hipercúbicas

2.1 Introdução

O modelo esférico surgiu com a proposta alternativa de Berlin e Kac ao modelo de Ising para spins [1]. Em 1947, antes de propor o modelo esférico, Kac tentou substituir as variáveis discretas de Ising ($\pm 1/2$) por variáveis contínuas. Esta tentativa, que passou a ser conhecida como modelo Gaussiano, possui uma temperatura crítica para qualquer dimensão. Entretanto a função de partição do modelo não existe para temperaturas menores que a temperatura crítica. Para evitar este problema Kac permitiu que as variáveis fossem reais, mas impôs que as variáveis de spin ficassem restritas a uma esfera cuja dimensão é o número de variáveis de spin do

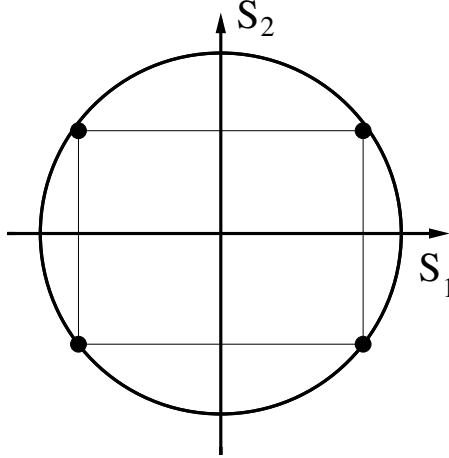


Figura 2.1: Representação esquemática do modelo esférico. Os pontos pretos representam duas variáveis de spin de Ising e o círculo duas variáveis de spin do modelo esférico.

modelo:

$$\sum_i S_i^2 = \frac{N}{4}, \quad (2.1)$$

onde N é o número de spins do modelo e i indexa variáveis de spin diferentes. Com este modelo Berlin e Kac [1] conseguiram uma solução exata com temperatura crítica a partir da dimensão $d = 3$. Com isto, obteve-se uma alternativa ao modelo de Ising, que possui solução exata apenas em $d = 2$ [27] na ausência de campo, e soluções aproximadas em dimensões superiores.

Em uma tentativa de simplificar a matemática apresentada por Berlin e Kac, Lewis e Wannier [28] introduziram o modelo esférico médio. Neste modelo as variáveis obedecem a uma restrição média:

$$\sum_i \langle S_i^2 \rangle = \frac{N}{4}. \quad (2.2)$$

Desta forma o modelo esférico médio tem uma relação com o modelo esférico parecida com a que o ensemble grã-canônico tem com o ensemble canônico. Basta perceber que a soma da Eq. (2.2) se parece com uma restrição ao número de partículas, tanto que Lewis e Wannier introduziram um potencial químico (μ) associado a esta restrição. Deste ponto em diante sempre estamos nos referindo ao modelo esférico médio como modelo esférico. É importante destacar que o modelo esférico médio apresenta algumas discrepâncias em relação ao modelo esférico, sendo a mais importante o fato do modelo esférico médio só obedecer o teorema de flutuação-dissipação [29] mediante cálculo cuidadoso da susceptibilidade e das funções de correlação.

Apesar de ter sido criado como uma alternativa ao modelo de Ising, o modelo esférico apresenta semelhanças com o modelo Heisenberg. O fato que estabeleceu isto foi a descoberta de Stanley [2] de que o modelo de Heisenberg com dimensão $2S + 1 = \infty$ é equivalente ao modelo esférico. Este fato atraiu muito interesse para o modelo esférico, já que ele pode ser entendido como a primeira aproximação de uma expansão $1/S$ de uma solução obtida a partir do modelo de Heisenberg. Como o modelo esférico é exatamente solúvel, ele tem sido utilizado para entender a termodinâmica de diversos sistemas, tais como antiferromagnetos [3], incluindo interações competitivas [4] e pontos de Lifshitz, fenômenos críticos, incluindo sistemas com interações de longo de longo alcance [6, 7], análises topológicas [8], efeitos de spin e carga no contexto do modelo de Hubbard [9], sistemas desordenados [10] tais como vidros de spin com interação de alcance infinito [11] e modelos de campo aleatório [12].

Afora o interesse peculiar do modelo esférico no que diz respeito ao estudo de propriedades magnéticas, existe o interesse pela técnica de “esfericalização” como um

meio de entender o mecanismo termodinâmico de uma transição de fase. Como exemplo temos estudos teóricos sobre interações dipolares [30], teoria de eletrólitos [31], gás esférico na rede [32] e generalizações do modelo esférico [33].

2.2 Modelo Esférico

2.2.1 Energia Livre e Condição Esférica

Vamos considerar o caso em que as variáveis de spin estão localizadas em sítios de uma rede hipercúbica d dimensional. A posição de cada sítio é expressa por $\vec{R} = n_1 \vec{e}_1 + \dots + n_d \vec{e}_d$, onde $\{\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_d\}$ é a base canônica de $\mathbf{R}^d$ e $\{n_1, \dots, n_d\}$ pertencem a $\mathbf{Z}$.

Neste capítulo vamos apresentar alguns resultados para o caso de interações ferromagnéticas de primeiros vizinhos. Estes resultados já são bem conhecidos na literatura [6, 7] e irão servir como referência ao longo da tese. Considere que o valor da interação ferromagnética entre primeiros vizinhos é $-J$, $J > 0$, e que o sistema está submetido a um campo magnético uniforme e constante H ou em unidades de energia $h = \mu_{eff} H$, onde μ_{eff} é o momento magnético efetivo de Bohr. Sendo a variável de spin em um sítio $\vec{R}$ descrita por $S_{\vec{R}}$, o Hamiltoniano do sistema é dado por

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle \vec{R}, \vec{R}' \rangle} S_{\vec{R}} S_{\vec{R}'} - h \sum_{\vec{R}} S_{\vec{R}} + \mu \sum_{\vec{R}} (S_{\vec{R}}^2 - \frac{1}{4}), \quad (2.3)$$

onde $\langle \dots \rangle$ indica uma soma sobre primeiros vizinhos e μ é o potencial químico associado à restrição esférica:

$$\sum_{\vec{R}} S_{\vec{R}}^2 = \frac{N}{4}, \quad (2.4)$$

e N é o número de sítios da rede.

Seguindo os argumentos de Joyce [6], considere a transformada de Fourier da rede hipercúbica:

$$S_{\vec{R}} = 1/\sqrt{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} S_{\vec{k}}, \quad (2.5)$$

onde $\vec{k} = \sum_{i=1}^d (2\pi/N) v_i \vec{e}_i$, $v_1, \dots, v_d = 0, \dots, N-1$ e a unidade de rede (distância entre primeiros vizinhos) é $a = 1$. Note ainda que $S_{-\vec{k}} = S_{\vec{k}}^*$, já que as variáveis de spin ($S_{\vec{R}}$) são reais. Substituindo no Hamiltoniano, Eq. (2.3), obtemos

$$H = - \sum_{\vec{k}} J_{\vec{k}} S_{-\vec{k}} S_{\vec{k}} - h\sqrt{N} S_0 + \mu \sum_{\vec{k}} S_{-\vec{k}} S_{\vec{k}} - \frac{N}{4} \mu, \quad (2.6)$$

onde $J_{\vec{k}} = \sum_{i=1, \dots, d} J \cos k_i$. Usando $S_{-\vec{k}} = S_{\vec{k}}^*$ e $J_{\vec{k}} = J_{-\vec{k}}$ podemos reescrever o Hamiltoniano como

$$H = 2 \sum_{\vec{k} > 0} (\mu - J_{\vec{k}}) |S_{\vec{k}}|^2 + (\mu - J_0) |S_0|^2 - h\sqrt{N} S_0 - \frac{N}{4} \mu, \quad (2.7)$$

onde a soma é feita de maneira que se $+\vec{k}$ está incluído então $-\vec{k}$ não está. Agora definimos novas variáveis reais $(x_{\vec{k}}, y_{\vec{k}})$ através das seguintes definições:

$$\begin{aligned} S_{\vec{k}} &= (1/\sqrt{2})(x_{\vec{k}} + iy_{\vec{k}}), \quad \vec{k} \neq 0, \\ S_0 &= x_0, \quad y_0 = 0. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Após esta transformação o Hamiltoniano, Eq. (2.3), assume a seguinte forma diagonal:

$$H = \sum_{\vec{k} > 0} (\mu - J_{\vec{k}})(x_{\vec{k}}^2 + y_{\vec{k}}^2) - h\sqrt{N} x_0 + (\mu - J_0) x_0^2 - \frac{N}{4} \mu. \quad (2.9)$$

Nesta forma podemos calcular a função de partição do sistema :

$$Z = \int \prod_{\vec{R}} dS_{\vec{R}} e^{-\beta H}, \quad (2.10)$$

onde $\beta = 1/T$, pois assumimos $k_B = 1$. Antes do cálculo note que para diagonalizar o Hamiltoniano, Eq. (2.3), fizemos uma sequência de transformações unitárias: $\prod_{\vec{R}} dS_{\vec{R}} = \prod_{\vec{k}} dS_{\vec{k}} = \prod_{\vec{k}>0} dS_{\vec{k}} dS_{\vec{k}}^* dS_0 = \prod_{\vec{k}>0} dx_{\vec{k}} dy_{\vec{k}} dx_0$. Então, a função de partição pode ser escrita como

$$Z = \int \prod_{\vec{k}>0} dx_{\vec{k}} dy_{\vec{k}} dx_0 e^{-\beta H}. \quad (2.11)$$

Finalmente, com o uso da identidade $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2+bx} = \sqrt{\pi/a} e^{b^2/4a}$, a função de partição resulta:

$$Z = \prod_{\vec{k}} \sqrt{\frac{\pi}{\beta(\mu - J_{\vec{k}})}} \exp\left(\frac{\beta N h^2}{4(\mu - J_0)} + \frac{\beta \mu N}{4}\right). \quad (2.12)$$

Em consequência, a energia livre de Helmholtz se escreve:

$$F = \frac{T}{2} \sum_{\vec{k}} \ln\left(\frac{\mu - J_{\vec{k}}}{\pi T}\right) - \frac{N h^2}{4(\mu - J_0)} - \frac{N \mu}{4}. \quad (2.13)$$

Usando a energia livre acima podemos escrever a restrição esférica, Eq. (2.4), como $\partial F / \partial \mu = 0$:

$$\sum_{\vec{k}} \frac{T}{2(\mu - J_{\vec{k}})} + \frac{N h^2}{4(\mu - J_0)^2} = \frac{N}{4}. \quad (2.14)$$

Note que a equação só pode ser satisfeita se o somatório em $\vec{k}$ for positivo, pois caso contrário o somatório pode divergir, o que nos leva a condição $\mu > \max J_{\vec{k}} = J_0 = dJ$ para o potencial químico. Utilizando a identidade:

$$\frac{1}{z} = \int_0^\infty dx e^{-zx}, \quad z > 0, \quad (2.15)$$

e seguindo os argumentos de Pathria [13], podemos reescrever a restrição esférica, Eq. (2.14), como:

$$\frac{T}{2} \int_0^\infty dx e^{-\mu x} \sum_{\vec{k}} e^{J_{\vec{k}} x} + \frac{Nh^2}{4(\mu - dJ)^2} = \frac{N}{4}. \quad (2.16)$$

O somatório em $\vec{k}$ pode ser transformado em uma integral usando a fórmula de Euler-Maclaurin no limite $N \gg 1$:

$$\sum_{\vec{k}} e^{J_{\vec{k}} x} = N \prod_{i=1}^d \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_i}{2\pi} e^{xJ \cos k_i}. \quad (2.17)$$

E utilizando a representação integral: $I_0(a) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dx}{2\pi} e^{a \cos x}$, onde $I_m(a)$ é uma função de Bessel modificada do primeiro tipo, podemos escrever a restrição esférica, Eq. (2.14), de uma maneira compacta e útil para análise posterior:

$$\frac{T}{2} \int_0^\infty dx e^{-\mu x} [I_0(Jx)]^d + \frac{h^2}{4(\mu - dJ)^2} = \frac{1}{4}. \quad (2.18)$$

Primeiro note que se a integral acima convergir quando $\mu = dJ$, então o sistema irá apresentar uma temperatura crítica T_c . Abaixo desta temperatura o campo magnético h deve ser nulo, já que o denominador do segundo termo deve-se anular quando $\mu = dJ$. A primeira pergunta que iremos fazer é para qual dimensão a

seguinte integral converge:

$$\int_0^\infty dx e^{-\mu x} [I_0(Jx)]^d. \quad (2.19)$$

A função modificada de Bessel do primeiro tipo é bem comportada em torno de $x = 0$: $I_0(0) \sim 1 + \frac{1}{4}x^2$, e possui a forma assintótica

$$I_0(x) \sim \frac{e^x}{\sqrt{2\pi x}}, \quad (2.20)$$

para grandes valores de x . Então podemos garantir que para o intervalo $[1, \infty)$, $I_0(x) \approx (e^x/\sqrt{2\pi x})$. Desta maneira a convergência da integral, Eq. (2.19), é garantida através de

$$\int_1^\infty dx \frac{e^{-(\mu-dJ)x}}{(2\pi x)^{d/2}}, \quad (2.21)$$

e a última integral converge, no caso em que $\mu = dJ$, apenas para $d/2 > 1$. Portanto, a integral converge, no caso de $\mu = dJ$, para $d = 3, 4, \dots$. Desta forma só é possível definir uma temperatura crítica para $d \geq 3$, já que em $\mu = dJ$ a energia livre do modelo, Eq. (2.13), possui uma dependência não-analítica em μ (especificamente um corte de ramo do tipo logaritmo).

2.2.2 Potencial químico

Nesta seção vamos analisar o potencial químico para temperaturas acima e abaixo da temperatura crítica.

(A) $T \lesssim T_c$.

A temperatura crítica é definida através do uso da Eq. (2.18) para $h = 0$ e $\mu = dJ$, resultando em

$$T_c = \frac{1}{2 \int_0^\infty dx (e^{-x} I_0(Jx))^d}. \quad (2.22)$$

Para temperaturas ligeiramente abaixo de T_c podemos considerar que a integral na Eq. (2.18) é determinada por seu valor para $\mu = dJ$, obtendo a seguinte equação para o potencial químico:

$$\frac{T}{4T_c} + \frac{h^2}{4(\mu - dJ)^2} = \frac{1}{4}. \quad (2.23)$$

Resolvendo a equação obtemos:

$$\mu = dJ + h(1 - T/T_c)^{-1/2}, \quad (2.24)$$

para temperaturas ligeiramente inferiores a T_c .

(B) $T \gtrsim T_c$.

Para temperaturas ligeiramente maiores que T_c temos que analisar o comportamento da integral na Eq. (2.18). Neste caso, seguindo os argumentos de Thompson [7], é conveniente reescrever a integral na forma:

$$R(\mu) = \int_0^\infty e^{-(\mu - dJ)x} (e^{-Jx} I_0(Jx))^d dx. \quad (2.25)$$

A derivada, $\partial R/\partial \mu$, pode ser expressa como

$$R'(\mu) = - \int_0^\infty x e^{-(\mu - dJ)x} (e^{-Jx} I_0(Jx))^d dx, \quad (2.26)$$

e uma análise similar a realizada na Eq. (2.21) mostra que a derivada converge em $\mu = dJ$ apenas para $d/2 - 1 > 1$, i. e., $d = 5, 6, \dots$. Desta forma é necessário uma análise mais delicada para $d = 3, 4$. Consideramos, inicialmente, o integrando de (2.26) no regime $Jx \ll 1$. Observamos, a partir das expansões de $I_0(Jx)$ e da função gama incompleta, que tal termo dá uma contribuição não-singular a $R'(\mu)$. Por outro

lado, a contribuição do regime oposto $Jx \gg 1$ pode ser analisada considerando o limite inferior de integração como $[\kappa(\mu - dJ)]^{-1}$, com o fator numérico $\kappa \gtrsim 1$, e o limite assintótico $I_0(Jx) \sim e^{Jx}/\sqrt{2\pi Jx}$. Nesse caso, observamos, via integração por partes, que:

$$R'(\mu) \sim - [e^{-(1/\kappa-1)} \kappa^{d/2-1}] \frac{e^{-1}}{(dJ)^2} \left(\frac{d}{2\pi} \right)^{d/2} (dJ/(\mu - dJ))^{2-d/2}, \quad \mu \rightarrow dJ. \quad (2.27)$$

Para o caso $d = 4$ a integração por partes produz o seguinte resultado:

$$R'(\mu) \sim e^{-(1/\kappa-1)} \frac{e^{-1}}{(4J)^2} \left(\frac{4}{2\pi} \right)^4 \ln [dJ/(\mu - dJ)], \quad \mu \rightarrow dJ. \quad (2.28)$$

No desenvolvimento a seguir, adotaremos $\kappa \equiv 1$; na análise do coeficiente da susceptibilidade na região crítica, estimaremos o valor de κ em comparação com os resultados de Joyce [6]. Com base nas Eqs. (2.26)-(2.28), podemos escrever que

$$R(\mu) - R(dJ) \approx - \frac{e^{-1}}{dJ(d/2 - 1)} \left(\frac{d}{2\pi} \right)^{d/2} ((\mu - dJ)/dJ)^{d/2-1}, \quad (2.29)$$

para $d = 3$;

$$R(\mu) - R(dJ) \approx - \frac{(4/2\pi)^4 e^{-1}}{dJ} \frac{(\mu - dJ)}{dJ} \ln [(\mu - dJ)/dJ], \quad (2.30)$$

$d = 4$;

$$R(\mu) - R(dJ) \approx R'(dJ)(\mu - dJ), \quad (2.31)$$

$d = 5, 6, \dots$, já que $R'(\mu)$ converge em $\mu = dJ$. Utilizando a definição de $R(\mu)$ na Eq. (2.18), podemos reescrever a equação para o potencial químico como

$$\frac{T}{2}R(\mu) + \frac{\hbar^2}{4(\mu - dJ)^2} = \frac{1}{4}. \quad (2.32)$$

Como $T \gtrsim T_c$, podemos afirmar que

$$R(\mu) - R(dJ) \approx -\frac{1}{2T_c}\tau, \quad (2.33)$$

onde $\tau = (T/T_c - 1)$. Substituindo a equação acima nas Eqs. (2.29)-(2.31), obtemos o resultado desejado para o potencial químico:

$$(\mu - dJ) \approx dJ \left[e(d/2 - 1) (2\pi/d)^{d/2} \frac{dJ}{2T_c} \right]^{1/(d/2-1)} (\tau)^{1/(d/2-1)}, \quad d = 3, \quad (2.34)$$

$$(\mu - dJ) \approx dJ \frac{(dJ/2T_c)e(\pi/2)^4\tau}{\ln[(dJ/2T_c)e(\pi/2)^4\tau]}, \quad d = 4, \quad (2.35)$$

$$\mu - dJ \approx \frac{1}{-2T_c R'(dJ)}\tau, \quad d = 5, 6, \dots \quad (2.36)$$

2.3 Magnetização e Susceptibilidade

Para estudar a magnetização vamos primeiro escrever as variáveis de spin em termos das variáveis que diagonalizaram o Hamiltoniano do sistema, Eq. (2.9). Primeiro considere a transformada de Fourier:

$$S_{\vec{R}} = 1/\sqrt{N} \sum_{\vec{k} > 0} \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} S_{\vec{k}} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} S_{\vec{k}}^* \right] + 1/\sqrt{N} S_0; \quad (2.37)$$

introduzindo as variáveis $x_{\vec{k}}, y_{\vec{k}}$, obtemos

$$S_{\vec{R}} = \sqrt{2/N} \sum_{\vec{k} > 0} \left[x_{\vec{k}} \cos(\vec{k} \cdot \vec{R}) - y_{\vec{k}} \sin(\vec{k} \cdot \vec{R}) \right] + 1/\sqrt{N} x_0. \quad (2.38)$$

O valor médio do spin é obtido através do seguinte procedimento:

$$\langle S_{\vec{R}} \rangle = \frac{1}{Z} \int \left(\prod_{\vec{R}} dS_{\vec{R}} \right) S_{\vec{R}} e^{-\beta H}. \quad (2.39)$$

Utilizando a identidade: $\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-ax^2+bx} = (b/2a) \sqrt{\pi/a} e^{b^2/4a}$, obtemos o resultado desejado:

$$M = \langle S_{\vec{R}} \rangle = \frac{h}{2(\mu - dJ)}. \quad (2.40)$$

(A) $T \lesssim T_c$.

Temos que $\mu = dJ + h(1 - T/T_c)^{-1/2}$, conforme a Eq. (2.24). Então a magnetização é dada por

$$M = \frac{1}{2} \sqrt{1 - T/T_c}. \quad (2.41)$$

Observamos que o expoente crítico, definido por $M \sim (1 - T/T_c)^\beta$, vale $\beta = 1/2$ para $d = 3, 4, \dots$

(B) $T \gtrsim T_c$.

Invertendo a Eq. (2.40), para obter μ em função de M , obtemos

$$\mu = dJ + \frac{h}{2M}. \quad (2.42)$$

Substituindo o valor de M na restrição esférica, Eq. (2.32), obtemos a seguinte equação:

$$\frac{T}{2}R(\mu) + M^2 = \frac{1}{4}. \quad (2.43)$$

A equação acima pode ser transformada em uma equação de estado. Para isto basta eliminar μ através da Eq. (2.42):

$$M^2 + \frac{T}{2}R(dJ + \frac{h}{2M}) - \frac{T_c}{2}R(dJ) = 0. \quad (2.44)$$

Em seguida, utilizando as Eqs. (2.29)-(2.31), obtemos as seguintes equações de estado:

$$h \approx 2dJ \left[(2\pi/d)^{d/2} e(d/2 - 1) \frac{2dJ}{T_c} \right]^{1/(d/2-1)} M (M^2 + (1/4)\tau)^{2/(d-2)}, \quad d = 3 \quad (2.45)$$

$$h \approx 2dJ \frac{(2dJ/T_c)(2/\pi)^4 e M (M^2 + (1/4)\tau)}{\ln [(2dJ/T_c)(2/\pi)^4 e (M^2 + (1/4)\tau)]}, \quad d = 4, \quad (2.46)$$

e

$$h \approx \frac{4}{-T_c R'(dJ)} M [M^2 + \tau/4], \quad d = 5, 6, \dots, \quad (2.47)$$

onde $\tau = (T/T_c - 1)$. Para $T = T_c$, obtemos as seguintes relações:

$$h \sim 2dJ \left[(2\pi/d)^{d/2} e(d/2 - 1) \frac{2dJ}{T_c} \right]^{1/(d/2-1)} M^{(d/2)/(d-2)}, \quad d = 3, \quad (2.48)$$

$$h \sim 2dJ \frac{(2dJ/T_c)(2/\pi)^4 e M^3}{\ln [(2dJ/T_c)(2/\pi)^4 e M^2]}, \quad d = 4, \quad (2.49)$$

e

$$h \sim \frac{4}{-T_c R'(dJ)} M^3, \quad d = 5, 6, \dots \quad (2.50)$$

Note que o expoente crítico δ , definido por $M \sim h^{1/\delta}$, é $\delta = (d+2)/(d-2)$ para $d = 3$, $\delta = 5$ para $d = 4, 5, \dots$. Como esperado aparece uma dependência logarítmica na dimensão crítica superior, $d = 4$ [7].

2.3.1 Susceptibilidade

Para obter a susceptibilidade, derivamos a Eq. (2.40) com respeito a h :

$$\chi = \frac{1}{2(\mu - dJ)} - \frac{h}{2(\mu - dJ)^2} \frac{\partial \mu}{\partial h}. \quad (2.51)$$

(A) $T \lesssim T_c$.

Neste regime a susceptibilidade é infinita [6].

(B) $T \gtrsim T_c$.

Utilizando os resultados obtidos para o potencial químico nas Eqs. (2.34)-(2.36), podemos obter os seguintes assintóticos para a susceptibilidade a campo nulo:

$$\chi(h=0) \sim \frac{[\kappa e^{\{[2(1-\kappa)]/[(2-d)\kappa]\}}]}{2dJ} [e(d/2-1)(2\pi/d)^{d/2}(dJ/2T_c)]^{-1/(d/2-1)} \tau^{-2/(d-2)},$$

$$d = 3, \quad (2.52)$$

$$\chi(h=0) \sim [e^{-(1/\kappa-1)}/(2dJ)] \frac{\ln [e^{(1/\kappa-1)}(dJ/2T_c)e(\pi/2)^4\tau]}{(dJ/2T_c)e(\pi/2)^4} \tau^{-1}, \quad d = 4, \quad (2.53)$$

e

$$\chi(h=0) \sim \frac{T_c}{-R'(dJ)} \tau^{-1}, \quad d = 5, 6, \dots, \quad (2.54)$$

onde $\tau = (T/T_c - 1)$. Note que o expoente crítico γ , definido por $\chi(h = 0) \sim \tau^{-\gamma}$, é $\gamma = 2/(d-2)$ para $d = 3$ e $\gamma = 1$ para $d = 4, 5, \dots$. Como $d = 4$ é a dimensão crítica superior, temos uma dependência logarítmica assinalando este fato [7]. Comparando o coeficiente obtido na Eq. (2.52), $1/(\pi^3 e^2)$, com o obtido por Joyce [6], $27/(8\pi^2)$, obtemos a seguinte equação para κ :

$$\kappa = \left(\frac{27\pi}{8} \right) e^{2/\kappa}, \quad (2.55)$$

cuja solução é $\kappa \approx 12,463$.

2.4 Funções de Correlação

Para calcular a correlação vamos primeiro multiplicar a expressão obtida para a magnetização na Eq. (2.38) para dois sítios distintos:

$$\begin{aligned} S_{\vec{R}} S_{\vec{R}'} &= \frac{2}{N} \sum_{\vec{k} > 0} \sum_{\vec{p} > 0} \left[x_{\vec{k}} x_{\vec{p}} \cos(\vec{k} \cdot \vec{R}) \cos(\vec{p} \cdot \vec{R}') + y_{\vec{k}} y_{\vec{p}} \sin(\vec{k} \cdot \vec{R}) \sin(\vec{p} \cdot \vec{R}') \right] \\ &+ \frac{\sqrt{2}}{N} \sum_{\vec{k} > 0} \left[x_{\vec{k}} x_0 \cos(\vec{k} \cdot \vec{R}) - y_{\vec{k}} x_0 \sin(\vec{k} \cdot \vec{R}') \right] \\ &+ \sum_{\vec{p} > 0} \left[y_{\vec{p}} x_0 \cos(\vec{p} \cdot \vec{R}) - y_{\vec{p}} x_0 \sin(\vec{p} \cdot \vec{R}') \right] + \frac{1}{N} x_0^2 \\ &- \frac{2}{N} \sum_{\vec{k} > 0} \sum_{\vec{p} > 0} \left[x_{\vec{k}} y_{\vec{p}} \cos(\vec{k} \cdot \vec{R}) \sin(\vec{p} \cdot \vec{R}') + x_{\vec{p}} y_{\vec{k}} \cos(\vec{p} \cdot \vec{R}') \sin(\vec{k} \cdot \vec{R}) \right]. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Para obter as funções de correlação do modelo basta calcular as médias abaixo:

$$\langle S_{\vec{R}} S_{\vec{R}'} \rangle = \frac{1}{Z} \int_{\vec{R}} S_{\vec{R}} S_{\vec{R}'} e^{-\beta H} \prod_{\vec{R}} dS_{\vec{R}}. \quad (2.57)$$

As integrais resultantes podem ser feitas com os seguintes resultados auxiliares para integrais gaussianas múltiplas:

$$\int x_1 x_2 e^{-a(x_1^2 + x_2^2)} dx_1 dx_2 = 0, \quad x_1 \neq x_2, \quad (2.58)$$

$$\int x^2 e^{-ax^2 + bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/4a} [(1/2a) + (b^2/4a^2)]. \quad (2.59)$$

Com os resultados acima podemos obter as funções de correlação do modelo:

$$\langle S_{\vec{R}} S_{\vec{R}'} \rangle - \langle S_{\vec{R}} \rangle \langle S_{\vec{R}'} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{T}{2(\mu - J_{\vec{k}})} \cos[\vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{R}')], \quad (2.60)$$

onde a soma é realizada para todos os vetores $\vec{k}$ da primeira zona de Brillouin. É possível transformar a soma sobre variáveis d -dimensionais em uma integral de uma variável através dos seguintes argumentos. Primeiro considere o seguinte resultado:

$$\frac{1}{z} = \int_0^\infty e^{-xz} dx, \quad z > 0. \quad (2.61)$$

Com o resultado acima, podemos escrever:

$$\sum_{\vec{k}} \frac{T}{2(\mu - J_{\vec{k}})} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{R}')} = \int_0^\infty e^{-\mu x} dx \prod_{j=1}^d \left[\sum_{\vec{k}_j} e^{i\vec{k}_j \cdot Jx \cos \vec{k}_j} \right], \quad (2.62)$$

Considere agora o limite $N \gg 1$. Neste limite podemos transformar as somas sobre as componentes k_i do vetor $\vec{k}$ utilizando a fórmula de Euler-Maclaurin. Desta forma podemos reescrever o lado direito da equação como

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{R}')} \frac{T}{2(\mu - J_{\vec{k}})} = \int_{\vec{k}} \prod_{j=1}^d \frac{dk_j}{2\pi} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{R}')} \frac{T}{2(\mu - J_{\vec{k}})}, \quad (2.63)$$

onde usamos que $J_{\vec{k}} = J_{-\vec{k}}$ para reescrever o segundo termo da Eq. (2.60) em termos de uma exponencial em vez do cosseno. Finalmente, utilizando a identidade:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{in\theta + a \cos(\theta)} = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} d\theta e^{a \cos \theta} \cos(n\theta) = I_n(a), \quad (2.64)$$

onde $I_n(a)$ é a função de Bessel modificada do primeiro tipo de ordem n , e as Eqs. (2.62) e (2.64) na Eq. (2.60), obtemos o resultado desejado:

$$G(\vec{R}, \vec{R}') = \langle S_{\vec{R}} S_{\vec{R}'} \rangle - \langle S_{\vec{R}} \rangle \langle S_{\vec{R}'} \rangle = \frac{T}{2} \int_0^{\infty} e^{-(\mu - dJ)x} \prod_{i=1}^d [e^{-Jx} I_{n_i}(Jx)] , \quad (2.65)$$

onde $\vec{R} - \vec{R}' = \sum_{i=1}^d n_i \vec{e}_i$.

(B) $T \gtrsim T_c$.

Fazendo a mudança de variáveis $y = (\mu - dJ)x$ na integral acima podemos transformar a integral da seguinte maneira:

$$G(\vec{R}, \vec{R}') = \frac{T}{2(\mu - dJ)} \int_0^{\infty} dy e^{-y} \prod_{i=1}^d [e^{-y/(\mu - dJ)} I_{n_i}(Jx/(\mu - dJ))] . \quad (2.66)$$

Para $\mu \rightarrow dJ$ podemos usar o assintótico da função modificada de Bessel do primeiro tipo [34]:

$$I_n(x) \sim \frac{e^{x - \frac{n^2}{2x}}}{\sqrt{2\pi x}}, \quad (2.67)$$

e a integral:

$$\int_0^\infty x^{\nu-1} e^{-\frac{\beta}{x} - \phi x} = 2\left(\frac{\beta}{\Gamma}\right)^{\nu/2} K_\nu(2\sqrt{\beta\phi}), \quad \text{Re}\beta > 0, \text{Re}\Gamma > 0, \quad (2.68)$$

onde $K_\nu(x)$ é a função modificada de Bessel do segundo tipo, com $\nu = 1 - d/2$, $\beta = \frac{r^2}{2}$, $r^2 = \sum_{i=1}^d n_i^2$ e $\phi = (\mu/J) - d$, para obter

$$G(\vec{R}, \vec{R}') = \frac{T}{2(2\pi)^{d/2} J} \left(\frac{1}{r\xi}\right)^{(d-2)/2} K_{(d-2)/2}\left(\frac{r}{\xi}\right), \quad (2.69)$$

onde $\xi = \frac{1}{\sqrt{2\phi}} = 1/\sqrt{2(\mu/J - d)}$ é o comprimento de correlação do modelo.

Substituindo a forma assintótica da função de Bessel modificada do segundo tipo,

$$K_\nu(x) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x}, \quad x \rightarrow \infty, \quad (2.70)$$

na Eq. (2.69), obtemos:

$$G(\vec{R}, \vec{R}') \sim \frac{T}{2\xi^{(d-3)/2} (2\pi r)^{(d-1)/2} J} e^{-r/\xi}, \quad r \rightarrow \infty, \quad (2.71)$$

confirmando que ξ é o comprimento de correlação. Existe uma relação interessante entre o comprimento de correlação e a susceptibilidade $\chi \sim \xi^2$ [13]. Esta relação mostra que o modelo esférico guarda algumas semelhanças com o modelo Gaussiano, já que neste modelo $\xi \sim 1/\sqrt{T - T_c}$ e $\chi \sim 1/(T - T_c)$ [35]. Lembramos que no modelo gaussiano as flutuações de cada variável são relevantes, mas as flutuações entre elas

são desprezadas. No modelo esférico, entretanto, as flutuações entre variáveis só são irrelevantes a partir da dimensão crítica superior ($d_u = 4$).

Para $T = T_c$, temos $\mu = dJ$ e portanto $\phi = 0$ na Eq. (2.68). Substituindo o assintótico da função de Bessel modificada do segundo tipo:

$$K_\nu(x) \sim \frac{\Gamma(\nu)}{2} \left(\frac{2}{x}\right)^\nu, \quad x \rightarrow 0, \quad \nu > 0, \quad (2.72)$$

onde $\Gamma(x)$ é a função Gama, na Eq. (2.69), obtemos

$$G(\vec{R}, \vec{R}') \sim \frac{\Gamma((d-2)/2)T_c}{4(\pi)^{d/2}J} \frac{1}{r^{d-2}}, \quad d = 3, 4, \dots, \quad (2.73)$$

onde podemos identificar o expoente crítico η definido por $G(\vec{R}, \vec{R}') \sim |\vec{R} - \vec{R}'|^{-(d-2+\eta)}$, como $\eta = 0$ para $d = 3, 4, \dots$. Sendo assim, o modelo apresenta correlações de longo alcance na temperatura crítica.

2.4.1 Comprimento de correlação

O comprimento de correlação do modelo obtido na seção anterior:

$$\xi = 1/\sqrt{2(\mu/J - d)}, \quad (2.74)$$

pode ser combinado com os resultados obtidos para o potencial químico, Eqs. (2.34)-(2.36), para obter comportamentos assintóticos em $T \gtrsim T_c$. De fato, obtemos

$$\xi \sim (2d)^{-1/2} [e(d/2 - 1)(2\pi/d)^{d/2}(dJ/2T_c)]^{-1/(d-2)} \tau^{-1/(d-2)}, \quad d = 3, \quad (2.75)$$

$$\xi \sim (2d)^{-1/2} \left[\frac{(dJ/2T_c)e(\pi/2)^4}{\ln [(dJ/2T_c)e(\pi/2)^4\tau]} \right]^{1/2} \tau^{-1/2}, \quad d = 4, \quad (2.76)$$

e

$$\xi \sim \sqrt{-T_c J R'(dJ)} \tau^{-1/2}, \quad d = 5, 6, \dots, \quad (2.77)$$

onde $\tau = (T/T_c - 1)$. Note que o expoente crítico ν , definido por $\xi \sim \tau^{-\nu}$, é $\nu = 1/(d - 2)$ para $d = 3$, e $\nu = 1/2$ para $d = 4, 5, \dots$. Como é característico em uma transição de fase, a dimensão crítica superior é marcada por uma dependência logarítmica [7].

2.5 Entropia e Calor Específico

Utilizando a energia livre F , Eq. (2.13), e a condição esférica, Eq. (2.14), podemos obter a entropia:

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = N + \frac{N}{2} \ln T - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \ln (\mu - J_{\vec{k}}), \quad (2.78)$$

onde a soma é feita sobre todos os vetores da primeira zona de Brillouin. Utilizando este resultado podemos obter o calor específico:

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} = \frac{N}{2} - \left[\sum_{\vec{k}} \frac{T}{2(\mu - J_{\vec{k}})} \right] \frac{\partial \mu}{\partial T}. \quad (2.79)$$

Usando a restrição esférica, Eq. (2.14), podemos reescrever a equação acima na forma:

$$C = \frac{N}{2} - \left[\frac{N}{4} - \frac{N}{4(\mu - dJ)^2} \right] \frac{\partial \mu}{\partial T}. \quad (2.80)$$

Consequentemente, o calor específico a campo nulo é determinado por

$$C(h = 0) = \frac{N}{2} - \frac{N}{4} \frac{\partial \mu}{\partial T}. \quad (2.81)$$

(A) $T < T_c$.

Para $T < T_c$ e $h = 0$, a Eq. (2.24) implica em $\mu = dJ$, e portanto

$$\frac{C}{N} = \frac{1}{2}. \quad (2.82)$$

Conforme observamos o modelo contradiz a terceira lei da termodinâmica quando $T \rightarrow 0$. Um resultado esperado, já que o modelo não possui nenhuma característica quântica. Conforme veremos nesta tese, a introdução do caráter quântico corrige esta falha.

(B) $T \gtrsim T_c$.

Utilizando os resultados obtidos para o potencial químico nas Eqs. (2.34)-(2.36), podemos obter resultados assintóticos para o calor específico através do uso da equação Eq. (2.81):

$$C(h = 0) \sim \frac{N}{2} - \frac{NdJ}{2(d-2)T_c} \left[e^{-1}(d/2 - 1)(2\pi/d)^{d/2}(dJ/2T_c) \right]^{2/(d-2)} \tau^{-(d-4)/(d-2)}, \quad (2.83)$$

$d = 3$,

$$C(h = 0) \sim \frac{N}{2} - \frac{NdJ}{4T_c} \frac{(dJ/2T_c)e(\pi/2)^4}{\ln[(dJ/2T_c)e(\pi/2)^4\tau]}, \quad d = 4, \quad (2.84)$$

e

$$C \sim \frac{N}{2} + \frac{N}{8T_c^2 R'(dJ)}, \quad d = 5, 6, \dots, \quad (2.85)$$

onde $\tau = (T/T_c - 1)$. Como vemos o calor específico apresenta uma descontinuidade em $T = T_c$ para dimensões maiores que a dimensão crítica superior $d = 4$. Na dimensão crítica superior temos uma típica dependência logarítmica, e para $d = 3$ o calor específico se comporta para $T \gtrsim T_c$ como $C \sim \tau^{-\alpha}$, onde $\alpha = (d - 4)/(d - 2)$.

Com este último resultado podemos construir a seguinte tabela de expoentes críticos:

Expoente	d=3	d=4	d=5,6,...
α	$(d-4)/(d-2)$	0 (*)	0(descontinuidade)
β	1/2	1/2	1/2
γ	$2/(d-2)$	1 (*)	1
δ	$(d+2)/(d-2)$	3 (*)	3
ν	$1/(d-2)$	1/2 (*)	1/2
η	0	0	0

Onde (*) indica a típica dependência logarítmica na dimensão crítica superior.

Observamos que as relações de escala :

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (2.86)$$

$$\beta + \gamma = \beta\delta, \quad (2.87)$$

$$\nu(2 - \eta) = \gamma, \quad (2.88)$$

são sempre observadas [2], assim como a relação de hiper-escala:

$$2 - \alpha = d\nu. \quad (2.89)$$

Capítulo 3

Modelo Esférico Quântico de Spin em Redes Hipercúbicas

3.1 Introdução

Nos últimos anos tem se intensificado a busca por modelos e sistemas que exibam transições de fase a temperatura nula, as chamadas transições de fase quânticas. Neste sentido o estudo de Hertz sobre transições quânticas no contexto de ferromagnetos itinerantes é tomado como modelo [36]. Neste trabalho o conceito de hiper-escala foi reformulado, pois devido à presença das flutuações quânticas o sistema se comporta como se sua dimensão fosse aumentada por um expoente dinâmico z . Desta forma as relações entre os expoentes críticos são modificadas, em relação a uma transição de fase térmica, de modo a que a dimensão efetiva do sistema seja $d + z$, em lugar da dimensão real d . A dimensão crítica superior se torna então $d = 4 - z$. Sendo assim, a versão quântica de um modelo que apresenta transição de fase em $d = 3, 4, 5$ quando induzida por temperatura pode apresentar uma transição

quântica em $T = 0$ em dimensões mais baixas. Desta maneira, uma versão quântica do modelo esférico pode ser muito útil para um estudo de transições quânticas. De fato o modelo esférico quântico já tem sido estudado para o entendimento de vidros de spin [14], propriedades termodinâmicas [15] e ferromagnetismo incluindo estudos com um campo transversal [16]. Além disto o modelo esférico quântico foi estudado por Vojta [17] no contexto de transições quânticas, incluindo efeitos de tamanho finito [18] e de campo aleatório [19]. Nestes trabalhos Vojta encontrou que o modelo esférico, com interações de curto alcance, possui um expoente dinâmico $z = 1$. Sendo assim, o modelo esférico quântico apresenta uma transição a temperatura nula em $d = 2$. Neste capítulo vamos reapresentar os resultados de Vojta, de uma maneira apropriada a comparações futuras. Vale salientar que a presença do caráter quântico faz com que a contradição do modelo esférico clássico com a terceira lei da termodinâmica seja corrigida.

3.2 Modelo Esférico Quântico

3.3 Energia Livre e Condição Esférica

Para introduzir o caráter quântico no modelo esférico vamos seguir a proposta sugerida por Obermair [38]. Para isto, além de definir as variáveis de spin ($S_{\vec{R}}$) em cada sítio $\vec{R} = \sum_{i=1}^d n_i \vec{e}_i$ da rede hipercúbica d-dimensional, vamos definir momentos conjugados ($P_{\vec{R}}$) às variáveis de spin. Estas quantidades satisfazem as seguintes relações de comutação:

$$[S_{\vec{R}}, S_{\vec{R}'}] = 0, \quad [P_{\vec{R}}, P_{\vec{R}'}] = 0, \quad [S_{\vec{R}}, P_{\vec{R}'}] = i\delta_{\vec{R}, \vec{R}'}, \quad (3.1)$$

onde $\delta_{R,R'}$ é a delta de Kronecker. As propriedades dos campos de spin descritas acima fazem o modelo esférico quântico mais parecido com rotores quânticos [37] do que com operadores de spin usuais, como os utilizados no modelos de Heisenberg.

O Hamiltoniano do sistema se apresenta como

$$H = \frac{g}{2} \sum_{\vec{R}} P_{\vec{R}}^2 - \frac{J}{2} \sum_{\langle \vec{R}, \vec{R}' \rangle} S_{\vec{R}} S_{\vec{R}'} - h \sum_{\vec{R}} S_{\vec{R}} + \mu \sum_{\vec{R}} (S_{\vec{R}}^2 - 1/4), \quad (3.2)$$

onde g é a constante do acoplamento quântico que mede a intensidade das flutuações quânticas, $J > 0$ é a constante do acoplamento ferromagnético entre sítios primeiros vizinhos, h é o campo magnético em unidades de energia e $\langle \dots \rangle$ indica uma soma restrita a sítios primeiros vizinhos. Observamos que para garantir a presença de uma dinâmica quântica o termo com $P_{\vec{R}}$ foi introduzido na Eq. (3.2). Esta escolha não é única e é determinante para o comportamento quântico do modelo, entretanto, é a escolha mais usual, conforme pode ser observado nas Refs. [14–17, 19]. Desta maneira, o parâmetro variável g controla a importância das flutuações quânticas responsáveis pela dinâmica quântica. Além disso, podemos identificar g com o inverso da constante de acoplamento quântico de um modelo sigma não-linear quântico de simetria $O(n)$ no limite $n \rightarrow \infty$, cuja realização $O(3)$ partilha o mesmo comportamento, em baixas energias, que o modelo antiferromagnético de Heisenberg.

A restrição esférica:

$$\sum_{\vec{R}} \langle S_{\vec{R}}^2 \rangle = \frac{N}{4}, \quad (3.3)$$

é garantida pela presença do potencial químico μ . Observamos que os valores médios de spin podem variar continuamente sem limites superiores e inferiores, diferentemente do que aconteceria se estivéssemos tratando de variáveis que obedecessem as regras de comutação de $SU(2)$. Para diagonalizar o Hamiltoniano, Eq. (2.3), vamos

introduzir os operadores de criação ($a_{\vec{R}}^\dagger$) e destruição ($a_{\vec{R}}$) através das relações:

$$S_{\vec{R}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} (a_{\vec{R}} + a_{\vec{R}}^\dagger), \quad (3.4)$$

$$P_{\vec{R}} = \frac{-i}{\sqrt{2}} \left(\frac{2\mu}{g} \right)^{1/4} (a_{\vec{R}} - a_{\vec{R}}^\dagger), \quad (3.5)$$

onde estes operadores obedecem as regras de comutação canônicas de bósons:

$$[a_{\vec{R}}, a_{\vec{R}'}] = 0, \quad [a_{\vec{R}}^\dagger, a_{\vec{R}'}^\dagger] = 0, \quad [a_{\vec{R}}, a_{\vec{R}'}^\dagger] = \delta_{\vec{R}, \vec{R}'}. \quad (3.6)$$

Substituindo as transformações acima, Eqs. (3.4) e Eq. (3.5), no Hamiltoniano, Eq (3.2), obtemos

$$\begin{aligned} H = & \sqrt{2g\mu} \sum_{\vec{R}} (a_{\vec{R}}^\dagger a_{\vec{R}} + 1/2) - \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{\vec{R}} (a_{\vec{R}} + a_{\vec{R}}^\dagger) - \frac{\mu N}{4} \\ & - \frac{J}{4} \sqrt{\frac{g}{2\mu}} \sum_{\langle \vec{R}, \vec{R}' \rangle} (a_{\vec{R}}^\dagger a_{\vec{R}'} + a_{\vec{R}'}^\dagger a_{\vec{R}} + a_{\vec{R}} a_{\vec{R}'} + a_{\vec{R}}^\dagger a_{\vec{R}'}^\dagger). \end{aligned} \quad (3.7)$$

É conveniente definir a transformada de Fourier:

$$a_{\vec{R}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} a_{\vec{k}}, \quad (3.8)$$

onde os operadores $a_{\vec{k}}$, $a_{\vec{k}}^\dagger$ obedecem as mesmas relações de comutação, Eq. (3.6), que os operadores $a_{\vec{R}}$, $a_{\vec{R}}^\dagger$ já que a transformação Eq. (3.8) é canônica. Substituindo

a transformação acima no Hamiltoniano, Eq. (3.2), resulta que

$$\begin{aligned}
 H = & \sqrt{2g\mu} \sum_{\vec{k}} \left(1 - \frac{J_{\vec{k}}}{2\mu}\right) a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} - \sqrt{2g\mu} \sum_{\vec{k}} \frac{J_{\vec{k}}}{4\mu} (a_{-\vec{k}} a_{\vec{k}} + a_{-\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}}^{\dagger}) \\
 & - \sqrt{\frac{N}{2}} \left(\frac{g}{2\mu}\right)^{1/4} (a_0 + a_0^{\dagger}) h + \sqrt{2g\mu} \frac{N}{2} - \frac{\mu N}{4},
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

onde $J_{\vec{k}} = J \sum_{i=1}^d \cos(k_i)$ é a transformada de Fourier da interação ferromagnética entre primeiros vizinhos. Definindo agora operadores (e seus hermiteanos conjugados) que garantem a conservação global do momento $\vec{k}$:

$$\Delta_{\vec{k}+} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{\vec{k}} + a_{-\vec{k}}), \quad \Delta_{\vec{k}-} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{\vec{k}} - a_{-\vec{k}}), \tag{3.10}$$

O Hamiltoniano, Eq. (3.9), é reescrito na forma:

$$\begin{aligned}
 H = & \sqrt{2g\mu} \sum_{\vec{k}>0} \left(1 - \frac{J_{\vec{k}}}{2\mu}\right) (\Delta_{\vec{k}+}^{\dagger} \Delta_{\vec{k}+} + \Delta_{\vec{k}-}^{\dagger} \Delta_{\vec{k}-}) + \sqrt{2g\mu} \frac{N}{2} - \frac{\mu N}{4} \\
 & \sqrt{2g\mu} \sum_{\vec{k}>0} \frac{J_{\vec{k}}}{4\mu} (\Delta_{\vec{k}+}^2 - \Delta_{\vec{k}-}^2 + h.c.) - \sqrt{\frac{N}{2}} \left(\frac{g}{2\mu}\right)^{1/4} (a_0 + a_0^{\dagger}) h.
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

Para diagonalizar o Hamiltoniano, Eq. (3.11), vamos utilizar os modelos tipo A, descritos no apêndice B. Introduzindo os operadores (e hermiteanos conjugados):

$$\alpha_{k+} = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{J_k}{2\mu}\right)^{1/4} \left[\left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{J_k}{2\mu}}}\right)\Delta_{k+} + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{J_k}{2\mu}}}\right)\Delta_{k+}^\dagger \right], \quad (3.12)$$

$$\alpha_{k-} = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{J_k}{2\mu}\right)^{1/4} \left[\left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{J_k}{2\mu}}}\right)\Delta_{k+} - \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{J_k}{2\mu}}}\right)\Delta_{k+}^\dagger \right], \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \frac{1}{2}\left(1 - \frac{J_0}{2\mu}\right)^{1/4} \left[\left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{J_0}{2\mu}}}\right)a_0 + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{J_0}{2\mu}}}\right)a_0^\dagger \right] \\ &- \sqrt{N/2} \left(\frac{g}{2(\mu - dJ)} \right)^{1/4} \frac{h}{\sqrt{2g(\mu - dJ)}}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

podemos diagonalizar os Hamiltoniano, Eq. (3.11), como segue:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\vec{k}>0} \omega_{\vec{k}} (\alpha_{\vec{k}+}^\dagger \alpha_{\vec{k}} + 1/2) + \sum_{\vec{k}>0} \omega_{\vec{k}} (\alpha_{\vec{k}-}^\dagger \alpha_{\vec{k}-} + 1/2) \\ &+ \omega_0 (\alpha_0^\dagger \alpha_0 + 1/2) - \frac{Nh^2}{4(\mu - dJ)} - \frac{\mu N}{4}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

onde $\omega_{\vec{k}} = \sqrt{2g(\mu - J_{\vec{k}})}$ são as frequências naturais do modelo.

Com o Hamiltoniano, Eq. (3.15), podemos obter a termodinâmica do modelo. Para tal considere a função de partição:

$$Z = \text{Tre}^{-\beta H}, \quad (3.16)$$

onde Tr indica o traço de um operador. Como o modelo consiste de osciladores harmônicos quânticos desacoplados e todas as transformações que levaram à Eq.

(3.15) são canônicas, podemos obter a função de partição:

$$Z = e^{\beta \frac{Nh^2}{4(\mu-dJ)} + \beta \frac{\mu N}{4}} \prod_{\vec{k}} (1 - e^{-\beta \omega_{\vec{k}}})^{-1}, \quad (3.17)$$

assim como a energia livre de Helmholtz do modelo:

$$F = T \sum_{\vec{k}} \ln (1 - e^{-\beta \omega_{\vec{k}}}) - \frac{Nh^2}{4(\mu - dJ)} - \frac{\mu N}{4}. \quad (3.18)$$

Com o uso da energia livre, Eq. (3.18), podemos reescrever a restrição esférica, Eq. (3.3), através de $\partial F / \partial \mu = 0$:

$$\sum_{\vec{k}} \frac{g}{2\omega_{\vec{k}}} \coth \beta \frac{\omega_{\vec{k}}}{2} + \frac{Nh^2}{4(\mu - dJ)^2} = \frac{N}{4}. \quad (3.19)$$

Para que as frequências naturais do modelo sejam reais, temos que impor: $\mu > \max J_{\vec{k}} = dJ$. Com o uso das transformações a seguir, podemos reescrever a Eq. (3.19) de uma maneira útil para análise posterior. Primeiro considere a expansão da cotangente hipérbolica em frações parciais:

$$\coth x = \frac{1}{x} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2x}{x^2 + n^2 \pi^2}, \quad (3.20)$$

o qual permite reescrever a restrição esférica na forma:

$$\frac{T}{2} \int_0^{\infty} dx \left(1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(2\pi^2 T^2 n^2 x)/g} \right) e^{-\mu x} \sum_{\vec{k}} e^{J_{\vec{k}} x} + \frac{Nh^2}{4(\mu - dJ)^2} = \frac{N}{4}. \quad (3.21)$$

Agora, utilizando a definição da terceira função teta de Jacobi: $\vartheta_3(q) = \vartheta_3(q, z = 0)$, $\vartheta_3(q, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} q^{n^2} e^{2niz}$, obtemos a restrição esférica reformulada:

$$\frac{T}{2} \int_0^{\infty} dx e^{-\mu x} \vartheta_3(e^{-(2\pi^2 T^2 x)/g}) [I_0(Jx)]^d + \frac{h^2}{4(\mu - dJ)^2} = \frac{1}{4}. \quad (3.22)$$

Note a semelhança entre as Eq. (3.22) e Eq. (2.18), em particular a função teta de Jacobi, incorporando explicitamente a correção quântica ao modelo, já que $g = 0$ implica $\vartheta_3 = 1$. Note também que a integral tem problemas de convergência para $\mu = dJ$ e, para analisarmos, vamos considerar a integral na Eq. (3.22) em dois casos: $T \neq 0$ e $T = 0$. Para $T \neq 0$, temos que o problema da convergência da integral aparece no limite $x \rightarrow \infty$, já que tanto a função elíptica quanto a função teta são integráveis em torno da origem. De fato, temos que

$$I_0(x) \sim 1 + \frac{1}{4}x^2, \quad x \rightarrow 0 \quad (3.23)$$

$$\vartheta_3(q) \sim \sqrt{\frac{\pi}{-\ln q}}, \quad q \rightarrow 1^-, \quad (3.24)$$

e ainda:

$$\vartheta_3\left(e^{-(2\pi^2 T^2 x)/g}\right) e^{-\mu x} [I_0(Jx)]^d \sim \sqrt{\frac{g}{2\pi^2 T^2 x}}, \quad x \rightarrow 0, \quad (3.25)$$

e desta forma a integral na Eq. (3.22) converge para $x \rightarrow 0$. Para $x \rightarrow \infty$, temos:

$$I_0(x) \sim \frac{e^x}{\sqrt{2\pi x}}, \quad x \rightarrow \infty \quad (3.26)$$

$$\vartheta_3(q) \sim 1 + 2q, \quad q \rightarrow 0, \quad (3.27)$$

e desta forma obtemos

$$\vartheta_3 \left(e^{-(2\pi^2 T^2 x)/g} \right) e^{-\mu x} [I_0(Jx)]^d \sim \frac{e^{-(\mu-dJ)x}}{\sqrt{(2\pi x)^d}}, \quad (3.28)$$

e a integral só converge em $\mu = dJ$, apenas para $d = 3, 4, \dots$. Observe que se $\mu = dJ$ a energia livre do modelo, Eq. (3.18), apresenta uma frequência natural nula e, portanto, a energia livre apresenta uma dependência não-analítica em relação a μ . Sendo assim, podemos definir uma temperatura crítica T_c apenas para $d = 3, 4, \dots$

Para o caso $T = 0$, podemos usar o assintótico, Eq. (3.24), para reescrever a integral na condição esférica, Eq. (3.22), como

$$\frac{\sqrt{g}}{2} \int_0^\infty dx e^{-\mu x} \frac{[I_0(Jx)]^d}{\sqrt{2\pi x}}. \quad (3.29)$$

O comportamento do integrando próximo da origem é dominado pelo assintótico:

$$e^{-\mu x} \frac{[I_0(Jx)]^d}{\sqrt{(2\pi x)}} \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi x}}, \quad (3.30)$$

e para $x \rightarrow \infty$:

$$e^{-\mu x} \frac{[I_0(Jx)]^d}{\sqrt{2\pi x}} \sim \frac{e^{-(\mu-dJ)x}}{\sqrt{(2\pi x)^{d+1}}}. \quad (3.31)$$

Utilizando os assintóticos acima, podemos observar que a integral na Eq. (3.22) é finita em $\mu = dJ$ apenas para $d = 2, 3, \dots$. Sendo assim, podemos definir uma constante de acoplamento crítica g_c a $T = 0$ para $d = 2, 3, \dots$. Já que para $g = g_c$ existe uma frequência natural nula no modelo $[\omega(k=0)]$, isto acarreta um comportamento singular na energia livre, Eq. (3.18).

3.3.1 Potencial Químico

Primeiro vamos analisar o potencial químico para temperaturas abaixo e acima da temperatura crítica $T_c \neq 0$. Fazendo $h = 0$ e $\mu = dJ$ na Eq. (3.22), obtemos a temperatura crítica:

$$T_c(g) = \frac{1}{2 \int_0^\infty dx \vartheta_3(e^{-(2\pi^2 T_c^2 x)/g})(e^{-Jx} I_0(Jx))^d}. \quad (3.32)$$

Podemos obter valores numéricos para os casos extremos da equação acima, conforme tabela abaixo:

d	$g_c(T = 0)$	$T_c(g = 0)$
2	0.6048910247J	-
3	1.205759447J	0.9891940061J
4	1.747053325J	1.613596654J
5	2.266683576J	2.162053476J

A Eq. (3.32) descreve uma linha crítica em $d \neq 1$ e no caso $d = 1$ só resta um ponto crítico.

(A) $T \lesssim T_c$.

Para temperaturas um pouco abaixo de T_c , a integral na Eq. (3.22) é dominada pelo seu valor em $\mu = dJ$, e desta forma obtemos a seguinte equação:

$$\frac{T}{4T_c} + \frac{h^2}{4(\mu - dJ)^2} = \frac{1}{4}. \quad (3.33)$$

A solução da equação acima é dada por:

$$\mu = dJ + (h/\sqrt{1 - T/T_c}). \quad (3.34)$$

(B) $T \gtrsim T_c$.

Podemos definir a integral na equação Eq. (3.22), como

$$R(\mu) = \int_0^\infty dx e^{-\mu x} \vartheta_3(e^{-(2\pi^2 T^2 x)/g}) (I_0(Jx))^d, \quad (3.35)$$

e a derivada $R'(\mu)$:

$$R'(\mu) = - \int_0^\infty x e^{-\mu x} \vartheta_3(e^{-(2\pi^2 T^2 x)/g}) (I_0(Jx))^d. \quad (3.36)$$

Utilizando o mesmo argumento que garantiu que $R(\mu)$ converge para $d = 3, 4, \dots$, podemos garantir que $R'(\mu)$ converge para $d = 4, 5, \dots$. Então temos que analisar a integral $R'(\mu)$ com cuidado para $d = 3$. Consideramos, inicialmente, o integrando de (3.36) no regime $Jx \ll 1$. Observamos, a partir das expansões de $I_0(Jx)$ e $\vartheta_3(e^{-(2\pi^2 T^2 x)/g})$, que tal termo dá uma contribuição não singular a $R'(\mu)$. Por outro lado, a contribuição do regime oposto $Jx \gg 1$ pode ser analisada considerando o limite inferior de integração como $[\kappa(\mu - dJ)]^{-1}$, com o fator numérico $\kappa \gtrsim 1$, e o limite assintótico $I_0(Jx) \sim e^{Jx}/\sqrt{2\pi Jx}$. Nesse caso, observamos, via integração por partes, que:

$$R'(\mu) \sim - [e^{-(1/\kappa-1)} \kappa^{d/2-1}] \frac{e^{-1}}{(dJ)^2} \left(\frac{d}{2\pi} \right)^{d/2} (dJ/(\mu - dJ))^{2-d/2}, \quad \mu \rightarrow dJ. \quad (3.37)$$

Para o caso $d = 4$ a integração por partes produz o seguinte resultado:

$$R'(\mu) \sim e^{-(1/\kappa-1)} \frac{e^{-1}}{(4J)^2} \left(\frac{4}{2\pi} \right)^4 \ln [dJ/(\mu - dJ)], \quad \mu \rightarrow dJ. \quad (3.38)$$

Assim como feito na Secção 2.2, adotaremos $\kappa \equiv 1$ no desenvolvimento a seguir; na análise da susceptibilidade na região crítica, estimaremos o valor de κ em comparação com os resultados de Joyce [6]. Com base na Eqs. (3.36)-(3.38), podemos escrever:

$$R(\mu) - R(dJ) \approx -\frac{e^{-1}}{dJ(d/2 - 1)} \left(\frac{d}{2\pi}\right)^{d/2} [(\mu - dJ)/dJ]^{d/2-1}, \quad (3.39)$$

em $d = 3$;

$$R(\mu) - R(dJ) \approx -\frac{(4/2\pi)^4 e^{-1}}{dJ} [(\mu - dJ)/dJ] \ln [(\mu - dJ)/dJ], \quad (3.40)$$

em $d = 4$;

$$R(\mu) - R(dJ) \approx R'(dJ)(\mu - dJ), \quad (3.41)$$

em $d = 5, 6, \dots$, já que $R'(\mu)$ converge para $\mu = dJ$.

Utilizando a restrição esférica $\frac{T}{2}R(\mu) \sim \frac{1}{4}$, obtemos os seguintes resultados para o potencial químico:

$$(\mu - dJ) \approx dJ \left[e(d/2 - 1)(2\pi/d)^{d/2} \frac{dJ}{2T_c} \right]^{1/(d/2-1)} (\tau)^{1/(d/2-1)}, \quad d = 3, \quad (3.42)$$

$$(\mu - dJ) \approx dJ \frac{(dJ/2T_c)e(\pi/2)^4\tau}{\ln[(dJ/2T_c)e(\pi/2)^4\tau]}, \quad d = 4, \quad (3.43)$$

$$\mu - dJ \approx \frac{1}{-2T_c R'(dJ)} \tau, \quad d = 5, 6, \dots, \quad (3.44)$$

onde $\tau = T/T_c - 1$.

(C) $g \lesssim g_c(T = 0)$.

Para valores de g ligeiramente abaixo de $g_c(T = 0)$, a integral na restrição esférica,

Eq. (3.29), é dominada pelo seu valor em $g = g_c$:

$$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{g}{g_c}} + \frac{h^2}{4(\mu - dJ)^2} = \frac{1}{4}, \quad (3.45)$$

cuja solução para $g \lesssim g_c$ é

$$\mu = dJ + h\sqrt{\frac{2}{1 - g/g_c}}. \quad (3.46)$$

(D) $g \gtrsim g_c(T = 0)$.

Podemos definir a integral na restrição esférica, Eq. (3.29), como

$$R(\mu) = \int_0^\infty dx e^{-\mu x} \frac{[I_0(Jx)]^d}{\sqrt{2\pi x}}, \quad (3.47)$$

e a restrição esférica fica escrita como $\sqrt{g/4}R(\mu) + (h^2/(4(\mu - dJ)^2)) = 1/4$. Os mesmos argumentos que garantiram a convergência de $R(\mu)$ em $d = 2, 3, \dots$, garantem a convergência da derivada $R'(\mu)$:

$$R'(\mu) = - \int_0^\infty dx x e^{-\mu x} \frac{[I_0(Jx)]^d}{\sqrt{2\pi x}}, \quad (3.48)$$

em $d = 2, 3, \dots$

Consideramos, inicialmente, o integrando de (3.48) no regime $Jx \ll 1$. Observamos, a partir das expansões de $I_0(Jx)$ e da função gama incompleta, que tal termo dá uma contribuição não-singular a $R'(\mu)$. Por outro lado, a contribuição no regime oposto $Jx \gg 1$ pode ser analisada considerando o limite inferior de integração como $[\kappa(\mu - dJ)]^{-1}$, com o fator numérico $\kappa \gtrsim 1$, e o limite assintótico

$I_0(Jx) \sim e^{Jx}/\sqrt{2\pi Jx}$. Nesse caso, observamos, via integração por partes, que:

$$R'(\mu) \sim -[e^{-(1/\kappa-1)}] \kappa^{(d+1)/2-1} \frac{(dJ)^{-3/2}}{e\sqrt{2\pi}} (d/2\pi)^{d/2} \left(\frac{\mu - dJ}{dJ} \right)^{(d-3)/2}, \quad \mu \rightarrow dJ, \\ d = 2. \quad (3.49)$$

Em $d = 3$ o mesmo tratamento fornece o resultado:

$$R'(\mu) \sim -e^{-(1/\kappa-1)} \frac{1}{4e\pi^2 J^{3/2}} \ln[(\mu - dJ)/dJ], \quad \mu \rightarrow dJ, \quad d = 3. \quad (3.50)$$

Assim como feito na Seção 2.2, adotaremos $\kappa \equiv 1$ no desenvolvimento a seguir; na análise da susceptibilidade na região crítica, estimaremos o valor de κ em comparação com os resultados de Chamati *et al.* [18]. Com base nas Eqs. (3.48)-(3.50),

$$R(\mu) - R(dJ) \sim -\frac{2}{ed\sqrt{2\pi dJ}} (d/2\pi)^{d/2} \left(\frac{\mu - dJ}{dJ} \right)^{(d-1)/2}, \quad \mu \rightarrow dJ, \quad d = 2, \quad (3.51)$$

e

$$R(\mu) - R(dJ) \sim -\frac{3}{4\pi^2 e\sqrt{J}} \left(\frac{\mu - dJ}{dJ} \right) \ln \left(\frac{\mu - dJ}{dJ} \right), \quad \mu \rightarrow dJ, \quad d = 3. \quad (3.52)$$

Utilizando $R(\mu) - R(dJ) \sim -\frac{1}{4\sqrt{g_c}} (g/g_c - 1)$, obtemos os resultados desejados para o potencial químico:

$$\mu - dJ \sim dJ \left[\frac{de}{8} \sqrt{\frac{2\pi dJ}{g_c}} (2\pi/d)^{d/2} \right]^{2/(d-1)} \tau^{2/(d-1)}, \quad \mu \rightarrow dJ, \quad d = 2, \quad (3.53)$$

e

$$\frac{\mu - dJ}{dJ} \rightarrow \left[\frac{\pi^2 e}{3} \sqrt{\frac{J}{g_c}} \tau \right] / \ln \left[\frac{\pi^2 e}{3} \sqrt{\frac{J}{g_c}} \tau \right], \quad \mu \rightarrow dJ, \quad d = 3. \quad (3.54)$$

Como $R'(\mu)$ converge em $d = 4$, obtemos

$$R(\mu) - R(dJ) \sim R'(dJ)(\mu - dJ), \quad (3.55)$$

e portanto:

$$\mu - dJ = -\frac{1}{4\sqrt{g_c}R'(dJ)}\tau, \quad (3.56)$$

onde $\tau = g/g_c - 1$.

Conforme observamos o potencial químico possui comportamento distintos acima e abaixo da temperatura (T_c) ou constante do acoplamento quântico (g_c). Em particular o potencial químico independe (depende) do campo magnético acima (abaixo) da temperatura crítica, fato que indica que o modelo deva apresentar susceptibilidade divergente apenas para temperaturas (constantes do acoplamento quântico) ligeiramente superiores a T_c (g_c).

3.4 Magnetização e Susceptibilidade

Para proceder ao cálculo da magnetização e da susceptibilidade, primeiro vamos escrever as variáveis de spin do modelo em termos das variáveis que diagonalizaram o Hamiltoniano do sistema, Eq. (3.11). Reescrevemos $S_{\vec{R}}$ em termos dos operadores de criação e destruição:

$$S_{\vec{R}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} (a_{\vec{R}} + a_{\vec{R}}^\dagger); \quad (3.57)$$

em seguida, introduzindo a transformada de Fourier do modelo, obtemos

$$S_{\vec{R}} = \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{\vec{k}} \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} a_{\vec{k}} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} a_{\vec{k}}^\dagger \right). \quad (3.58)$$

A conservação global do momento é explicitada através das definições:

$$\begin{aligned} S_{\vec{R}} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{\vec{k}}' \left(\Delta_{\vec{k}+} + \Delta_{\vec{k}+}^\dagger \right) \cos(\vec{k} \cdot \vec{R}) \\ &+ \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{\vec{k}}' \left(\Delta_{\vec{k}-} + \Delta_{\vec{k}-}^\dagger \right) i \sin(\vec{k} \cdot \vec{R}) \\ &+ \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \left(a_0 + a_0^\dagger \right), \end{aligned} \quad (3.59)$$

onde ' indica no somatório acima que, se $\vec{k}$ está incluído, então $-\vec{k}$ não está. Agora, utilizando os modelos tipo A descritos no apêndice B, obtemos o resultado desejado:

$$\begin{aligned} S_{\vec{R}} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}}' \left(\frac{g}{2(\mu - J_{\vec{k}})} \right)^{1/4} \cos(\vec{k} \cdot \vec{R}) \left(\alpha_{\vec{k}+} + \alpha_{\vec{k}+}^\dagger \right) \\ &+ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}}' \left(\frac{g}{2(\mu - J_{\vec{k}})} \right)^{1/4} i \sin(\vec{k} \cdot \vec{R}) \left(\alpha_{\vec{k}-} + \alpha_{\vec{k}-}^\dagger \right) \\ &+ \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2(\mu - J_0)} \right)^{1/4} \left(\alpha_0 + \alpha_0^\dagger \right) + \frac{h}{2(\mu - J_0)}. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Podemos ainda utilizar as seguintes médias térmicas:

$$\begin{aligned} \langle \Delta_r \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Tr}(\Delta_r e^{-\beta H}) \\ \prod_r \sum_{n_r=0}^{\infty} (1 - e^{-\beta \omega_r}) (n_r | \Delta_r | n_r) e^{-\beta \omega_r n_r} &= 0, \end{aligned} \quad (3.61)$$

pois a média quântica $\langle n_r | \Delta_r | n_r \rangle$ é nula, pois o operador Δ_r não conserva o número de bósons do sistema e, portanto, não comuta com o Hamiltoniano, Eq. (3.15). Na equação acima, $r = \{\vec{k}+, \vec{k}-, 0\}$, $\Delta_r = \{\alpha_{\vec{k}+}, \alpha_{\vec{k}-}, \alpha_0\}$ e $\omega_r = \omega_{\vec{k}}$. Da mesma maneira temos que $\langle \Delta_r^\dagger \rangle = 0$. Deste modo, obtemos a magnetização:

$$M = \langle S_{\vec{R}} \rangle = \frac{h}{2(\mu - dJ)}. \quad (3.62)$$

Para o caso antiferromagnético o sinal de J na equação acima é invertido, destruindo o pólo presente na equação e com isso a possibilidade de quebra espontânea de simetria. Entretanto, através da presença de um campo magnético *staggered* este pólo é recuperado, conforme demonstrado nas Eqs. (4.32) e (4.33) do capítulo 4. Consequentemente o comportamento crítico é o mesmo para os dois casos.

Vamos agora analisar os regimes de temperaturas abaixo e acima da crítica.

(A) $T \lesssim T_c$.

Com o uso da Eq. (3.62), podemos reescrever a restrição esférica para valores ligeiramente abaixo de T_c , Eq. (3.33), como

$$\frac{T}{4T_c} + M^2 = \frac{1}{4}. \quad (3.63)$$

Resolvendo a equação acima para a magnetização, obtemos

$$M = \frac{1}{2} \sqrt{1 - T/T_c}. \quad (3.64)$$

Observamos que o expoente crítico β , definido por $M \sim (1 - T/T_c)^\beta$, é $\beta = 1/2$ para qualquer dimensão onde exista transição a temperatura finita.

(B) $T \gtrsim T_c$.

Utilizando a definição expressa pela Eq. (3.35) e a magnetização, Eq. (3.62), obtemos

$$\frac{T}{2} + M^2 = \frac{1}{4}. \quad (3.65)$$

Invertendo a equação da magnetização para obter o potencial químico, temos

$$\mu = dJ + \frac{h}{2M}. \quad (3.66)$$

Combinando as Eqs. (3.65) e (3.66) obtemos a equação de estado,

$$\frac{T}{2}R\left(dJ + \frac{h}{2M}\right) + M^2 = \frac{1}{4}. \quad (3.67)$$

Utilizando a temperatura crítica $\frac{T_c}{2}R(dJ) = \frac{1}{4}$, a equação de estado pode ser escrita como

$$M^2 + \frac{T}{2}R\left(dJ + \frac{h}{2M}\right) - \frac{T_c}{2}R(dJ) = 0, \quad (3.68)$$

onde $\tau = T/T_c - 1$.

Combinando os resultados, Eqs. (3.39)-(3.41), e a equação de estado acima, obtemos

$$h \sim 2dJ \left[(2\pi/d)^{d/2} e^{(d/2-1)} \frac{2dJ}{T_c} \right]^{1/[(d/2)-1]} M(M^2 + \tau/4)^{1/[(d/2)-1]}, \quad d = 3, \quad (3.69)$$

$$h \sim 2dJ \frac{[(2dJ/T_c)(2/\pi)^4 e M(M^2 + \tau/4)]}{\ln [(2dJ/T_c)(2/\pi)^4 e (M^2 + \tau/4)]}, \quad d = 4, \quad (3.70)$$

e

$$h \sim \frac{4}{-T_c R'(dJ)} M(M^2 + \tau/4), \quad d = 4, 6, \dots \quad (3.71)$$

No caso em que $T = T_c$ ($\tau = 0$), as equações acima resultam:

$$h \sim 2dJ \left[(2\pi/d)^{d/2} e(d/2 - 1)(2dJ/T_c) \right]^{1/[(d/2)-1]} M^{(d+2)/(d-2)}, \quad d = 3, \quad (3.72)$$

$$h \sim 2dJ \frac{(2dJ/T_c)(2/\pi)^4 e}{\ln[(2dJ/T_c)(2/\pi)^4 e M^2]} M^3, \quad d = 4, \quad (3.73)$$

e

$$h \sim \frac{4}{-T_c R'(dJ)} M^3, \quad d = 4, 6, \dots \quad (3.74)$$

Observamos que o expoente crítico δ , definido por $M \sim h^{1/\delta}$, vale $\delta = (d+2)/(d-2)$ em $d = 3$ e $\delta = 3$ em $d = 4, 5, \dots$, com a esperada dependência logarítmica na dimensão crítica superior ($d = 4$).

(C) $g \lesssim g_c(T = 0)$.

Utilizando a equação da magnetização, Eq. (3.62), e a restrição esférica, Eq. (3.45), podemos obter uma equação para a magnetização:

$$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{g}{g_c}} + M^2 = \frac{1}{4}, \quad (3.75)$$

cuja solução é

$$M = \frac{1}{2} \sqrt{1 - \sqrt{g/g_c}} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1 - g/g_c}{1 + \sqrt{g/g_c}}}. \quad (3.76)$$

Observamos que o expoente crítico β , definido por $M \sim (1 - g/g_c)^\beta$, é $\beta = 1/2$ para qualquer dimensão onde exista uma transição quântica ($g_c \neq 0$).

(D) $g \gtrsim g_c$.

Utilizando a definição para $R(\mu)$, Eq. (3.47), e a equação para a magnetização, Eq. (3.62), obtemos

$$\sqrt{g/(4)} R(\mu) + M^2 = 1/4. \quad (3.77)$$

Agora invertendo a Eq. (3.62) em favor de μ , obtemos a seguinte equação de estado:

$$\sqrt{g/(4)}R(dJ + h/(2M)) + M^2 = 1/4. \quad (3.78)$$

Combinando os resultados obtidos nas Eqs. (3.51), (3.52) e (3.55) com a equação de estado, Eq. (3.78), obtemos os seguintes resultados:

$$h \sim 2dJ \left[de\sqrt{(2\pi dJ)/g_c}(2\pi/d)^{d/2} \right]^{2/(d-1)} M(M^2 + \tau/8)^{2/(d-1)}, \quad d = 2, \quad (3.79)$$

$$h \sim 2dJ \frac{8\pi e^2}{3} \sqrt{J/g_c} \frac{M(M^2 + \tau/8)}{\ln \left\{ [(8\pi^2 e)/3] \sqrt{J/g_c} (M^2 + \tau/8) \right\}}, \quad d = 3 \quad (3.80)$$

e

$$h \sim \frac{4}{-\sqrt{g_c}R'(dJ)} M(M^2 + \tau/8), \quad d = 4, 5, \dots, \quad (3.81)$$

onde, agora, $\tau = g/g_c - 1$. Os resultados acima para $g = g_c$ são:

$$h \sim 2dJ \left[de\sqrt{(2\pi dJ)/g_c}(2\pi/d)^{d/2} \right]^{2/(d-1)} M^{(d+3)/(d-1)}, \quad d = 2 \quad (3.82)$$

$$h \sim 2dJ \frac{8\pi^2 e}{3} \sqrt{J/g_c} \left\{ \ln \left[\frac{8\pi^2 e}{3} \sqrt{J/g_c} M^2 \right] \right\}^{-1} M^3, \quad d = 3 \quad (3.83)$$

e

$$h \sim \frac{4}{-\sqrt{g_c}R'(dJ)} M^3, \quad d = 4, 5, 6, \dots \quad (3.84)$$

Observamos que o expoente crítico δ , definido por $M \sim h^{1/\delta}$ é $\delta = (d+3)/(d-1)$ em $d = 2$ e $\delta = 3$ para $d = 3, 4, \dots$, com a esperada dependência logarítmica na dimensão crítica superior ($d = 3$).

3.4.1 Susceptibilidade

A susceptibilidade do modelo pode ser obtida derivando a Eq. (3.62) para a magnetização com respeito ao campo magnético h . Esta operação resulta em

$$\chi = \frac{1}{2(\mu - dJ)} - \frac{h}{2(\mu - dJ)^2} \left(\frac{\partial \mu}{\partial h} \right). \quad (3.85)$$

Em particular a susceptibilidade a campo nulo é

$$\chi(h = 0) = \frac{1}{2(\mu - dJ)}. \quad (3.86)$$

(A) $T \lesssim T_c$.

A susceptibilidade neste regime é infinita.

(B) $T \gtrsim T_c$.

A susceptibilidade a campo nulo, Eq. (3.86), apresenta comportamentos distintos na região próxima da temperatura crítica, no que diz respeito à dimensão do modelo. Substituindo os resultados obtidos para o potencial químico, Eqs. (3.42)-(3.44), obtemos

$$\chi(h = 0) \sim \frac{[\kappa e^{\{[2(1-\kappa)]/[(2-d)\kappa]\}}]}{2dJ} [e(d/2 - 1)(2\pi/d)^{d/2}(dJ/2T_c)]^{-1/(d/2-1)} \tau^{-2/(d-2)},$$

$$d = 3, \quad (3.87)$$

$$\chi(h = 0) \sim [e^{-(1/\kappa-1)}/(2dJ)] \frac{\ln [e^{(1/\kappa-1)}(dJ/2T_c)e(\pi/2)^4\tau]}{(dJ/2T_c)e(\pi/2)^4} \tau^{-1}, \quad d = 4, \quad (3.88)$$

e

$$\chi(h=0) \sim \frac{T_c}{-R'(dJ)\tau}, \quad d=5, 6, \dots \quad (3.89)$$

onde $\tau = T/T_c - 1$. Observamos que o expoente crítico definido por $\chi \sim \tau^{-\gamma}$, é $\gamma = 2/(d-2)$ em $d=3$ e $\gamma = 1$ em $d=4, 5, \dots$, com a esperada dependência logarítmica na dimensão crítica superior ($d=4$). Comparando o coeficiente obtido na Eq. (3.87), $1/\pi^3 e^2$, com o obtido por Joyce [6], $27/(8\pi^2)$, obtemos a seguinte equação para κ :

$$\kappa = \left(\frac{27\pi}{8} \right) e^{2/\kappa}, \quad (3.90)$$

cuja solução é $\kappa \approx 12,463$.

(C) $g \lesssim g_c(T=0)$.

A susceptibilidade neste regime é infinita.

(D) $g \gtrsim g_c(T=0)$.

Neste regime podemos obter o comportamento assintótico da susceptibilidade a campo nulo próximo de g_c . Para isto utilizamos os resultados das Eqs. (3.53)-(3.56) em conjunto com a susceptibilidade a campo nulo, Eq. (3.86). Os resultados são

$$\chi(h=0) \sim \frac{e^{\{[2(1-\kappa)]/[(1-d)\kappa]\}}}{2dJ} \left[\frac{de}{8} \sqrt{(2\pi dJ)/g_c} (2\pi/d)^{d/2} \right]^{-2/(d-1)} \tau^{-2/(d-1)}, \quad (3.91)$$

$d=2,$

$$\chi(h=0) \sim \frac{e^{-(1/\kappa-1)}}{2dJ} \left(\frac{3}{\pi^2 e} \sqrt{g_c/J} \right) \ln \left\{ [(\pi^2 e)/3] \sqrt{J/g_c} \tau \right\} \tau^{-1}, \quad d=3, \quad (3.92)$$

e

$$\chi(h=0) \sim \frac{-4\sqrt{g_c}R'(dJ)}{\tau}, \quad d=4, 5, \dots \quad (3.93)$$

onde $\tau = g/g_c - 1$. Observamos que o expoente crítico γ , definido por $\chi \sim \tau^{-\gamma}$, é $\gamma = 2/(d-1)$ em $d = 2$ e $\gamma = 1$ em $d = 3, 4, \dots$, com a esperada dependência logarítmica na dimesão crítica superior ($d = 3$). Comparando o coeficiente obtido na Eq. (3.91), $1/(e^2\pi^3)$, com o obtido por Chamati *et al.* [18], $1/(16\pi^2)$, obtemos a seguinte equação para κ :

$$\kappa = \left(\frac{\pi}{16}\right) e^{2/\kappa}, \quad (3.94)$$

cuja solução é $\kappa \approx 1,295$. Note que este valor de κ para o caso quântico é cerca de dez vezes menor que o valor correspondente para o caso clássico, Eqs. (2.55) e (3.90). Isso indica que, no caso clássico, o regime intermediário dos integrandos das Eqs. (2.26) e (3.36) dá uma contribuição relativamente maior do que o integrando de (3.48) no caso quântico.

3.5 Funções de Correlação

Para obtermos as funções de correlação, primeiro vamos utilizar a Eq. (3.60) para explicitar o produto de duas variáveis de spin:

$$\begin{aligned}
S_{\vec{R}} S_{\vec{R}'} &= \frac{1}{N} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/2} \sum_{\vec{k}}' \sum_{\vec{p}}' \left[\alpha_{\vec{k}+} \alpha_{\vec{p}+} + \alpha_{\vec{k}+} \alpha_{\vec{p}+}^{\dagger} + \alpha_{\vec{k}+}^{\dagger} \alpha_{\vec{p}+} + \alpha_{\vec{k}+}^{\dagger} \alpha_{\vec{p}+}^{\dagger} \right] \cos(\vec{k} \cdot \vec{R}) \cos(\vec{p} \cdot \vec{R}) \\
&- \frac{1}{N} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/2} \sum_{\vec{k}}' \sum_{\vec{p}}' \left[\alpha_{\vec{k}-} \alpha_{\vec{p}-} + \alpha_{\vec{k}-} \alpha_{\vec{p}-}^{\dagger} + \alpha_{\vec{k}-}^{\dagger} \alpha_{\vec{p}-} + \alpha_{\vec{k}-}^{\dagger} \alpha_{\vec{p}-}^{\dagger} \right] \sin(\vec{k} \cdot \vec{R}) \sin(\vec{p} \cdot \vec{R}) \\
&\frac{i}{N} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/2} \sum_{\vec{k}}' \sum_{\vec{p}}' \left[\alpha_{\vec{k}+} \alpha_{\vec{p}-} + \alpha_{\vec{k}+} \alpha_{\vec{p}-}^{\dagger} + \alpha_{\vec{k}+}^{\dagger} \alpha_{\vec{p}-} + \alpha_{\vec{k}+}^{\dagger} \alpha_{\vec{p}-}^{\dagger} \right] \cos(\vec{k} \cdot \vec{R}) \sin(\vec{p} \cdot \vec{R}) \\
&\frac{i}{N} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/2} \sum_{\vec{k}}' \sum_{\vec{p}}' \left[\alpha_{\vec{k}-} \alpha_{\vec{p}+} + \alpha_{\vec{k}-} \alpha_{\vec{p}+}^{\dagger} + \alpha_{\vec{k}-}^{\dagger} \alpha_{\vec{p}+} + \alpha_{\vec{k}-}^{\dagger} \alpha_{\vec{p}+}^{\dagger} \right] \sin(\vec{k} \cdot \vec{R}) \cos(\vec{p} \cdot \vec{R}) \\
&+ \frac{1}{\sqrt{2}N} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/2} \sum_{\vec{k}}' \left[a_0 \alpha_{\vec{k}+} + a_0 \alpha_{\vec{k}+}^{\dagger} + a_0^{\dagger} \alpha_{\vec{k}+} + a_0^{\dagger} \alpha_{\vec{k}+}^{\dagger} \right] \cos(\vec{k} \cdot \vec{R}) \\
&\frac{i}{\sqrt{2}N} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/2} \sum_{\vec{k}}' \left[a_0 \alpha_{\vec{k}-} + a_0 \alpha_{\vec{k}-}^{\dagger} + a_0^{\dagger} \alpha_{\vec{k}-} + a_0^{\dagger} \alpha_{\vec{k}-}^{\dagger} \right] \sin(\vec{k} \cdot \vec{R}) \\
&+ \frac{h}{2\sqrt{N}(\mu - J_0)} \sum_{\vec{k}}' \left(\frac{g}{2(\mu - J_{\vec{k}})} \right)^{1/4} \left(\alpha_{\vec{k}+} + \alpha_{\vec{k}+}^{\dagger} \right) \cos(\vec{k} \cdot \vec{R}) \\
&+ i \frac{h}{2\sqrt{N}(\mu - J_0)} \sum_{\vec{k}}' \left(\frac{g}{2(\mu - J_{\vec{k}})} \right)^{1/4} \left(\alpha_{\vec{k}-} + \alpha_{\vec{k}-}^{\dagger} \right) \sin(\vec{k} \cdot \vec{R}) + \frac{h^2}{4(\mu - J_0)^2}.
\end{aligned} \tag{3.95}$$

Considere agora as médias térmicas de dois operadores:

$$\begin{aligned}\langle \Delta_r^\dagger \Delta_s \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Tr} e^{-\beta H} \\ &= \left[\prod_r (1 - e^{-\beta \omega_r}) \right] \sum_{n_1=0, n_2=0, \dots}^{n_1=\infty, n_2=\infty, \dots} (n_r n_s | \Delta_r^\dagger \Delta_s | n_r n_s) e^{-\beta \omega_r n_r} e^{-\beta \omega_s n_s},\end{aligned}\quad (3.96)$$

onde $\Delta_r = \{\alpha_{\vec{k}+}, \alpha_{\vec{k}-}, \alpha_0\}$, $r = \{\vec{k}+, \vec{k}-, 0\}$ e $\omega_r = \omega_{\vec{k}}$. Como a média quântica vale $(n_r n_s | \Delta_r^\dagger \Delta_s | n_r n_s) = \delta_{r,s} n_r$, a Eq. (3.96) resulta:

$$\langle \Delta_r^\dagger \Delta_s \rangle = \frac{\delta_{r,s}}{e^{\beta \omega_r} - 1}, \quad (3.97)$$

e de maneira análoga obtemos as outras médias de dois operadores:

$$\langle \Delta_r \Delta_s \rangle = 0, \quad \langle \Delta_r^\dagger \Delta_s^\dagger \rangle = 0, \quad \langle \Delta_r \Delta_s^\dagger \rangle = \frac{\delta_{r,s} e^{\beta \omega_r}}{e^{\beta \omega_r} - 1}. \quad (3.98)$$

Com o uso das médias, Eqs. (3.97) e (3.98), na Eq. (3.95), obtemos o resultado desejado:

$$G(\vec{R}, \vec{R}') = \langle S_{\vec{R}} S_{\vec{R}'} \rangle - \langle S_{\vec{R}} \rangle \langle S_{\vec{R}'} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{g}{2\omega_{\vec{k}}} \coth \left(\beta \frac{\omega_{\vec{k}}}{2} \right) \cos(\vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{R}')). \quad (3.99)$$

Utilizando a expansão da cotangente hipérbolica em frações parciais, Eq. (3.20), e o resultado da Eq. (2.15), podemos reescrever a função de correlação $G(\vec{R}, \vec{R}')$:

$$G(\vec{R}, \vec{R}') = \frac{T}{2} \int_0^\infty dx \vartheta_3 \left(e^{-(2\pi^2 T^2 x)/g} \right) e^{-\mu x} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{J_{\vec{k}} x} \cos(\vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{R}')) \quad (3.100)$$

Utilizando a fórmula de Euler-Maclaurin para $N \gg 1$, podemos reescrever o último termo da integral Eq. (3.100) como

$$\frac{1}{N} \mathbf{Re} \sum_{\vec{k}} e^{J_{\vec{k}} x} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{R}')} \sim \prod_{i=1}^d \int_0^\pi \frac{dk_i}{\pi} e^{Jx \cos k_i} \cos n_i k_i, \quad (3.101)$$

e utilizando o resultado da Eq. (2.64) obtemos uma fórmula bastante útil para a função de correlação:

$$G(\vec{R}, \vec{R}') = \frac{T}{2} \int_0^\infty dx \vartheta_3 \left(e^{-(2\pi^2 T^2 x)/g} \right) e^{-\mu x} \prod_{i=1}^d I_{n_i}(Jx), \quad (3.102)$$

onde $\vec{R} - \vec{R}' = \sum_{i=1}^d n_i \vec{e}_i$.

(B) $T \gtrsim T_c$.

Fazendo a mudança de variáveis $y = (\mu - dJ)x$ na integral da Eq. (3.102), obtemos

$$G(\vec{R}, \vec{R}') = \frac{T}{2(\mu - dJ)} \int_0^\infty dx \vartheta_3 \left(e^{-(2\pi^2 T^2 y)/(g(\mu - dJ))} \right) e^{-(\mu/(\mu - dJ))x} \prod_{i=1}^d I_{n_i} \left(\frac{J}{\mu - dJ} \right). \quad (3.103)$$

Utilizando os seguintes assintóticos:

$$I_n(a) \sim \frac{e^{x - \frac{n^2}{2x}}}{\sqrt{2\pi x}}, \quad x \rightarrow \infty, \quad (3.104)$$

$$\vartheta(q) \sim 1, \rightarrow q \rightarrow \infty, \quad (3.105)$$

válidos quando $\mu \rightarrow dJ$, $T \rightarrow T_c$, e a integral da Eq. (2.68), obtemos

$$G(\vec{R}, \vec{R}') = \frac{(T/J)}{2(2\pi)^{d/2}} \left(\frac{1}{r\xi} \right)^{(d-2)/2} K_{(d-2)/2} \left(\frac{r}{\xi} \right), \quad (3.106)$$

onde $r^2 = \sum_{i=1}^d n_i^2$ e $\xi = \frac{1}{\sqrt{2\phi}} = 1/\sqrt{2(\mu/J - d)}$, sendo ξ o comprimento de correlação do modelo.

Para $r \gg 1$, podemos utilizar o assintótico da Eq. (2.62) na Eq. (3.106) para obter:

$$G(\vec{R}, \vec{R}') \sim \frac{(T/J)}{2\xi^{(d-3)/2}(2\pi r)^{(d-1)/2}} e^{-r/\xi}, \quad r \rightarrow \infty, \quad (3.107)$$

o que identifica ξ como o comprimento de correlação do sistema.

Para obter o valor assintótico da Eq. (3.106) em $T = T_c$ basta utilizar o assintótico da Eq. (2.72):

$$G(\vec{R}, \vec{R}') \sim \frac{\Gamma((d-2)/2)(T_c/J)}{4(\pi)^{d/2}} \frac{1}{r^{d-2}}, \quad d = 3, 4, \dots \quad (3.108)$$

Observamos que o expoente crítico η , definido por $G(\vec{R}, \vec{R}') \sim |\vec{R} - \vec{R}'|^{-(d-2+\eta)}$, é $\eta = 0$.

(D) $g \gtrsim g_c(T = 0)$.

Em $T = 0$ podemos utilizar o assintótico $\vartheta_3(q) \sim \sqrt{-\pi/\ln q}$, $q \rightarrow 1$, para escrever a função de correlação:

$$\frac{\sqrt{g}}{2} \int_0^\infty dx e^{-\mu x} \frac{\prod_{i=1}^d I_{n_i}(Jx)}{\sqrt{2\pi x}}. \quad (3.109)$$

Para obtermos o comportamento assintótico da Eq. (3.109) para valores próximos de $g = g_c$, fazamos a mudança de variáveis $y = (\mu - dJ)x$ na Eq. (3.109):

$$G(\vec{R}, \vec{R}') = \frac{\sqrt{g}}{2} \int_0^\infty e^{-(\mu x)/(\mu - dJ)} \frac{\prod_{i=1}^d I_{n_i}(Jx/(\mu - dJ))}{\sqrt{2\pi x}} \frac{dx}{\sqrt{\mu - dJ}}. \quad (3.110)$$

Utilizando a Eq. (3.104) na Eq. (3.109) e a integral Eq. (2.68), obtemos

$$G(\vec{R}, \vec{R}') = \frac{\sqrt{g/J}}{2(2\pi)^{(d+1)/2}} \left(\frac{1}{r\xi} \right)^{(d-1)/2} K_{(d-1)/2} \left(\frac{r}{\xi} \right), \quad (3.111)$$

onde $\xi = \frac{1}{\sqrt{2\phi}} = 1/\sqrt{2(\mu/J - d)}$.

Note que a Eq. (3.111) difere da Eq. (3.106) essencialmente pelo fato de na primeira $d \rightarrow d + z$, onde $z = 1$ é o expoente dinâmico do sistema, e pela mudança $(T/J) \rightarrow \sqrt{g/J}$. Fato este que pode ser obtido das frequências naturais do sistema, considerando $\mu = dJ$ e $k \rightarrow 0$: $\omega_{\vec{k}} \sim \sqrt{2g(\mu - dJ) + gJk^2} \sim \sqrt{gJ}k \sim k^z$. Este resultado confirma o expoente dinâmico sendo $z = 1$.

Para verificarmos que ξ é comprimento de correlação do sistema basta utilizar o assintótico da Eq. (2.62) na Eq. (3.111) para obter

$$G(\vec{R}, \vec{R}') \sim \frac{\sqrt{g/J}}{2\xi^{(d-2)/2}(2\pi r)^{d/2}} e^{-r/\xi}. \quad (3.112)$$

Este resultado confirma que ξ é o comprimento de correlação do sistema.

Em seguida podemos considerar o limite em que $g = g_c$. Sendo assim, usando a Eq. (2.72) na Eq. (3.111) obtemos o resultado:

$$G(\vec{R}, \vec{R}') \sim \frac{\sqrt{g_c/J}\Gamma((d-1)/2)}{4\pi^{(d+1)/2}} \frac{1}{r^{d-1}}. \quad (3.113)$$

O resultado acima confirma que o expoente dinâmico é $z = 1$ e que o expoente $\eta = 0$.

3.5.1 Comprimento de Correlação

Seja no ponto crítico em temperatura finita (T_c) ou na transição quântica (g_c), o comprimento de correlação do modelo nas vizinhanças da transição é

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{2(\mu/J - d)}}. \quad (3.114)$$

Em particular, note que sempre temos a relação $\chi \sim \xi^2$, entre a susceptibilidade e o comprimento de correlação [13].

(B) $T \gtrsim T_c$.

Com o uso das Eqs. (3.42)-(3.44) e da Eq. (3.114) podemos obter os seguintes resultados:

$$\xi \sim (2d)^{-1/2} [e^{-1}(d/2 - 1)(2\pi/d)^{d/2}(dJ/2T_c)]^{-1/(d-2)} \tau^{-1/(d-2)}, \quad d = 3, \quad (3.115)$$

$$\xi \sim (2d)^{-1/2} \left\{ \frac{(dJ/2T_c)e(\pi/2)^4}{\ln[(dJ/2T_c)e(\pi/2)^4\tau]} \right\}^{1/2} \tau^{-1/2}, \quad d = 4, \quad (3.116)$$

e

$$\xi \sim \sqrt{-T_c J R'(dJ)} \tau^{-1/2}, \quad d = 5, 6, \dots, \quad (3.117)$$

onde $\tau = T/T_c - 1$. Observamos que o expoente crítico ν , definido por $\xi \sim \tau^{-\nu}$ é $\nu = 1/(d-2)$ para $d = 3$ e $\nu = 1/2$ para $d = 4, 5, \dots$, com a esperada dependência logarítmica na dimensão crítica superior ($d = 4$).

(D) $g \gtrsim g_c(T = 0)$.

Combinando as Eqs. (3.53), (3.54) e (3.56) e a Eq. (3.114) para o comprimento

de correlação, obtemos os seguintes resultados nas vizinhanças de g_c :

$$\xi \sim \frac{1}{\sqrt{2d}} \left[\frac{de}{8} \sqrt{(2\pi dJ)/g_c} (2\pi/d)^{d/2} \right]^{-1/(d-1)} \tau^{-1/(d-1)}, \quad d = 2, \quad (3.118)$$

$$\xi \sim \frac{1}{\sqrt{2d}} \left\{ \frac{\ln \left\{ [(\pi^2 e)/3] \sqrt{J/g_c} \tau \right\}}{[(\pi^2 e)/3] \sqrt{J/g_c}} \right\}^{1/2} \tau^{-1/2}, \quad d = 3, \quad (3.119)$$

e

$$\xi \sim \sqrt{-2J\sqrt{g_c}R'(dJ)\tau^{-1/2}}, \quad d = 4, 5, \dots, \quad (3.120)$$

onde $\tau = g/g_c - 1$. Observamos que o expoente crítico ν definido por $\xi \sim \tau^{-\nu}$, é $\nu = 1/(d-1)$ para $d = 2$ e $\nu = 1/2$ para $d = 2, 3, \dots$, com a esperada dependência logarítmica na dimensão crítica superior ($d = 3$).

3.6 Entropia e Calor Específico

Podemos obter uma expressão para a entropia derivando diretamente a expressão Eq. (3.18) conjuntamente com a restrição esférica, Eq. (3.19):

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \sum_{\vec{k}} \frac{\beta\omega_{\vec{k}}}{e^{\beta\omega_{\vec{k}}} - 1} - \sum_{\vec{k}} \ln(1 - e^{-\beta\omega_{\vec{k}}}). \quad (3.121)$$

De maneira análoga podemos obter uma expressão para o calor específico a partir da expressão Eq. (3.121):

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} = \sum_{\vec{k}} \frac{e^{\beta\omega_{\vec{k}}} (\beta\omega_{\vec{k}})^2}{e^{\beta\omega_{\vec{k}}} - 1} \left(1 - \frac{g}{\omega_{\vec{k}}^2} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right). \quad (3.122)$$

Note que a expressão para o calor específico possui um fator com a aparência de bósons livres multiplicado por um fator com uma derivada do potencial químico semelhante à expressão Eq. (2.79).

(A) $T \ll T_c$ e $h \neq 0$.

Como a frequência natural do sistema pode ser aproximada por

$$\omega_{\vec{k}} \approx \sqrt{2g(\mu - dJ)} \left(1 + (J/(4(\mu - dJ)))k^2\right), \quad (3.123)$$

podemos obter uma expressão para o calor específico e para a entropia em baixas temperaturas e campo magnético finito. Primeiro considere o termo dominante em baixas temperaturas para a entropia, Eq. (3.121), e o calor específico, Eq. (3.122) :

$$S \sim \sum_{\omega_{\vec{k}}} \beta \omega_{\vec{k}} e^{-\beta \omega_{\vec{k}}}, \quad T \ll T_c, \quad (3.124)$$

$$C \sim \sum_{\omega_{\vec{k}}} (\beta \omega_{\vec{k}})^2 e^{-\beta \omega_{\vec{k}}}, \quad T \ll T_c. \quad (3.125)$$

Em seguida transformemos a soma em $\vec{k}$ em uma integral, utilizando a fórmula de Euler-Maclaurin para $N \gg 1$:

$$S \sim N \prod_{i=1}^d \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_i}{2\pi} (\beta \omega_{\vec{k}}) e^{-\beta \omega_{\vec{k}}}, \quad (3.126)$$

$$C \sim N \prod_{i=1}^d \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_i}{2\pi} (\beta \omega_{\vec{k}})^2 e^{-\beta \omega_{\vec{k}}}. \quad (3.127)$$

Em baixas temperaturas, ou $\beta \rightarrow \infty$, o fator gaussiano nas integrais, Eqs. (3.126) e (3.127), só é apreciável para valores próximos de $\vec{k} = 0$, onde, de acordo com o

resultado da Eq. (3.123) a frequência natural do sistema tem um mínimo. Sendo assim, podemos substituir os integrandos nas Eqs. (3.126) e (3.127):

$$S \sim N\beta\sqrt{2g(\mu - dJ)}e^{-\beta\sqrt{2g(\mu - dJ)}}\left(\int_{-\pi/s}^{\pi/s}\frac{dx}{\sqrt{s}}e^{-x^2}\right)^d, \quad T \ll T_c, \quad (3.128)$$

e

$$C \sim N(\beta\sqrt{2g(\mu - dJ)})^2e^{-\beta\sqrt{2g(\mu - dJ)}}\left(\int_{-\pi/s}^{\pi/s}\frac{dx}{\sqrt{s}}e^{-x^2}\right)^d, \quad T \ll T_c, \quad (3.129)$$

onde $s = \frac{J}{4(\mu_0 - dJ)}(\Theta/T)$, $\mu_0 = \mu(T = 0, h \neq 0)$ e $\Theta = \sqrt{2g(\mu_0 - dJ)}$. Finalmente, fazendo a integral restante para $s \rightarrow \infty$, obtemos o comportamento desejado em baixas temperaturas:

$$\frac{S}{N} \sim D\left(\frac{\Theta}{T}\right)^{1-d/2}\exp\left(-\frac{\Theta}{T}\right), \quad (T/J) \rightarrow 0, \quad (3.130)$$

$$\frac{C}{N} \sim D\left(\frac{\Theta}{T}\right)^{2-d/2}\exp\left(-\frac{\Theta}{T}\right), \quad (T/J) \rightarrow 0, \quad (3.131)$$

$$D = \sqrt{4\pi(\mu_0/J - d)}.$$

Note que a dependência com a temperatura da entropia, Eq. (3.130), e do calor específico, Eq. (3.132), é composta de uma dependência típica de um modelo de Einstein $[T^{-2}\exp(-\Theta/T)]$ e de um modelo de onda de spin $(T^{d/2})$. Esta dependência mista é fruto do comportamento da frequência natural do sistema para baixos valores de $\vec{k}$: $\omega \sim \Theta + Bk^2$, a qual possui um “gap” Θ tipo modelo de Einstein, e um termo quadrático tipo onda de spin. Observamos que existe uma dependência similar no modelo Heisenberg ferromagnético quântico em uma dimensão [44].

(B) $T \gtrsim T_c$.

A expressão para o calor específico, Eq. (3.122), pode ser utilizada para obter o comportamento do calor específico a campo nulo nas vizinhanças da temperatura crítica T_c . Considere primeiro o limite de temperaturas abaixo de T_c . Neste caso utilizando a Eq. (3.34) temos:

$$C(T \lesssim T_c) \sim \sum_{\omega_{\vec{k}}} \frac{e^{\beta\sqrt{2g(dJ-J_{\vec{k}})}} \beta^2 2g(dJ - J_{\vec{k}})}{e^{\beta\sqrt{2g(dJ-J_{\vec{k}})}} - 1}, \quad (3.132)$$

já que na situação de campo nulo o potencial químico independe da temperatura para valores abaixo de T_c . Para temperaturas ligeiramente superiores a T_c , o termo que contém uma derivada na Eq. (3.122) se torna relevante:

$$\begin{aligned} C(T \gtrsim T_c) &\sim C(T \lesssim T_c) - \sum_{\omega_{\vec{k}}} \frac{1}{2(dJ - J_{\vec{k}})} \frac{e^{\beta\sqrt{2g(dJ-J_{\vec{k}})}} \beta^2 2g(dJ - J_{\vec{k}})}{e^{\beta\sqrt{2g(dJ-J_{\vec{k}})}} - 1} \frac{\partial \mu}{\partial T} \\ &= C(T \lesssim T_c) - A \frac{\partial \mu}{\partial T}. \end{aligned} \quad (3.133)$$

Utilizando o resultado acima, Eq. (3.133), e os resultados obtidos para o potencial químico, Eqs. (3.42)-(3.44), obtemos

$$\begin{aligned} C(T \gtrsim T_c) - C(T \lesssim T_c) &\sim -\frac{2AdJ}{(d-2)T_c} [e(d/2-1)(2\pi/d)^{d/2}(dJ/2T_c)]^{2/(d-2)} \times \\ &\quad \tau^{-(d-4)/(d-2)}, \quad d=3, \end{aligned} \quad (3.134)$$

$$C(T \gtrsim T_c) - C(T \lesssim T_c) \sim -\frac{AdJ}{T_c} \frac{(dJ/2T_c)e(\pi/2)^4}{\ln[(dJ/2T_c)e(\pi/2)^4\tau]}, \quad d=4, \quad (3.135)$$

e

$$C(T \gtrsim T_c) - C(T \lesssim T_c) \sim \frac{A}{2T_c^2 R'(dJ)}, \quad d=5, 6, \dots, \quad (3.136)$$

onde $\tau = T/T_c - 1$. Note que o expoente α , definido por $C \sim \tau^{-\alpha}$, é $\alpha = (d-4)/(d-2)$ para $d=3$ e $\alpha=0$ para $d=4,5,\dots$, com a esperada dependência logarítmica na dimensão crítica superior ($d=4$).

Reunindo os resultados obtidos, podemos escrever a seguinte tabela de expoentes, para a transição a temperatura finita:

Expoente	d=3	d=4	d=5,6,...
α	$(d-4)/(d-2)$	0 (*)	0(descontinuidade)
β	1/2	1/2	1/2
γ	$2/(d-2)$	1 (*)	1
δ	$(d+2)/(d-2)$	3 (*)	3
ν	$1/(d-2)$	1/2 (*)	1/2
η	0	0	0

e para a transição quântica ($T=0$) temos:

Expoente	d=2	d=3	d=4,5,...
z	1	1	1
β	1/2	1/2	1/2
γ	$2/(d-1)$	1(*)	1
δ	$(d+3)/(d-1)$	3(*)	3
ν	$1/(d-1)$	1/2 (*)	1/2
η	0	0	0

Onde (*) indica uma dependência logarítmica na dimensão crítica superior. Observamos que acima da temperatura crítica superior os expoentes são todos gaussianos [35], e abaixo da dimensão crítica temos que os expoentes podem ser obtidos

a partir dos expoentes à temperatura finita fazendo $d \rightarrow d + z$. Como os expoentes à temperatura finita são os mesmos expoentes obtidos no modelo esférico clássico, notamos que a prescrição de Hertz [36] se aplica neste modelo.

Capítulo 4

Modelo Esférico Quântico Antiferromagnético na Cadeia AB

4.1 Introdução

O objetivo deste capítulo é apresentar o modelo esférico na cadeia linear. O capítulo serve como preâmbulo para o próximo, onde iremos apresentar o modelo esférico em uma cadeia um pouco mais rica topologicamente, a cadeia AB_2 . Além disto vamos apresentar o modelo esférico em uma cadeia antiferromagnética, pois o próximo capítulo tratará do modelo esférico na cadeia AB_2 ferrimagnética.

Em uma dimensão é conhecido que o estado antiferromagnético clássico (Néel) é instável diante das flutuações quânticas, apesar da teoria de onda de spin prever a existência de excitações sem massa, que não se comportam como bósons de Goldstone [39]. Esta falha da teoria de onda de spin levou Haldane [40] a propor que as cadeias de spin inteiro em uma dimensão possuem um “gap”, enquanto as de spin semi-inteiro não possuem “gap”. No modelo esférico temos que apesar da

correlação independer da distância nas ausências de flutuações quânticas e térmicas e da presença do campo magnético uniforme e *staggered*, os valores locais de spin são nulos. Desta forma, apesar da susceptibilidade e do comprimento de correlação divergirem nesse limite, o modelo não apresenta ordem de longo alcance. Apenas a presença do campo magnético *staggered* conjuntamente com as ausências do campo magnético uniforme e das flutuações térmicas e quânticas garantem a existência da ordem de longo alcance. Para todo o regime restante o modelo apresenta ordem de curto-alcance, induzida pela presença do campo magnético *staggered*. Essa ordem de curto alcance se mantém até que o campo magnético uniforme supere o campo *staggered* ou as flutuações térmicas e quânticas se tornem muito intensas.

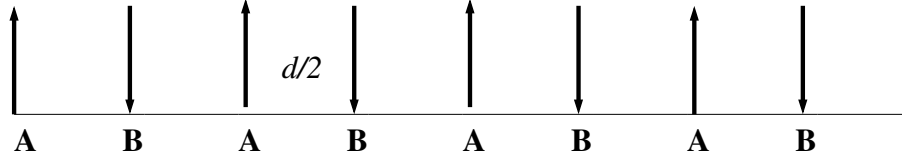


Figura 4.1: Representação esquemática de um estado antiferromagnético da cadeia AB . $d/2 \equiv 1/2$ é a constante de rede da cadeia.

4.2 Modelo Esférico Antiferromagnético

No caso de interações antiferromagnéticas de primeiros vizinhos o Hamiltoniano do modelo é

$$H = \frac{g}{2} \sum_{i\alpha} P_{i\alpha}^2 + J \sum_{\langle i\alpha, j\beta \rangle} S_i S_j - h \sum_{i\alpha} S_{i\alpha} + h' \sum_i (S_{iA} - S_{iB}) + \mu \sum_{i\alpha} (S_{i\alpha}^2 - 1/4), \quad (4.1)$$

onde o índice latino $i = 1, \dots, N$ indexa uma célula da cadeia AB , o índice grego $\alpha = A, B$ indexa um sítio da cadeia AB , $\langle \dots \rangle$ indica soma sobre primeiros vizinhos, $J > 0$ é a constante de acoplamento antiferromagnética de primeiros vizinhos, h é o campo magnético uniforme, h' é o campo magnético *staggered*, ambos em unidades de energia, g é a constante de acoplamento quântica e μ é o potencial químico associado à restrição esférica:

$$\sum_{i\alpha} \langle S_{i\alpha}^2 \rangle = N/4; \quad (4.2)$$

$P_{i\alpha}$ é o momento conjugado associado à variável de spin $S_{i\alpha}$, de maneira tal que as seguintes relações de comutação são obedecidas:

$$[S_{i\alpha}, S_{j\beta}] = 0, \quad [P_{i\alpha}, P_{j\beta}] = 0, \quad [S_{i\alpha}, P_{j\beta}] = i\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}. \quad (4.3)$$

O campo magnético *staggered* foi introduzido para que os valores locais de spin tenham um comportamento adequado para comparação com o caso ferrimagnético discutido no próximo capítulo, conforme veremos adiante.

Introduzimos os operadores de criação e destruição abaixo

$$S_{i\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} (a_{i\alpha} + a_{i\alpha}^\dagger), \quad (4.4)$$

$$P_{i\alpha} = \frac{-i}{\sqrt{2}} \left(\frac{2\mu}{g} \right)^{1/4} (a_{i\alpha} - a_{i\alpha}^\dagger), \quad (4.5)$$

onde $[a_{i\alpha}, a_{j\beta}] = 0$, $[a_{i\alpha}, a_{j\beta}^\dagger] = \delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}$. Substituindo as Eqs. (4.4) e (4.5) acima na Eq. (4.1), obtemos o seguinte Hamiltoniano:

$$\begin{aligned}
H = & \sqrt{2g\mu} \frac{N}{2} + \sqrt{2g\mu} \sum_i (a_{iA}^\dagger a_{iA} + a_{iB}^\dagger a_{iB}) - \mu(N/4) \\
& + \frac{J}{4} \sqrt{g/(2\mu)} \sum_i (a_{iA}^\dagger a_{iB} + a_{iB}^\dagger a_{i+1A} + a_{iA} a_{iB} + a_{iB} a_{i+1A} + h.c.) \\
& - \frac{h}{\sqrt{2}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_i (a_{iA} + a_{iB} + a_{iA}^\dagger + a_{iB}^\dagger) + \frac{h'}{\sqrt{2}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_i (a_{iA} - a_{iB} + a_{iA}^\dagger - a_{iB}^\dagger).
\end{aligned} \tag{4.6}$$

Introduzindo a transformada de Fourier

$$a_{j\alpha} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k e^{ikj} a_{k\alpha}, \quad k = \frac{2\pi}{N/2} \nu, \quad \nu = 1, \dots, N/2 - 1, \tag{4.7}$$

bem como a transformação que torna explícita, a menos de um fator global, a simetria de troca entre os sítios A e B da cadeia:

$$\psi_k = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{kA} + e^{-ik/2} a_{kB}), \tag{4.8}$$

$$\phi_k = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{kA} - e^{-ik/2} a_{kB}), \tag{4.9}$$

e substituindo as transformações Eqs. (4.7)-(4.9) na Eq. (4.6), obtemos a seguinte forma para o Hamiltoniano:

$$\begin{aligned}
H = & \sqrt{2g\mu} \frac{N}{2} - \mu \frac{N}{4} + \sqrt{2g\mu} \sum_k (1 + J_k/(4\mu)) \psi_k^\dagger \psi_k + \sqrt{2g\mu} \sum_k (1 - J_k/(4\mu)) \phi_k^\dagger \phi_k \\
& + \sqrt{2g\mu} \sum_k \frac{J_k}{8\mu} (\psi_{-k} \psi_k - \phi_{-k} \phi_k + h.c.) - h \sqrt{N/2} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} (\psi_0 + \psi_0^\dagger) \\
& + h' \sqrt{N/2} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} (\phi_0 + \phi_0^\dagger),
\end{aligned} \tag{4.10}$$

onde $J_k = 2J \cos(k/2)$ é a transformada de Fourier da interação antiferromagnética do modelo. Podemos ainda tornar explícita a conservação global do momento através da seguinte transformação:

$$\Delta_k^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_k + \psi_{-k}), \quad \Delta_k^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_k - \psi_{-k}), \quad k \neq 0, \tag{4.11}$$

$$\Theta_k^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_k + \phi_{-k}), \quad \Theta_k^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_k - \phi_{-k}), \quad k \neq 0, \tag{4.12}$$

$$\tag{4.13}$$

e obter a seguinte forma para o Hamiltoniano Eq. (4.10):

$$\begin{aligned}
H = & \sqrt{2g\mu} \frac{N}{2} - \mu \frac{N}{4} + \sqrt{2g\mu} \sum_{k>0} (1 + J_k/(4\mu)) \left[(\Delta_k^{(+)})^\dagger \Delta_k^{(+)} + (\Delta_k^{(-)})^\dagger \Delta_k^{(-)} \right] \\
& + \sum_{k>0} (1 - J_k/(4\mu)) \left[(\Theta_k^{(+)})^\dagger \Theta_k^{(+)} + (\Theta_k^{(-)})^\dagger \Theta_k^{(-)} \right] \\
& + \sum_{k>0} \frac{J_k}{8\mu} \left[(\Delta_k^{(+)})^2 - (\Delta_k^{(-)})^2 - (\Theta_k^{(+)})^2 + (\Theta_k^{(-)})^2 + h.c. \right] \\
& + \sqrt{2g\mu} (1 + J_0/(4\mu)) \psi_0^\dagger \psi_0 + \sqrt{2g\mu} (1 - J_0/(4\mu)) \phi_0^\dagger \phi_0 \\
& + \frac{J_0}{8\mu} (\psi_0^2 - \phi_0^2 + h.c.) - h\sqrt{N/2} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} (\psi_0 + \psi_0^\dagger) + h'\sqrt{N/2} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} (\phi_0 + \phi_0^\dagger).
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Finalmente, podemos utilizar os modelos de transformação de Bogoliubov descritos no Apêndice B.1, para introduzir os seguintes operadores:

$$\begin{aligned}
\alpha_k^{(\sigma)} &= \frac{1}{2} (1 + J_k/(2\mu))^{1/4} \left[\left(1 + (1 + J_k/(2\mu))^{-1/2} \right) \Delta_k^{(\sigma)} \right. \\
&\quad \left. + \sigma (1 - (1 + J_k/(2\mu))^{-1/2}) (\Delta_k^{(\sigma)})^\dagger \right], \\
\beta_k^{(\sigma)} &= \frac{1}{2} (1 - J_k/(2\mu))^{1/4} \left[\left(1 + (1 - J_k/(2\mu))^{-1/2} \right) \Theta_k^{(\sigma)} \right. \\
&\quad \left. + \sigma (1 - (1 - J_k/(2\mu))^{-1/2}) (\Theta_k^{(\sigma)})^\dagger \right], \\
\alpha_0 &= \frac{1}{2} (1 + J_0/(2\mu))^{1/4} \left[\left(1 + (1 + J_0/(2\mu))^{-1/2} \right) \psi_0 \right. \\
&\quad \left. + (1 - (1 + J_0/(2\mu))^{-1/2}) \psi_0^\dagger \right] \\
&\quad - \sqrt{N/2} (2g\mu)^{-1/2} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} (1 + J_0/(2\mu))^{-3/4} h,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\beta_0 &= \frac{1}{2}(1 + J_0/(2\mu))^{1/4} \left[\left(1 + (1 - J_0/(2\mu))^{-1/2}\right) \phi_0 \right. \\ &\quad \left. + (1 - (1 - J_0/(2\mu))^{-1/2}) \phi_0^\dagger \right] \\ &\quad + \sqrt{N/2}(2g\mu)^{-1/2} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} (1 - J_0/(2\mu))^{-3/4} h',\end{aligned}$$

onde $\sigma = \pm$. Com as transformações Eqs. (4.15)-(4.15), o Hamiltoniano, Eq. (4.10), assume a forma diagonal:

$$\begin{aligned}H &= \sum_k \omega_{k+} \left[(\alpha_k^{(+)})^\dagger \alpha_k^{(+)} + 1/2 \right] - \frac{Nh^2}{4(\mu + J)} \\ &\quad + \sum_k \omega_{k-} \left[(\beta_k^{(+)})^\dagger \beta_k^{(+)} + 1/2 \right] - \frac{N(h')^2}{4(\mu - J)} - \frac{N}{4}\mu,\end{aligned}\tag{4.15}$$

onde

$$\alpha_k = \begin{cases} \alpha_k^{(+)}, & k > 0 \\ \alpha_0, & k = 0 \\ \alpha_k^{(-)}, & k < 0 \end{cases}, \quad \beta_k = \begin{cases} \beta_k^{(+)}, & k > 0 \\ \beta_0, & k = 0 \\ \beta_k^{(-)}, & k < 0, \end{cases}\tag{4.16}$$

e

$$\omega_{k\sigma} = \sqrt{2g(\mu + \sigma J \cos(k/2))},\tag{4.17}$$

$\sigma = \pm$, representam os dois modos dispersivos da cadeia AB .

Como as transformações que nos levaram ao Hamiltoniano, Eq. (4.15), são canônicas, podemos expressar as variáveis de spin em termos dos operadores descritos

na Eq. (4.16). Introduzindo a transformada de Fourier na Eq. (4.4), obtemos:

$$\begin{aligned}
 S_{jA} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_k \left[a_{kA} + a_{kA}^\dagger \right] \cos(kj) \\
 &+ \frac{i}{\sqrt{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_k \left[a_{kA} - a_{kA}^\dagger \right] \sin(kj)
 \end{aligned} \tag{4.18}$$

$$\begin{aligned}
 S_{jB} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_k \left[a_{kB} + a_{kB}^\dagger \right] \cos(kj) \\
 &+ \frac{i}{\sqrt{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_k \left[a_{kB} - a_{kB}^\dagger \right] \sin(kj).
 \end{aligned} \tag{4.19}$$

Agora, utilizando as transformações, Eq. (4.8) e Eq. (4.9), que explicitam a simetria de troca entre os sítios A e B da cadeia, obtemos,

$$\begin{aligned}
 S_{jA} &= \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} (\psi_k + \psi_{-k}) \cos(kj) \\
 &+ \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} ((\psi_k)^\dagger + (\psi_{-k})^\dagger) \cos(kj) \\
 &+ \frac{i}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} (\psi_k - \psi_{-k}) \sin(kj) \\
 &- \frac{i}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} ((\psi_k)^\dagger - (\psi_{-k})^\dagger) \sin(kj)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} (\phi_k + \phi_{-k}) \cos(kj) \\
& + \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} ((\phi_k)^\dagger + (\phi_{-k})^\dagger) \cos(kj) \\
& + \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} (\phi_k - \phi_{-k}) \sin(kj) \\
& - \frac{i}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} ((\phi_k)^\dagger - (\phi_{-k})^\dagger) \sin(kj) \\
& + \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} (\psi_0 + (\psi_0)^\dagger) \\
& + \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} (\phi_0 + (\phi_0)^\dagger), \\
S_{jB} = & \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} (\psi_k + \psi_{-k}) \cos(k(j+1/2)) \\
& + \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} ((\psi_k)^\dagger + (\psi_{-k})^\dagger) \cos(k(j+1/2)) \\
& + \frac{i}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} (\psi_k - \psi_{-k}) \sin(k(j+1/2)) \\
& - \frac{i}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} ((\psi_k)^\dagger - (\psi_{-k})^\dagger) \sin(k(j+1/2))
\end{aligned} \tag{4.20}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} (\phi_k + \phi_{-k}) \cos(k(j+1/2)) \\
& - \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} ((\phi_k)^\dagger + (\phi_{-k})^\dagger) \cos(k(j+1/2)) \\
& - \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} (\phi_k - \phi_{-k}) \sin(k(j+1/2)) \\
& + \frac{i}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} ((\phi_k)^\dagger - (\phi_{-k})^\dagger) \sin(k(j+1/2)) \\
& + \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} (\psi_0 + (\psi_0)^\dagger) \\
& - \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} (\phi_0 + (\phi_0)^\dagger).
\end{aligned} \tag{4.21}$$

Por outro lado, invertendo as transformações Eqs. (4.11),(4.12),(4.15)-(4.15) e substituindo o resultado nas Eqs. (4.20) e (4.21), obtemos,

$$\begin{aligned}
S_{jA} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k>0} \left(\frac{g}{2\mu + J_k} \right)^{1/4} (\alpha_k^{(+)} + (\alpha_k^{(+)})^\dagger) \cos(kj) \\
&+ \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{k>0} \left(\frac{g}{2\mu + J_k} \right)^{1/4} (\alpha_k^{(-)} - (\alpha_k^{(-)})^\dagger) \sin(kj) \\
&+ \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu + J_0} \right)^{1/4} (\alpha_0 + (\alpha_0)^\dagger) \\
&+ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k>0} \left(\frac{g}{2\mu - J_k} \right)^{1/4} (\beta_k^{(+)} + (\beta_k^{(+)})^\dagger) \cos(kj) \\
&+ \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{k>0} \left(\frac{g}{2\mu - J_k} \right)^{1/4} (\beta_k^{(-)} - (\beta_k^{(-)})^\dagger) \sin(kj) \\
&+ \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu - J_0} \right)^{1/4} (\beta_0 + (\beta_0)^\dagger) + \frac{h}{2\mu + J_0} - \frac{h'}{2\mu - J_0},
\end{aligned} \tag{4.22}$$

e

$$\begin{aligned}
S_{jB} = & \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k>0} \left(\frac{g}{2\mu + J_k} \right)^{1/4} (\alpha_k^{(+)} + (\alpha_k^{(+)})^\dagger) \cos(k(j + 1/2)) \\
& + \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{k>0} \left(\frac{g}{2\mu + J_k} \right)^{1/4} (\alpha_k^{(-)} - (\alpha_k^{(-)})^\dagger) \sin(k(j + 1/2)) \\
& + \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu + J_0} \right)^{1/4} (\alpha_0 + (\alpha_0)^\dagger) \\
& - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k>0} \left(\frac{g}{2\mu - J_k} \right)^{1/4} (\beta_k^{(+)} + (\beta_k^{(+)})^\dagger) \cos(k(j + 1/2)) \\
& - \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{k>0} \left(\frac{g}{2\mu - J_k} \right)^{1/4} (\beta_k^{(-)} - (\beta_k^{(-)})^\dagger) \sin(k(j + 1/2)) \\
& - \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu - J_0} \right)^{1/4} (\beta_0 + (\beta_0)^\dagger) + \frac{h}{2\mu + J_0} + \frac{h'}{2\mu - J_0}.
\end{aligned} \tag{4.23}$$

Observamos que as Eqs. (4.22),(4.23) diferem entre si por três fatores: o campo *staggered*, uma diferença de sinal nas expressões envolvendo os operadores β_k e uma fase adicional de $k/2$ para os senos e cossenos da Eq. (4.23). No primeiro caso, a diferença é devido ao fato de termos dado preferência aos sítios A quando apresentamos o Hamiltoniano, Eq. (4.1). O segundo fator é devido à escolha que fizemos para introduzir as transformações definidas nas Eqs. (4.8) e (4.9), pois caso tivéssemos dado preferência aos sítios B o sinal $(-)$ estaria na Eq. (4.22). Finalmente, a diferença de fase de $k/2$ na Eq. (4.23) é devida ao fato do sítio B estar a uma distância de $d/2$ do sítio A , conforme descrito na Fig. (4.1).

Podemos definir médias térmicas através do uso do operador densidade de estados:

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}, \quad Z = \text{Tre}^{-\beta H}, \tag{4.24}$$

onde $\beta = 1/T$, T é a temperatura do sistema e Tr indica o traço sobre todos os estados do sistema. Com o uso do Hamiltoniano, Eq. (4.15), podemos escrever o operador densidade de estados, Eq. (4.24), na forma

$$\rho = \prod_r (1 - e^{-\beta\omega_r}) e^{-\beta\omega_r \gamma_r^\dagger \gamma_r}, \quad (4.25)$$

onde $\gamma_r = \{\alpha_k^{(\pm)}, \beta_k^{(\pm)}, \alpha_0, \beta_0\}$ e as frequências associadas a cada um destes modos bosônicos são: $\omega_r = \{\omega_{k+}, \omega_{k-}, \omega_{0+}, \omega_{0-}\}$. Com o operador densidade de estados, Eq. (4.25), podemos calcular as médias térmicas de um operador:

$$\langle \gamma_r \rangle = \text{Tr}(\rho \gamma_r) = 0, \quad (4.26)$$

$$\langle \gamma_r^\dagger \rangle = \text{Tr}(\rho \gamma_r^\dagger) = 0, \quad (4.27)$$

que são nulas pois o Hamiltoniano do sistema H , Eq. (4.15), é quadrático nos operadores γ_r . Desta maneira, os operadores acima não preservam a base de autoestados de H e, sendo assim, o resultado das médias é nulo. De forma análoga, podemos calcular as médias de dois operadores:

$$\langle \gamma_r \gamma_s \rangle = \text{Tr}(\rho \gamma_r \gamma_s) = 0, \quad (4.28)$$

$$\langle \gamma_r^\dagger \gamma_s^\dagger \rangle = \text{Tr}(\rho \gamma_r^\dagger \gamma_s^\dagger) = 0, \quad (4.29)$$

$$\langle \gamma_r^\dagger \gamma_s \rangle = \text{Tr}(\rho \gamma_r^\dagger \gamma_s) = \frac{\delta_{rs}}{e^{\beta\omega_r} - 1}, \quad (4.30)$$

$$\langle \gamma_r \gamma_s^\dagger \rangle = \text{Tr}(\rho \gamma_r \gamma_s^\dagger) = \frac{\delta_{rs} e^{\beta\omega_r}}{e^{\beta\omega_r} - 1}, \quad (4.31)$$

onde o resultado não nulo é obtido para os operadores que preservam a base de autoestados do Hamiltoniano, Eq. (4.15). Sendo assim, a média do operador que

conta o número de bósons no modelo resulta na distribuição de Bose-Einstein.

Com os resultados das Eqs. (4.26) e (4.27), podemos obter os valores locais do spin em cada sítio e a magnetização da célula:

$$\langle S_A \rangle = \langle S_{iA} \rangle = \frac{h}{2(\mu + J)} - \frac{h'}{2(\mu - J)}, \quad (4.32)$$

$$\langle S_B \rangle = \langle S_{iB} \rangle = \frac{h}{2(\mu + J)} + \frac{h'}{2(\mu - J)}, \quad (4.33)$$

$$M_{cell} = \langle S_A \rangle + \langle S_B \rangle = \frac{h}{(\mu + J)}. \quad (4.34)$$

Podemos então obter a susceptibilidade da célula através de

$$\chi_{cell} = \frac{\partial M_{cell}}{\partial h} = \frac{1}{(\mu + J)} - \frac{1}{(\mu + J)^2} h \frac{\partial \mu}{\partial h}, \quad (4.35)$$

e no caso de campo magnético nulo, temos

$$\chi_{cell}(h = 0) = \frac{1}{\mu + J}. \quad (4.36)$$

Como $\mu \geq J$, para garantir a existência do modo de frequência $\omega_{k-} = \sqrt{2g[\mu - J \cos(k/2)]}$, obtemos que $\chi_{cell}(h = 0) \leq 1/2J$, com $\chi_{cell} = 1/2J$ para $g = T = h = h' = 0$. De maneira análoga, a susceptibilidade a campo nulo do estado fundamental do modelo de Heisenberg antiferromagnético é dada por $\chi = 1/(2\pi^2 J)$, a qual já exhibe correções de flutuações quânticas.

Na ausência do campo magnético *staggered*, observamos que os valores locais de spin e a magnetização, Eqs. (4.32)-(4.34), apresentam um comportamento paramagnético. A presença do campo magnético *staggered* mantém o caráter paramagnético da magnetização da célula como se pode observar na Fig. 4.2(b). En-

tretanto, induz um comportamento antiferromagnético nos valores locais de spin, fazendo os spins dos sítios A se alinharem em um sentido oposto aos dos sítios B . Como se pode observar na Fig. 4.2(a), acima de certo valor característico ($h \sim 2.26J$ para $h' = J$) o efeito do campo magnético uniforme supera a tendência do campo *staggered* de alinhar os spins antiferromagneticamente. Por outro lado, o comportamento da magnetização é caracteristicamente paramagnético, inclusive com a típica dependência linear para campos menores que o campo *staggered* e saturação apenas para $(h/J) \rightarrow \infty$, conforme mostrado na Fig. 4.2(b). Este comportamento difere daquele obtido por Griffiths, Fig. 3, Bonner e Fisher, Fig. 18 [41], para magnetização a $T = 0$ do modelo Heisenberg antiferromagnético, o qual satura para campo finito e apresenta singularidade na susceptibilidade a campo nulo [41].

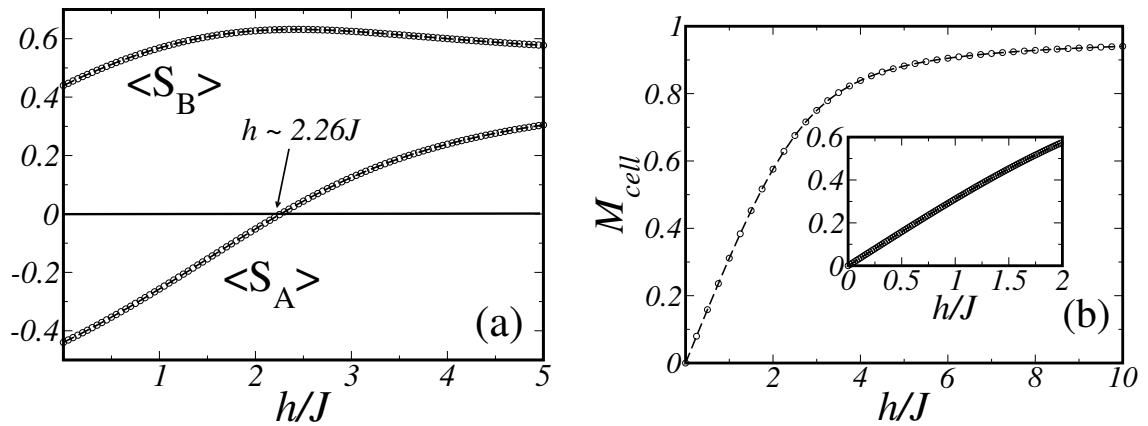


Figura 4.2: (a) Spin médio nos sítios A ($-\circ-$) e B ($-\square-$) e (b) magnetização da célula em função de h/J para $g = 0.05J$, $T = 0$ e $h' = J$.

A partir dos resultados das Eqs. (4.28)-(4.31), podemos obter as funções de cor-

relação do sistema:

$$\begin{aligned} \langle S_{iA} S_{jA} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jA} \rangle &= \frac{1}{N} \sum_k \left[\frac{g}{2\omega_{k+}} \coth \left(\frac{\beta\omega_{k+}}{2} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{g}{2\omega_{k-}} \coth \left(\frac{\beta\omega_{k-}}{2} \right) \right] \cos(k(i-j)), \end{aligned} \quad (4.37)$$

$$\begin{aligned} \langle S_{iB} S_{jB} \rangle - \langle S_{iB} \rangle \langle S_{jB} \rangle &= \frac{1}{N} \sum_k \left[\frac{g}{2\omega_{k+}} \coth \left(\frac{\beta\omega_{k+}}{2} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{g}{2\omega_{k-}} \coth \left(\frac{\beta\omega_{k-}}{2} \right) \right] \cos(k(i-j)), \end{aligned} \quad (4.38)$$

$$\begin{aligned} \langle S_{iA} S_{jB} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jB} \rangle &= \frac{1}{N} \sum_k \left[\frac{g}{2\omega_{k+}} \coth \left(\frac{\beta\omega_{k+}}{2} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{g}{2\omega_{k-}} \coth \left(\frac{\beta\omega_{k-}}{2} \right) \right] \cos(k(i-j+1/2)). \end{aligned} \quad (4.39)$$

Através dos resultados acima, em especial as Eq. (4.32) e (4.33), vemos que o modelo esférico antiferromagnético não permite uma região onde os valores locais de spin possam ter um comportamento antiferromagnético a $h' = 0$. Apesar disso, a função de correlação entre spins de sítios A e B tem sinal negativo para quaisquer $\{g, T, h, h'\}$, como explicitado em seguida.

Para analisarmos os comportamentos assintóticos das funções de correlação, vamos utilizar a fórmula de Euler-Maclaurin:

$$\sum_{k,m} \rightarrow \sum_m \frac{N}{3} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi}, \quad N \gg 1, \quad (4.40)$$

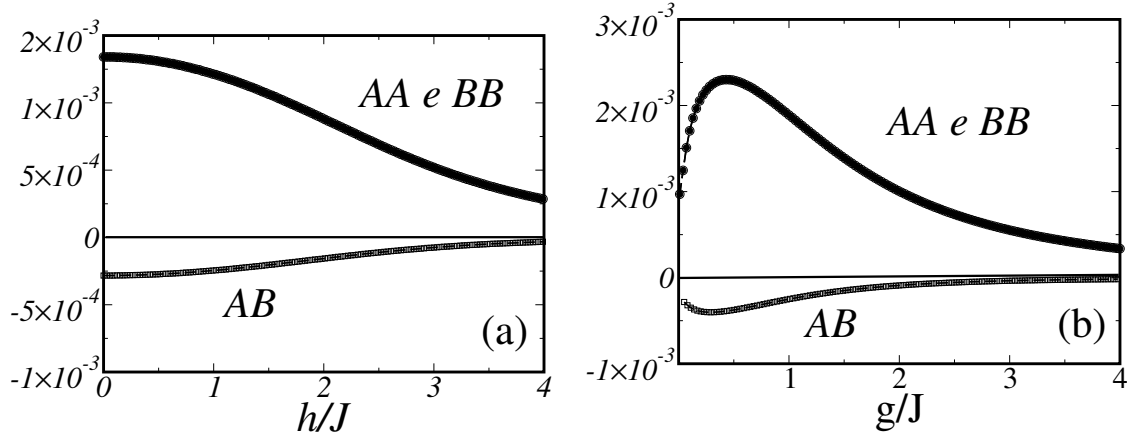


Figura 4.3: Cumulante entre spins A em células primeiro-vizinhas [sítios A ($-\bigcirc$), sítios B ($-\bullet-$) e sítios A e B ($-\square-$)] (a) em função de h/J para $g = T = 0.05J$ e $h' = J$ e (b) em função de g/J para $T = h = 0.05J$ e $h' = J$.

de maneira tal que a função de correlação na Eq. (4.37) torna-se

$$\begin{aligned} \langle S_{iA} S_{jA} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jA} \rangle &= \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \sum_{m=\pm 1} \frac{g}{2\omega_{k,m}} \coth \left[\frac{1}{2} \beta \omega_{k,m} \right] \cos [k(j-i)] = \\ &= \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{g}{2\omega(\theta)} \coth \left[\frac{1}{2} \beta \omega(\theta) \right] \cos [2(j-i)\theta], \end{aligned} \quad (4.41)$$

onde as duas bandas dispersivas agora são representadas por $\omega(\theta) = \sqrt{2g\mu + 2gJ \cos \theta}$.

Com um argumento análogo, podemos reescrever as fórmulas das Eqs. (4.38), (4.39) como

$$\langle S_{iB} S_{jB} \rangle - \langle S_{iB} \rangle \langle S_{jB} \rangle = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{g}{2\omega(\theta)} \coth \left[\frac{1}{2} \beta \omega(\theta) \right] \cos [2(j-i)\theta] \quad (4.42)$$

$$\langle S_{iA} S_{jB} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jB} \rangle = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{g}{2\omega(\theta)} \coth \left[\frac{1}{2} \beta \omega(\theta) \right] \cos \{ [2(j-i) + 1]\theta \}. \quad (4.43)$$

Agora, considerando a seguinte função:

$$Y(a, b, c, \theta) = \frac{\sqrt{c} \coth(\sqrt{c(a + b \cos \theta)})}{\sqrt{a + b \cos \theta}}, \quad (4.44)$$

e sua série de Fourier

$$Y(a, b, c, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(a, b, c) \cos(n\theta), \quad (4.45)$$

$$A_n(a, b, c) = (2 - \delta_{n0}) \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} Y(a, b, c, \theta) \cos(n\theta), \quad (4.46)$$

podemos reescrever as Eqs. (4.41)-(4.43) como

$$\langle S_{iA} S_{jA} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jA} \rangle = \frac{1}{2} (1 + \delta_{ij}) A_{2(j-i)} \left(\frac{2\mu}{T}, \frac{2J}{T}, \frac{g}{4T} \right), \quad (4.47)$$

$$\langle S_{iB} S_{jB} \rangle - \langle S_{iB} \rangle \langle S_{jB} \rangle = \frac{1}{2} (1 + \delta_{ij}) A_{2(j-i)} \left(\frac{2\mu}{T}, \frac{2J}{T}, \frac{g}{4T} \right), \quad (4.48)$$

$$\langle S_{iA} S_{jB} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jB} \rangle = \frac{1}{2} A_{2(j-i)+1} \left(\frac{2\mu}{T}, \frac{2J}{T}, \frac{g}{4T} \right). \quad (4.49)$$

Conforme observamos na Fig. 4.3, a correlação entre os sítios A e B é sempre negativa. Isto se deve ao fato de que esta é a correlação entre sítios de subredes diferentes que estão acopladas por um acoplamento antiferromagnético ($J > 0$), enquanto as outras correlações são entre sítios de uma mesma subrede. Note que a correlação em função de g/J , Fig. 4.3(b), apresenta um máximo para valores pequenos de g/J , enquanto a correlação em função de h/J decresce monotonicamente quando h/J aumenta, Fig. 4.3(a).

Os coeficientes de Fourier $A_n(a, b, c)$ podem ser calculados usando a expansão da

cotangente hiperbólica em frações parciais:

$$\coth x = \frac{1}{x} + \sum_{s=1}^{\infty} \frac{2x}{x^2 + s^2\pi^2}, \quad (4.50)$$

e

$$\frac{1}{c + d \cos \theta} = \frac{1}{\sqrt{c^2 - d^2}} \left(1 + 2 \sum_{s=1}^{\infty} \left((c/d) - \sqrt{(c/d)^2 - 1} \right)^s \cos(s\theta) \right), \quad c > d > 0, \quad (4.51)$$

de tal maneira que obtemos

$$A_n(a, b, c) = (2 - \delta_{n0})(-1)^n \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{\left[(a_s/b) - \sqrt{(a_s/b)^2 - 1} \right]^n}{\sqrt{a_s^2 - b^2}}, \quad (4.52)$$

onde $a_s = a + (s^2\pi^2)/c$. Utilizando as Eqs. (4.47)-(4.49), podemos reescrever a restrição esférica, $\sum_{i\alpha} \langle S_{i\alpha}^2 \rangle = N/4$, como

$$A_0 + \frac{h^2}{4(\mu + J)^2} + \frac{(h')^2}{4(\mu - J)^2} = \frac{1}{4}. \quad (4.53)$$

Vamos, em seguida, proceder à análise de alguns casos limites.

(I) $g \gg \{J, T, h, h'\}$.

Primeiro vamos considerar o coeficiente A_0 :

$$A_0 = \frac{T}{2\mu} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{(1 + y_s^2)^2 - (J/\mu)^2}}, \quad (4.54)$$

onde $y_s = \sqrt{2/(g\mu)}\pi Ts$. No limite $g \rightarrow \infty$, temos que $y_{s+1} - y_s \rightarrow 0$, de modo que podemos utilizar a fórmula de Euler-Maclaurin para obter

$$A_0 \sim \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{g}{2\mu}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{1+y^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{g}{2\mu}}. \quad (4.55)$$

Substituindo o resultado, Eq. (4.55), na restrição esférica, Eq. (4.53), obtemos,

$$\mu \sim 2g, \quad g \gg \{J, T, h, h'\}. \quad (4.56)$$

Consideremos agora, o caso do coeficiente de Fourier A_n , $n \neq 0$. Como $\mu \sim 2g \gg J$, podemos obter

$$A_n \sim (-1)^n (2 - \delta_{n0}) \frac{T}{2\mu} \left(\frac{J}{2\mu} \right)^n \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1+y_s^2)^{n+1}}, \quad (4.57)$$

onde $y_s = \sqrt{2/(g\mu)}\pi Ts$. Como $y_{s+1} - y_s \rightarrow 0$, no limite $g \rightarrow \infty$, podemos utilizar a fórmula de Euler-Maclaurin para obter

$$A_n \sim (2 - \delta_{n0}) (-1)^n \frac{1}{4} \left(\frac{J}{4g} \right)^n \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{dy}{1+y^2}. \quad (4.58)$$

Utilizando o resultado: $\int_0^{\infty} \frac{dx}{(1+x^2)^r} = \frac{\pi}{2} [(2r-3)!!/(2r-2)!!]$, obtemos o comportamento assintótico de A_n quando $g \gg \{J, T, h, h'\}$:

$$A_n \sim (2 - \delta_{n0}) (-1)^n \frac{1}{4} \left(\frac{J}{4g} \right)^n \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!}. \quad (4.59)$$

Substituindo as Eq. (4.55) e (4.59) nas Eqs. (4.47)-(4.49), observamos que o decaimento espacial do tipo lei de potência na razão $(J/4g)$ das funções de correlação no

limite $g \gg \{J, T, h, h'\}$:

$$\begin{aligned} \langle S_{i\alpha} S_{j\alpha} \rangle - \langle S_{i\alpha} \rangle \langle S_{j\alpha} \rangle &\sim \frac{1}{4} \left(\frac{J}{4g} \right)^{2(j-i)} \frac{(4(j-i)-1)!!}{(4(j-i))!!}, \quad \alpha = A, B, \\ \langle S_{iA} S_{jB} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jB} \rangle &\sim -\frac{1}{4} \left(\frac{J}{4g} \right)^{2(j-i)+1} \frac{(4(j-i)+1)!!}{(4(j-i)+2)!!}. \end{aligned} \quad (4.60)$$

(II) $T \gg \{J, g, h, h'\}$.

Nesse limite, o coeficiente de Fourier A_0 torna-se

$$A_0 \sim \frac{T}{2\mu} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{1}{1+y_s^2}. \quad (4.61)$$

Como $y_s = \sqrt{2/(g\mu)}\pi T s \rightarrow \infty$, quando $T \gg \{J, g, h, h'\}$, temos que

$$A_0 \sim \frac{T}{2\mu} \left[1 + \sum_{s=1}^{\infty} \frac{g}{\pi^2 T^2 s^2} \right], \quad (4.62)$$

e portanto

$$A_0 \sim \frac{T}{2\mu}. \quad (4.63)$$

Substituindo a Eq. (4.63) na restrição esférica, Eq. (4.53), obtemos o seguinte resultado:

$$\mu \sim 2T, \quad T \gg \{J, g, h, h'\}. \quad (4.64)$$

Consideremos, agora, o coeficiente de Fourier A_n ,

$$A_n \sim (-1)^n (2 - \delta_{n0}) \frac{1}{4} \left(\frac{J}{4T} \right)^n \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1+y_s^2)^{n+1}}. \quad (4.65)$$

Como $y_s = \sqrt{T/g\pi}s \rightarrow \infty$, quando $T \gg \{J, g, h, h'\}$, temos

$$A_n \sim (-1)^n (2 - \delta_{n0}) \frac{1}{4} \left(\frac{J}{4T} \right)^n \left[1 + 2 \sum_{s=1}^{\infty} \left(\frac{g}{\pi^2 T} \right)^{n+1} \frac{1}{s^{2(n+1)}} \right], \quad (4.66)$$

e portanto

$$A_n \sim (-1)^n (2 - \delta_{n0}) \frac{1}{4} \left(\frac{J}{4T} \right)^n, \quad T \gg \{J, g, h, h'\}. \quad (4.67)$$

Com estes resultados, obtemos os limites assintóticos para $T \gg \{J, g, h, h'\}$:

$$\begin{aligned} \langle S_{i\alpha} S_{j\alpha} \rangle - \langle S_{i\alpha} \rangle \langle S_{j\alpha} \rangle &= \frac{1}{4} \left(\frac{J}{4T} \right)^{2(j-i)}, \quad \alpha = A, B, \\ \langle S_{iA} S_{jB} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jB} \rangle &= -\frac{1}{4} \left(\frac{J}{4T} \right)^{2(j-i)+1}. \end{aligned} \quad (4.68)$$

(III) $h \gg \{J, g, T, h'\}$.

No caso em que $h \gg \{J, g, T, h'\}$, a restrição esférica, Eq. (4.53), é dominada pelo termo com dependência explícita com o campo magnético:

$$\frac{h^2}{4\mu^2} \approx \frac{1}{4}, \quad (4.69)$$

e portanto

$$\mu \sim h, \quad h \gg \{J, g, T, h'\}. \quad (4.70)$$

Considerado o coeficiente de Fourier A_n para o caso em que $g \neq 0$, temos que

$$A_n \sim (-1)^n (2 - \delta_{n0}) \frac{T}{2h} \left(\frac{J}{2h} \right)^n \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1 + y_s^2)^{n+1}}. \quad (4.71)$$

Como $y_s = \sqrt{2/(gh)}\pi Ts \rightarrow 0$, quando $h \gg \{J, g, T, h'\}$, podemos usar a fórmula de Euler-Maclaurin para obter

$$A_n \sim (-1)^n (2 - \delta_{n0}) \frac{1}{4} \frac{\sqrt{2gh}}{h} \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!} \left(\frac{J}{2h}\right)^n, \quad g \neq 0, \quad (4.72)$$

o qual leva, no limite $h \gg \{J, g, T, h'\}$, a

$$\begin{aligned} \langle S_{i\alpha} S_{j\alpha} \rangle - \langle S_{i\alpha} \rangle \langle S_{j\alpha} \rangle &\sim \frac{1}{4} \frac{\sqrt{2gh}}{h} \frac{(4(j-i)-1)!!}{(4(j-i))!!} \left(\frac{J}{2h}\right)^{2(j-i)}, \quad \alpha = A, B, \\ \langle S_{iA} S_{jB} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jB} \rangle &\sim -\frac{1}{4} \frac{\sqrt{2gh}}{h} \frac{(4(j-i)+1)!!}{(4(j-i)+2)!!} \left(\frac{J}{2h}\right)^{2(j-i)+1}. \end{aligned} \quad (4.73)$$

Para $g \rightarrow 0$, temos que $y_s \rightarrow \infty$ na Eq. (4.71), e portanto

$$A_n \sim (-1)^n (2 - \delta_{n0}) \frac{T}{2h} \left(\frac{J}{2h}\right)^n \left[1 + 2 \sum_{s=1}^{\infty} \left(\frac{gh}{2\pi^2 T^2 s^2}\right)^{n+1} \right]. \quad (4.74)$$

Desta forma, obtemos o seguinte resultado:

$$A_n \sim (-1)^n (2 - \delta_{n0}) \frac{T}{2h} \left(\frac{J}{2h}\right)^n, \quad g = 0, \quad (4.75)$$

o qual nos leva, no limite $h \gg \{J, T, h'\}$ e $g = 0$:

$$\begin{aligned} \langle S_{i\alpha} S_{j\alpha} \rangle - \langle S_{i\alpha} \rangle \langle S_{j\alpha} \rangle &\sim \frac{T}{2h} \left(\frac{J}{2h}\right)^{2(j-i)}, \quad \alpha = A, B, \\ \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jB} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jB} \rangle &\sim -\frac{T}{2h} \left(\frac{J}{2h}\right)^{2(j-i)+1}. \end{aligned} \quad (4.76)$$

(IV) $h' \gg \{J, g, T, h\}$.

Usando argumentos muito similares aos que conduziram aos resultados das Eqs.

(4.70), (4.72) e (4.75), podemos obter os seguintes assintóticos:

$$\mu \sim h', \quad (4.77)$$

$$A_n \sim \begin{cases} (-1)^n (2 - \delta_{n0}) \frac{T}{2h'} \left(\frac{J}{2h'}\right)^n, & g = 0, \\ (-1)^n (2 - \delta_{n0}) \frac{1}{4} \frac{\sqrt{2gh'}}{h'} \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!} \left(\frac{J}{2h'}\right)^n, & g \neq 0, \end{cases} \quad (4.78)$$

para $h' \gg \{J, g, T, h\}$. E desta forma obtemos os seguintes resultados para $g = 0$ e $h' \gg \{J, T, h\}$:

$$\begin{aligned} \langle S_{i\alpha} S_{j\alpha} \rangle - \langle S_{i\alpha} \rangle \langle S_{j\alpha} \rangle &\sim \frac{T}{2h'} \left(\frac{J}{2h'}\right)^{2(j-i)}, \quad \alpha = A, B, \\ \langle S_{iA} S_{jB} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jB} \rangle &\sim -\frac{T}{2h'} \left(\frac{J}{2h'}\right)^{2(j-i)+1}. \end{aligned} \quad (4.79)$$

E para $g \neq 0$ e $h' \gg \{J, g, T, h\}$:

$$\begin{aligned} \langle S_{i\alpha} S_{j\alpha} \rangle - \langle S_{i\alpha} \rangle \langle S_{j\alpha} \rangle &\sim \frac{1}{4} \frac{\sqrt{2gh'}}{h'} \frac{(4(j-i)-1)!!}{(4(j-i))!!} \left(\frac{J}{2h'}\right)^{2(j-i)}, \quad \alpha = A, B, \\ \langle S_{iA} S_{jB} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jB} \rangle &\sim -\frac{1}{4} \frac{\sqrt{2gh'}}{h'} \frac{(4(j-i)+1)!!}{(4(j-i)+2)!!} \left(\frac{J}{2h'}\right)^{2(j-i)+1}. \end{aligned} \quad (4.80)$$

Devemos observar que em todos os casos analisados anteriormente as funções de correlação sempre decaem exponencialmente com a distância, conforme demonstrando na Fig. (4.4) e pela equação Eq. (4.52) com $\mu > J$, desde que

$$(a_s/b) - \sqrt{(a_s/b)^2 - 1} = \frac{1}{(a_s/b) + \sqrt{(a_s/b)^2 - 1}} < 1, \quad a_s/b > 1, \quad (4.81)$$

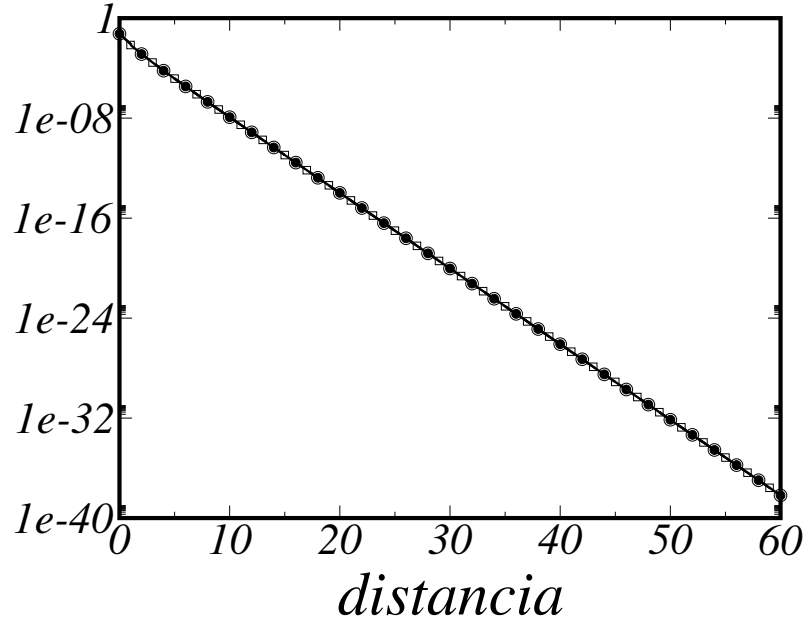


Figura 4.4: Valor absoluto do cumulante entre spins nos sítios A ($-\circ-$), sítios B ($-\bullet-$) e entre spins em sítios A e B ($-\square-$) em função da distância em unidades de d ; para $g = T = 0.05J$ e $h' = J$. As linhas retas indicam o decaimento exponencial.

e portanto o termo $s = 0$ é o termo dominante no somatório presente na Eq. (4.52), para $n \gg 1$. Definimos o comprimento de correlação ξ do sistema a partir de

$$A_n \sim (2 - \delta_{n0})(-1)^n A_0 \exp(-n/\xi), \quad (4.82)$$

o que nos leva a

$$\xi = -1/\ln \left[(\mu/J) - \sqrt{(\mu/J)^2 - 1} \right], \quad (4.83)$$

$\mu \neq J$. Para $\mu = J$ a Eq. (4.83) não se aplica; neste caso, a restrição esférica, Eq. (4.53), é compatível com o conjunto de parâmetros $g = T = h = h' = 0$.

Para análise da região $g = T = h = 0$ e em especial o ponto $g = T = h = h' = 0$,

vamos utilizar as Eqs. (4.32), (4.33) para definir a magnetização *staggered*:

$$M_s = \langle S_B \rangle - \langle S_A \rangle = \frac{h'}{\mu - J}, \quad (4.84)$$

e a susceptibilidade *staggered*:

$$\chi_s = \frac{1}{\mu - J} - \frac{h'}{(\mu - J)^2} \frac{\partial \mu}{\partial h'}, \quad (4.85)$$

que no caso de campo *staggered* nulo vale:

$$\chi_s(h' = 0) = \frac{1}{\mu - J}. \quad (4.86)$$

Observamos que a susceptibilidade *staggered* pode divergir para $\mu = J$, o que não ocorre com a susceptibilidade da célula, conforme as Eqs. (4.35) e (4.36). Sendo assim, a susceptibilidade *staggered* é mais apropriada à análise da presença ou ausência de ordem no modelo.

(V) $T = h = h' = 0$.

Substituindo $h' = 0$ nas Eqs. (4.32), (4.33) e (4.84), obtemos para a magnetização *staggered* e valores locais de spin:

$$M_s = 0, \quad T = h = h' = 0, \quad (4.87)$$

$$\langle S_A \rangle = 0, \quad T = h = h' = 0, \quad (4.88)$$

$$\langle S_B \rangle = 0 \quad T = h = h' = 0. \quad (4.89)$$

Considere, então, a Eq. (4.46) para $T \rightarrow 0$:

$$A_n = (-1)^n (2 - \delta_{n0}) \frac{T \left((\mu/J) - \sqrt{(\mu/J)^2 - 1} \right)^n}{2\sqrt{\mu^2 - J^2}} + (-1)^n (2 - \delta_{n0}) \frac{T \left([(\mu + x_s^2)/J] - \sqrt{[(\mu + x_s^2)/J]^2 - 1} \right)^n}{\sqrt{(\mu + x_s)^2 - J^2}}, \quad (4.90)$$

onde $x_s = \sqrt{(2\pi^2 T^2)/g}$ é tal que $x_{s+1} - x_s \rightarrow 0$, quando $T \rightarrow 0$. Desta forma, podemos substituir a soma na Eq. (4.90) por uma integral:

$$A_n = (2 - \delta_{n0}) (-1)^n \frac{\sqrt{g/2}}{\pi} \int_0^\infty \frac{\left([(\mu + x)/J] - \sqrt{[(\mu + x^2)/J]^2 - 1} \right)^n}{2\sqrt{(\mu + x^2)^2 - J^2}} dx. \quad (4.91)$$

Para a análise de $n \gg 1$, reescrevemos a integral acima como

$$A_n = \frac{2(-1)^n \sqrt{g/2}}{\pi} \int_0^\infty \left(\frac{-\phi'(x)}{2x} \right) \exp(n\phi(x)) dx, \quad (4.92)$$

onde $\phi(x) = \ln \left\{ [(\mu + x^2)/J] - \sqrt{[(\mu + x^2)/J]^2 - 1} \right\}$.

Como $\phi'(x) = -2x/\sqrt{[(\mu + x^2)^2 - J^2]}$, temos que o ponto de sela da integral Eq. (4.92) é $x = 0$; portanto, temos

$$\begin{aligned} A_n &= \frac{2(-1)^n \sqrt{g/2}}{\pi} \left(\frac{-\phi''(0)}{2} \right) \exp(n\phi(0)) \int_0^\infty dx \exp[(n\phi''(0)x^2)/2] \\ &= 2(-1)^n \sqrt{\frac{g}{2n\pi\sqrt{\mu^2 - J^2}}} \exp[-(n/\xi)], \quad n \gg 1, \end{aligned} \quad (4.93)$$

onde ξ é o mesmo obtido na fórmula Eq. (4.83).

Para $n = 0$ temos, a partir da Eq. (4.91), que

$$A_0 = \frac{\sqrt{g/2}}{\pi} \int_0^\infty \frac{dx}{\sqrt{(\mu + J + x^2)(\mu - J + x^2)}}. \quad (4.94)$$

Considere agora a seguinte mudança de variável $x = \sqrt{\mu - J} \tan \theta$ na integral da Eq. (4.94). Com esta mudança de variável temos que

$$A_0 = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{g}{2(\mu + J)}} \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - [2J/(\mu + J)](\sin(\theta))^2}} = \frac{g}{\pi \sqrt{2g(\mu + J)}} K \left(\sqrt{\frac{2J}{\mu + J}} \right), \quad (4.95)$$

onde $K(z)$ é a integral elíptica completa da primeira espécie.

Para $g \ll J$ e $\mu \rightarrow J$, podemos utilizar a mudança de variável $\mu = J(-1 + 2/z^2)$ para reescrever A_0 como

$$A_0 = \frac{\sqrt{g/J}}{2\pi} z K(z). \quad (4.96)$$

Substituindo a equação acima na restrição esférica, Eq. (4.53), obtemos

$$z K(z) = \frac{\pi \sqrt{J/g}}{2}. \quad (4.97)$$

A equação acima pode ser resolvida, para $g \gg J$ e $z \rightarrow 1^-$, considerando o limite assintótico $K(z) \sim \ln[4/\sqrt{1-z}]$, $z \rightarrow \infty$. Desta forma, obtemos o seguinte resultado:

$$z \sim 1 - 16 \exp \left[-\pi \sqrt{\frac{J}{g}} \right], \quad \mu \sim J + 64J \exp \left[-\pi \sqrt{\frac{J}{g}} \right], \quad g \ll J. \quad (4.98)$$

Substituindo o resultado acima, Eq. (4.98), obtemos para a susceptibilidade *staggered*, Eq. (4.86):

$$\chi_s(h' = 0) \sim \frac{1}{64J} \exp \left[\pi \sqrt{\frac{J}{g}} \right], \quad g \ll J, T = h = h' = 0, \quad (4.99)$$

e para o comprimento de correlação, Eq. (4.83):

$$\xi \sim \frac{\sqrt{2}}{16} \exp \left[\frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{J}{g}} \right], \quad g \ll J, T = h = h' = 0. \quad (4.100)$$

Consideramos agora a mudança de variável $x = \sqrt{\mu - J} \tan \theta$ na Eq. (4.91) para $n \neq 0$. Sendo assim, obtemos

$$A_n = \frac{2(-1)^n \sqrt{g/[2(\mu + J)]}}{\pi} \times \int_0^{\pi/2} \frac{\left\{ 1 + (\mu - J) \sec^2 \theta - \sqrt{(\mu/J)^2 - 1} \sqrt{1 - [2J/(\mu + J)](\sin \theta)^2} \right\}^n}{\sqrt{1 - [2J/(\mu + J)](\sin \theta)^2}} d\theta, \quad (4.101)$$

e, portanto, quando $g \ll J$ e $\mu \approx J$ temos que

$$A_n \sim 2(-1)^n A_0, \quad g \ll J, T = h = h' = 0. \quad (4.102)$$

Utilizando a restrição esférica, Eq. (4.53), obtemos

$$A_n = \frac{(-1)^n}{2}, \quad g = 0, T = h = h' = 0. \quad (4.103)$$

Substituindo o resultado acima nas Eqs. (4.86)-(4.92), obtemos

$$\langle S_{iA} S_{jA} \rangle = \langle S_{iB} S_{jB} \rangle = \frac{1}{4}, \quad \langle S_{iA} S_{jB} \rangle = -\frac{1}{4}, \quad g = 0, T = h = h' = 0. \quad (4.104)$$

Observamos que neste limite não existe ordem de longo alcance, pois os spins locais e a magnetização são nulos, Eqs. (4.87)-(4.89). Entretanto o comprimento de correlação e a susceptibilidade *staggered* divergem para $g \ll J$, exibindo uma singularidade essencial neste regime, Eqs. (4.99) e (4.100). Em particular, para $g = 0$, temos que as funções de correlação se tornam independentes da distância, Eq. (4.104), e assumem valores consistentes com a restrição esférica $\sum_{i\alpha} \langle S_{i\alpha}^2 \rangle = N/4$. Entretanto, a ausência do campo magnético *staggered* impede a quebra de simetria no modelo, fazendo o estado do sistema em $g = T = h = h' = 0$ ser degenerado.

(VI) $g = h = h' = 0$.

Como $h' = 0$, obtemos o mesmo resultado obtido anteriormente nas Eqs. (4.87)-(4.89):

$$M_s = 0 \quad g = h = h' = 0, \quad (4.105)$$

$$\langle S_A \rangle = 0 \quad g = h = h' = 0, \quad (4.106)$$

$$\langle S_B \rangle = 0 \quad g = h = h' = 0. \quad (4.107)$$

Para $g \rightarrow 0$, temos que x_s na Eq. (4.90) é tal que $x_s = \sqrt{(2\pi^2 T^2)/g} s \rightarrow \infty$. Desta forma o termo $s = 0$ domina o coeficiente A_n , resultando em

$$A_n = (2 - \delta_{n0})(-1)^n A_0 \exp(-n/\xi), \quad g = h = h' = 0, \quad (4.108)$$

onde ξ é mesmo comprimento de correlação obtido na Eq. (4.83) e

$$A_0 = \frac{T}{2\sqrt{\mu^2 - J^2}}, \quad g = h = h' = 0. \quad (4.109)$$

Substituindo o resultado acima, Eq. (4.109), na restrição esférica, Eq. (4.53), obtemos o seguinte resultado para o potencial químico:

$$\mu = \sqrt{J^2 + 4T^2}, \quad (4.110)$$

$$\mu = J + 2(T^2/J), \quad T \ll J, \quad g = h = h' = 0. \quad (4.111)$$

Substituindo o resultado acima no comprimento de correlação, Eq. (4.83), e susceptibilidade da célula, Eq. (4.86), obtemos os comportamentos de leis de potência:

$$\chi_s(h' = 0) \sim \frac{J}{2T^2}, \quad T \ll J, \quad g = h = h' = 0, \quad (4.112)$$

$$\xi \sim \frac{J}{2T}, \quad T \ll J, \quad g = h = h' = 0. \quad (4.113)$$

Substituindo a restrição esférica, Eq. (4.53), na Eq. (4.108), obtemos

$$A_n = \frac{(2 - \delta_{n0})(-1)^n}{4} \exp(-n/\xi). \quad (4.114)$$

No limite $T \ll J$, $g = h = h' = 0$, a equação acima nos diz que $A_n \sim (2 - \delta_{n0})\frac{(-1)^n}{4}$ e, portanto, as funções de correlação, Eq. (4.47)-(4.49), assumem os valores

$$\langle S_{iA}S_{jA} \rangle = \langle S_{iB}S_{jB} \rangle = \frac{1}{4}, \quad \langle S_{iA}S_{jB} \rangle = -\frac{1}{4}, \quad T = 0, \quad g = h = h' = 0, \quad (4.115)$$

os quais são compatíveis com a restrição esférica, $\sum_{i\alpha} \langle S_{i\alpha}^2 \rangle = N/4$.

De maneira análoga ao limite anterior, obtemos que os valores locais de spin são nulos, indicando, novamente, que o modelo não apresenta ordem de longo alcance neste regime. Entretanto, ressaltamos que o comprimento de correlação e a susceptibilidade *staggered* divergem para $T \ll J, g = h = h' = 0$ na forma de lei de potência, Eqs. (4.112) e (4.113). Apesar deste comportamento ser distinto do obtido no limite anterior, Eqs. (4.99) e (4.100), existe a mesma coerência entre a susceptibilidade *staggered* e o comprimento de correlação, $\chi_s \sim \xi^2$ [13].

(VII) $g = T = h = 0$.

Fazendo $g = T = 0$ na Eq. (4.90), obtemos $A_n = 0$. Desta forma, a restrição esférica se reduz a

$$\frac{(h')^2}{4(\mu - J)^2} = \frac{1}{4}, \quad (4.116)$$

e portanto

$$\mu = J + h'. \quad (4.117)$$

Substituindo a Eq. (4.117) nas Eqs. (4.32), (4.33) e (4.84), obtemos para os valores locais de spin e magnetização *staggered*:

$$M_s = 1, \quad g = T = h = 0, \quad (4.118)$$

$$\langle S_A \rangle = -\frac{1}{2}, \quad g = T = h = 0, \quad (4.119)$$

$$\langle S_B \rangle = \frac{1}{2}, \quad g = T = h = 0. \quad (4.120)$$

Desta forma a susceptibilidade *staggered* é nula, $\chi_s(h' = 0) = 0$, para $g = T = h = 0$. Da mesma maneira, como $A_n = 0$, o comprimento de correlação é nulo: $\xi = 0$, para $g = T = h = 0$, ressaltando a coerência entre o comprimento de correlação e a

susceptibilidade: $\chi_s \sim \xi^2$.

Como $A_n = 0$, podemos substituir as Eqs. (4.118)-(4.120) nas Eqs. (4.47)-(4.49) para as funções de correlação, obtendo

$$\langle S_{iA} S_{jA} \rangle = \langle S_{iB} S_{jB} \rangle = \frac{1}{4}, \quad \langle S_{iA} S_{jB} \rangle = -\frac{1}{4}, \quad g = T = h = 0. \quad (4.121)$$

Observamos que a coerência entre as Eqs. (4.121) e (4.119),(4.120):

$$\langle S_\alpha \rangle^2 = \langle S_{i\alpha} S_{j\alpha} \rangle = 1/4, \quad g = T = h = 0, \quad \alpha = A, B, \quad (4.122)$$

$$\langle S_A \rangle \langle S_B \rangle = \langle S_{iA} S_{jB} \rangle = -1/4, \quad g = T = h = 0, \quad (4.123)$$

$$(4.124)$$

caracteriza a quebra espontânea de simetria [41] independente do valor do campo magnético *staggered*. Observamos que no caso do modelo antiferromagnético de Heisenberg de spin $S = 1/2$ em uma dimensão o sistema é crítico, isto é, as funções de correlação decaem na forma de lei de potência [42, 43] apesar do sistema não possuir verdadeiros bósons de Goldstone [39].

Enfatizamos que se nos aproximarmos do ponto $g = T = h = h' = 0$ fazendo primeiro $g = T = h = 0$, obtemos valores finitos para a magnetização *staggered* e valores locais de spin. Neste caso a presença do campo magnético *staggered* e ausências do campo magnético uniforme e das flutuações térmicas e quânticas, permitem a existência de ordem de longo alcance. Os valores locais de spin são finitos para $g = T = h = 0$ e consistentes com a ordem antiferromagnética, i.e., $\langle S_A \rangle = -\langle S_B \rangle$. Além disso as funções se tornam independentes da distância e também consistentes com a interação antiferromagnética, já que $\langle S_{iA} S_{jB} \rangle < 0$, e com a restrição esférica, $\sum_{i\alpha} \langle S_{i\alpha}^2 \rangle$. Entretanto, na presença das flutuações térmicas

e quânticas e do campo magnético uniforme, o modelo pode apresentar ordem de curto alcance induzida pelo campo magnético *staggered*. Neste caso os valores locais de spin podem se alinhar antiferromagneticamente, conforme descrito na Fig. 4.2(a). Esta ordem de curto alcance perdura até que o valor do campo magnético uniforme supere o valor do campo magnético *staggered*, ou as flutuações térmicas e quânticas se tornem muito intensas, conforme descrito na Fig. 4.3(b).

(VIII) $T \ll \{J, g, h, h'\}$.

Vamos agora analisar a termodinâmica do modelo em baixas temperaturas. A energia livre de Helmholtz pode ser calculada a partir da Eq. (4.15) e das Eqs. (4.28)-(4.31), conforme resultado abaixo:

$$F = T \sum_{k\sigma=\pm} \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\beta}{2} \omega_{k\sigma} \right) \right] - \frac{N}{4} \mu - \frac{N h^2}{4(\mu + J)} - \frac{N (h')^2}{4(\mu - J)}. \quad (4.125)$$

Com o uso da equação acima, podemos obter a entropia do modelo:

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \sum_{k\sigma} \left\{ \frac{\beta \omega_{k\sigma}}{e^{\beta \omega_{k\sigma}} - 1} - \ln [1 - e^{-\beta \omega_{k\sigma}}] \right\}, \quad (4.126)$$

e de maneira similar o calor específico:

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} = \sum_{k\sigma} \frac{(\beta \omega_{k\sigma})^2 e^{\beta \omega_{k\sigma}}}{[e^{\beta \omega_{k\sigma}} - 1]^2} \left\{ 1 - \frac{g}{\omega_{k\sigma}^2} T \frac{\partial \mu}{\partial T} \right\}. \quad (4.127)$$

No limite do contínuo $N \gg 1$, podemos representar as duas bandas dispersivas $\omega_{k\pm}$ por uma única fórmula $\omega(\theta) = \sqrt{2g(\mu + J \cos \theta)}$, e desta forma podemos transfor-

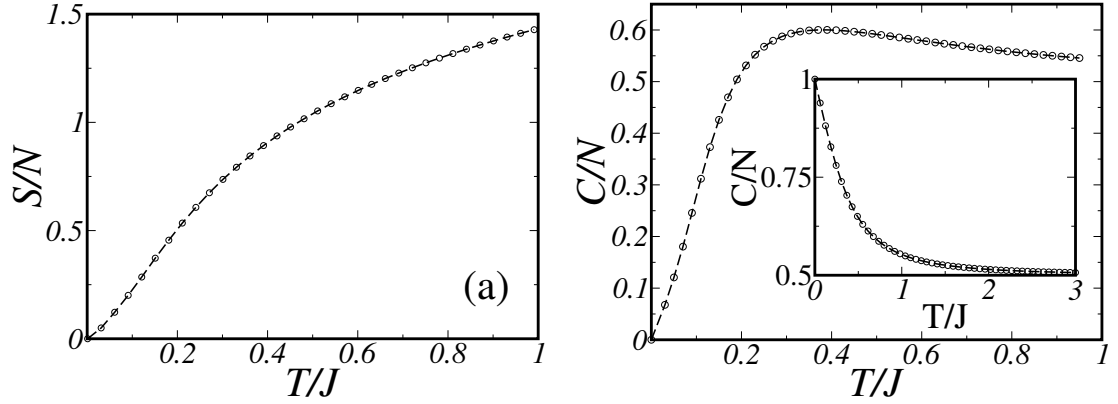


Figura 4.5: (a) Entropia em função de T/J para $g = 0.1J$ e $h = h' = 0$, e (b) calor específico em função de T/J para $g = 0.1J$ e $h = h' = 0$ (gráfico inscrito $g = h = h' = 0$).

mar as expressões da entropia e do calor específico nas seguintes integrais:

$$S = N \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \left\{ \frac{\beta\omega(\theta)}{e^{\beta\omega(\theta)} - 1} - \ln [1 - e^{-\beta\omega(\theta)}] \right\}, \quad (4.128)$$

$$C = N \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{(\beta\omega(\theta))^2 e^{\beta\omega(\theta)}}{[e^{\beta\omega(\theta)} - 1]^2} \left\{ 1 - \frac{g}{\omega(\theta)^2} T \frac{\partial \mu}{\partial T} \right\}. \quad (4.129)$$

No limite de baixas temperaturas podemos considerar a expansão da frequência $\omega(\theta)$ em torno de $k = \pi$, onde $\omega(\theta)$ têm um mínimo, $\omega(\theta) = \theta_d + Ts(\theta - \pi)^2$, sendo $\theta_d = \omega(\theta = \pi) = \sqrt{2g(\mu_0 - J)}$, $\mu_0 = \lim_{T \rightarrow 0} \mu$ e $s = (\theta_d/T) \frac{1}{4(\mu_0/J - 1)}$. Em consequência, podemos reescrever a entropia e o calor específico em baixas temperaturas nas formas abaixo:

$$\frac{S}{N} = (\beta\theta_d) \exp(-\beta\theta_d) \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \exp(-s(\theta - \pi)^2), \quad (4.130)$$

$$\frac{C}{N} = (\beta\theta_d)^2 \exp(-\beta\theta_d) \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \exp(-s(\theta - \pi)^2). \quad (4.131)$$

Realizando a integral acima no limite de baixas temperaturas, onde $s \rightarrow \infty$, obtemos

$$\frac{S}{N} = D \left(\frac{\theta_d}{T} \right)^{1/2} \exp[-(\theta_d/T)], \quad T \ll \{J, g, T, h, h'\}, \quad (4.132)$$

$$\frac{C}{N} = D \left(\frac{\theta_d}{T} \right)^{3/2} \exp[-(\theta_d/T)], \quad T \ll \{J, g, h, h'\}. \quad (4.133)$$

onde $D = \sqrt{4\pi(\mu_0/J - 1)}$. Observamos que um resultado semelhante foi obtido para o modelo esférico ferromagnético quântico em redes hipercúbicas, conforme descrito nas Eqs. (3.132) e (3.130). O comportamento para baixas temperaturas está ilustrado na Fig. 4.5.

Os resultados obtido nas Eqs. (4.132) e (4.133) aproximam a termodinâmica do modelo Heisenberg antiferromagnético quântico anisotrópico (modelo XXZ) [44,45], Fig. 4.6, da termodinâmica do modelo esférico antiferromagnético quântico em baixas temperaturas. De fato, a existência do gap nas excitações acarreta decaimento exponencial da função de correlação, Eq. (4.82), de acordo com o modelo XXZ . No nosso caso, o “gap” é representado por θ_d . Na região A da Fig. 4.6, temos que o calor específico do modelo de Heisenberg quântico ferromagnético anisotrópico ($\Delta < -1$) na presença de um campo magnético finito ($H_0 \neq 0$) se comporta de acordo com a Eq. (4.133), onde Λ_A é o “gap” do modelo supracitado na região A . Na região C da Fig. 4.6, temos que o calor específico do modelo de Heisenberg quântico antiferromagnético anisotrópico ($\Delta > 1$) na presença de um campo magnético finito ($H_0 \neq 0$) difere do comportamento descrito pela Eq. (4.133) por um fator de $(1/2)$ na frente do “gap” do modelo nesta região, Λ_C .

(IX) $g = h = h' = 0$

Vamos analisar o comportamento termodinâmico do modelo esférico clássico na cadeia AB .

Conforme obtido no regime (VIII) a contradição do modelo esférico quântico com a terceira lei da termodinâmica não existe para $g \neq 0$. Entretanto, considerando o limite de $g \rightarrow 0$ e $h = 0$ na Eq. (4.126), esta anomalia aparece como:

$$\begin{aligned} S &\sim S_{div} + S_{div}^{BK} - \frac{1}{2} \sum_{k\sigma} \ln \left[\frac{(2\mu + \sigma J_k)}{2J} \right] + N \\ &= S_{div} + S_{div}^{BK} - \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\mu}{J} - \sqrt{\frac{\mu^2}{J^2} - 1} \right) + N, \end{aligned} \quad (4.134)$$

onde $S_{div} = (N/2) \ln(T/g)$ e $S_{div}^{BK} = (N/2) \ln[T/(2J)]$. Ressaltamos que a divergência extra representada pelo termo S_{div} não está presente no modelo esférico clássico. De fato, considerando a trajetória $g = T$, com $g \rightarrow 0$, esse termo desaparece e obtemos [veja gráfico inscrito na Fig. 4.5(b)]

$$C = C^{BK} + \frac{N}{2}, \quad (4.135)$$

onde o resultado clássico é:

$$C^{BK} = \frac{N}{2} \left(1 + 4K^2 \frac{dz_s}{dK} \right), \quad (4.136)$$

onde $K = J/(8T)$ e $z_s = \mu/J$.

Substituindo o resultado obtido na Eq. (4.110) na Eq. (4.136), obtemos o comportamento do modelo esférico clássico em baixas temperaturas:

$$C^{BK} = \frac{1}{2} - (T/J) + 2(T/J)^3 - 6(T/J)^5 + \dots, \quad g = h = h' = 0, T \ll J, \quad (4.137)$$

e para altas temperaturas:

$$C^{BK} = (1/16)(J/T)^2 - (3/256)(J/T)^4 + (5/2048)(J/T)^6 + \dots, \quad g = h = h' = 0, \quad T \ll J. \quad (4.138)$$

(X) $T \gg \{J, g, h, h'\}$

Vamos agora analisar o comportamento do modelo para temperaturas altas. Quando $T \gg \{J, g, h, h'\}$ o coeficiente A_0 , Eq. (4.52), pode ser aproximado por

$$A_0 \sim \frac{T}{2\mu}, \quad T \gg \{J, g, h, h'\}. \quad (4.139)$$

Substituindo o resultado acima na restrição esférica, Eq. (4.53), obtemos

$$\mu \sim 2T, \quad T \gg \{J, g, h, h'\}. \quad (4.140)$$

Utilizando o resultado acima, obtemos para as frequências do modelo, Eq. (4.17):

$$\omega(\theta) \sim \sqrt{4gT}, \quad T \gg \{J, g, h, h'\}, \quad (4.141)$$

Substituindo o resultado acima nas Eqs. (4.126) e (4.127), obtemos o comportamento da entropia e do calor específico para temperaturas altas:

$$\begin{aligned} \frac{S}{N} &\sim 1 + \ln \left(\frac{T}{\omega(\theta)} \right) \\ &= 1 + (1/2) \ln \left(\frac{T}{4g} \right), \quad T \gg \{J, g, h, h'\}, \end{aligned} \quad (4.142)$$

$$\frac{C}{N} \sim \frac{1}{2}, \quad T \gg \{J, g, h, h'\}. \quad (4.143)$$

Observamos que os graus de liberdade associados aos momentos canonicamente conjugados, $P_{i\alpha}$, não contribuem para o calor específico de temperaturas altas devido ao termo com dependência explícita com g na Eq. (4.127). Esta discrepância em relação ao resultado obtido no oscilador harmônico quântico, onde $C \sim N$ neste limite, se deve ao fato da frequência $\omega(\theta)$ do modelo esférico depender da temperatura, Eq. (4.141). Ressaltamos que para o modelo XXZ , $(S/N) \sim \ln 2$ e $(C/N) \rightarrow 0$ [45] no limite de altas temperaturas, como esperado para modelos de spin 1/2 localizados.

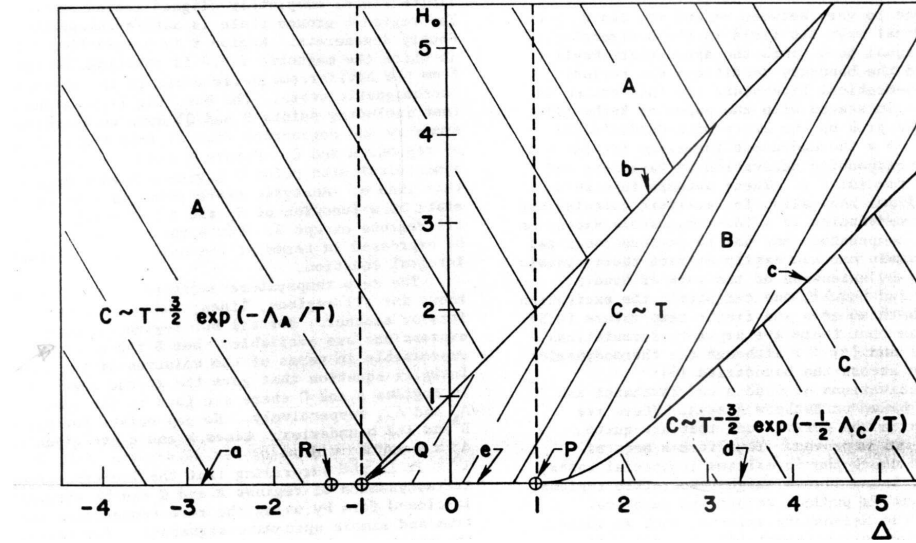


Figura 4.6: Espaço de parâmetros do modelo Heisenberg quântico unidimensional. Δ representa a anisotropia do modelo em unidades de energia ($J = 1$), $\Delta = 1$ corresponde ao Heisenberg antiferromagnético quântico isotrópico, $\Delta = 0$ corresponde ao modelo XY e $\Delta = -1$ corresponde ao modelo Heisenberg quântico ferromagnético, $\Delta = \infty$ corresponde ao modelo de Ising antiferromagnético e $\Delta = -\infty$ corresponde ao modelo de Ising ferromagnético. H_0 é o campo magnético externo em unidades de energia. Na região A o calor específico em baixas temperaturas tem um comportamento que indica a presença de um “gap” no espectro do modelo, valendo o mesmo para a região C e linha d. Na região B o calor específico se anula linearmente com a temperatura. Nas linhas b e c o calor específico se anula como $C \sim T^{1/2}$, indicando uma dispersão quadrática e sem gap. Na linha e e no ponto P o calor específico se anula linearmente com a temperatura. Na linha a temos dois comportamentos: similar ao da região A para pontos à esquerda do ponto R e $C \sim T^{1/2}$ para pontos à direita do ponto R. Diagrama obtido da Ref. [44].

Capítulo 5

Modelo Esférico Quântico na Cadeia AB_2

5.1 Introdução

Neste capítulo vamos estudar o modelo esférico quântico na cadeia AB_2 [46]. As motivações experimentais para o estudo da cadeia AB_2 [20] incluem compostos ferromagnéticos inorgânicos, nos quais os sítios A (B) podem ser a representação de um átomo de metal (ligante) (veja Silvestre e Hoffman na Ref. [20] para possíveis realizações) e compostos de oxocupratos, tais como $\text{Ca}_3\text{Cu}_3(\text{PO}_4)_4$, onde os sítios A (B) representam átomos de cobre em uma cadeia trimérica de cupratos (veja Drilon *et al.* na Ref. [20]). O primeiro anúncio experimental de um polímero orgânico com ferromagnetismo líquido [21] é baseado no poliacetileno e contém um radical orgânico R^* com um elétron desemparelhado, o qual é conhecido como *poly*-BIPO ou *poly*[1,4-bis(2,2,6,6-tetramethyl-4-oxy-4-piperidyl-1-oxy)-butadiin]. A estrutura dos radicais e das ligações químicas é extremamente complexa, fato que explica a di-

ficuldade em se reproduzir amostras deste material [22]. Apesar disso, a área tem apresentado grande atividade. Por exemplo, Nishide e colaboradores [22] conseguiram sintetizar polifenilacetilenos com vários tipos de radicais. Estes polímeros exibem estruturas de bandas sem dispersão (*flat bands*). Então, um momento magnético líquido pode aparecer devido ao número de elétrons π por unidade de célula ser ímpar ou pela presença de elétrons localizados [21, 23]. Além da motivação fenomenológica experimental, existe ainda o interesse no entendimento de sistemas unidimensionais que devido à baixa dimensionalidade apresentam características próprias. No caso da cadeia AB_2 a sua estrutura topológica permite a existência de regiões de caráter ferrimagnético, onde o spin nas duas subredes B_1 e B_2 estão alinhados na mesma direção e sentido, enquanto o spin na subrede A aponta no sentido oposto.

A cadeia AB_2 já vem sendo estudada no contexto de modelos tais como Hubbard e $t - J$ [24], Heisenberg quântico [25], Heisenberg clássico e Ising [26]. Nestes estudos a estrutura topológica pode se fazer presente através da presença de modos sem dispersão que são devidos à simetria entre subredes B_1 e B_2 . A estrutura topológica também pode se fazer presente através de um mapeamento entre as subredes B_1 e B_2 na subrede B da cadeia AB antiferromagnética de spins alternados $S = 1/2$ e $2S = 1$ com $2N/3$ sítios (N é o número de sítios da cadeia AB_2).

5.2 Modelo Esférico

5.2.1 Diagonalização, Energia Livre e Condição Esférica

Vamos indexar cada sítio da cadeia AB_2 através de dois índices: latino $i = 1, \dots, N/3$ para indexar a célula unitária e grego $\alpha = A, B_1, B_2$ para indexar o

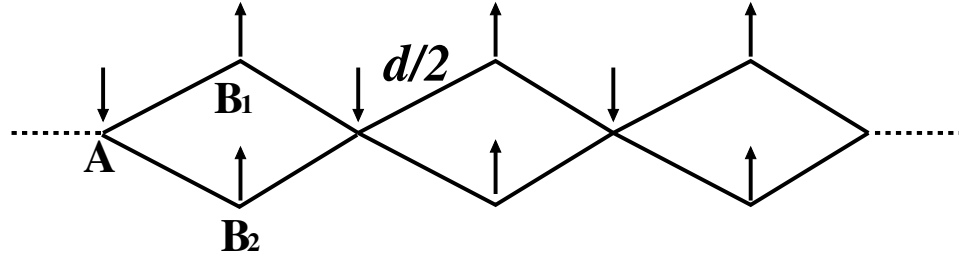


Figura 5.1: Representação esquemática de um estado ferrimagnético na cadeia AB_2 . Consideramos $d = 1$ neste capítulo.

tipo de sítio. Sendo assim podemos escrever o Hamiltoniano do sistema como:

$$H = \frac{g}{2} \sum_{i\alpha} P_{i\alpha}^2 + \frac{J}{2} \sum_{\langle i\alpha, j\beta \rangle} S_{i\alpha} S_{j\beta} - h \sum_{i\alpha} S_{i\alpha} + \mu \sum_{i\alpha} (S_{i\alpha}^2 - 1/4), \quad (5.1)$$

onde $\langle \dots \rangle$ indica soma sobre os primeiros vizinhos da cadeia. Na Eq. (5.1) $J > 0$ é o acoplamento antiferromagnético entre sítios vizinhos, h é o campo magnético externo e g é a constante de acoplamento quântica. No Hamiltoniano, Eq. (5.1), $S_{i\alpha}$ são as variáveis de spin em cada sítio i, α e $P_{i\alpha}$ é o momento conjugado associado a cada uma delas; $P_{i\alpha}$ e $S_{i\alpha}$ obedecem as seguintes regras de comutação ($\hbar = 1$):

$$[S_{i\alpha}, S_{j\beta}] = 0, \quad [P_{i\alpha}, P_{j\beta}] = 0, \quad [S_{i\alpha}, P_{j\beta}] = i\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}. \quad (5.2)$$

As variáveis de spin estão sujeitas a restrição esférica:

$$\sum_{i\alpha} \langle S_{i\alpha}^2 \rangle = \frac{N}{4}, \quad (5.3)$$

onde μ é o potencial químico associado a esta restrição.

Para diagonalizar o Hamiltoniano, Eq. (5.1), introduzimos os operadores bosônicos

que obedecem relações de comutação canônicas:

$$S_{i\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} (a_{i\alpha} + a_{i\alpha}^\dagger), \quad (5.4)$$

$$P_{i\alpha} = \frac{-i}{\sqrt{2}} \left(\frac{2\mu}{g} \right)^{1/4} (a_{i\alpha} - a_{i\alpha}^\dagger). \quad (5.5)$$

Substituindo as transformações Eqs. (3.4),(3.5) no Hamiltoniano, Eq. (5.1), obtemos:

$$\begin{aligned} H = & \sqrt{2g\mu} \sum_{i\alpha} (a_{i\alpha}^\dagger a_{i\alpha} + \frac{1}{2}) - \frac{h}{\sqrt{2}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{i\alpha} (a_{i\alpha} + a_{i\alpha}^\dagger) - \mu \frac{N}{4} \\ & + \frac{J}{4} \sqrt{\frac{g}{2\mu}} \sum_{\langle i\alpha, j\beta \rangle} (a_{i\alpha}^\dagger a_{j\beta} + a_{j\beta}^\dagger a_{i\alpha} + a_{i\alpha} a_{j\beta} + a_{i\alpha}^\dagger a_{j\beta}^\dagger). \end{aligned} \quad (5.6)$$

Podemos tornar evidente a simetria entre as subredes B_1 e B_2 através da seguinte transformação:

$$a_{iA} = a_{iA}, \quad a_{iB}^{(l)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{iB_1} + a_{iB_2}), \quad a_{iB}^{(al)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{iB_1} - a_{iB_2}), \quad (5.7)$$

onde (l) indica um estado ligante e (al) indica um estado anti-ligante. Observamos que o operador $a^{(l)}$ é par pela operação de troca entre sítios $B_1 \leftrightarrow B_2$, enquanto o operador $a^{(al)}$ é ímpar por esta mesma transformação. Observamos que os operadores acima possuem uma fase que pode ser escolhida arbitrariamente sem mudar os resultados físicos. Neste caso fizemos uma escolha que assinala um sinal positivo para o sítio B_1 . Utilizando a transformada de Fourier:

$$a_{i\alpha} = \sqrt{3/N} \sum_k e^{ikx_i} a_{k\alpha}, \quad k = \frac{2\pi}{N/3}v, \quad v = 0, \dots, N/3 - 1, \quad (5.8)$$

e a seguinte transformação que explicita a simetria entre as subredes A e $B_{1,2}$:

$$\psi_k = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{kA} + e^{-ik/2}a_{kB}^{(l)}), \quad \phi_k = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{kA} - e^{-ik/2}a_{kB}^{(l)}), \quad (5.9)$$

podemos escrever operadores que tornam explícita a conservação global do momento na cadeia:

$$\Delta_{k+} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_k + \psi_{-k}), \quad \Delta_{k-} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_k - \psi_{-k}), \quad k \neq 0; \quad (5.10)$$

$$\Theta_{k+} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_k + \phi_{-k}), \quad \Theta_{k-} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_k - \phi_{-k}), \quad k \neq 0; \quad (5.11)$$

$$\psi_0 = \psi_{k=0}, \quad \phi_0 = \phi_{k=0}. \quad (5.12)$$

Na Eq. (5.9) o fator $e^{-ik/2}$ é devido à distância $d/2$ entre sítios A e $B_{1,2}$ primeiros vizinhos, onde $d \equiv 1$ é o comprimento da célula unitária (veja Fig. 5.1). Observamos que a Eq. (5.9) não contém apenas operadores associados ao estado ligante. A razão para isso reside no fato que a transformação Eq. (5.7) faz com que o Hamiltoniano se torne diagonal nos operadores anti-ligantes. De forma que não precisamos mais considerar os operadores anti-ligantes, no procedimento de diagonalização do Hamiltoniano, Eq. (5.1); a partir da Eq. (5.9) em diante. Introduzindo as transformações, Eqs. (5.8)-(5.12) na Eq. (5.6) e utilizando o modelo auxiliar tipo A descrito no Apêndice B, podemos diagonalizar o Hamiltoniano como:

$$H = \sum_k \sum_{m=0,\pm 1} \left[\omega_{k,m} \left(\lambda_{k,m}^\dagger \lambda_{k,m} + \frac{1}{2} \right) \right] - \frac{N}{3} \left[\frac{h^2(1 + \sqrt{2}/2)^2}{4(\mu + \sqrt{2}J)} + \frac{h^2(1 - \sqrt{2}/2)^2}{4(\mu - \sqrt{2}J)} \right] - \mu \frac{N}{4},$$

onde $\lambda_{k>0,1} = \alpha_{k+}$, $\lambda_{k<0,1} = \alpha_{k-}$, $\lambda_{k=0,1} = \alpha_0$, $\lambda_{k>0,-1} = \beta_{k+}$, $\lambda_{k<0,-1} = \beta_{k-}$, $\lambda_{k=0,-1} = \beta_0$ e $\lambda_{k,0} = a_{kB}^{(al)}$, e

$$\alpha_{k\pm} = \frac{1}{2} (1 + J_k/(2\mu))^{1/4} \left[\left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 + J_k/(2\mu)}} \right) \Delta_{k\pm\pm} \right. \\ \left. \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + J_k/(2\mu)}} \right) \Delta_{k\pm}^\dagger \right], \quad (5.13)$$

$$\beta_{k\pm} = \frac{1}{2} (1 - J_k/(2\mu))^{1/4} \left[\left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 - J_k/(2\mu)}} \right) \Theta_{k\pm\pm} \right. \\ \left. \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 - J_k/(2\mu)}} \right) \Theta_{k\pm}^\dagger \right], \quad (5.14)$$

$$\alpha_0 = \frac{1}{2} (1 + J_0/(2\mu))^{1/4} \left[\left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 + J_0/(2\mu)}} \right) \psi_0 + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + J_0/(2\mu)}} \right) \psi_0^\dagger \right] \\ - \frac{h}{2\sqrt{2}\mu} \sqrt{N/3} \left(\frac{2\mu}{g} \right)^{1/4} \left[\frac{1 + \sqrt{2}/2}{(1 + J_0/(2\mu))^{3/4}} \right], \quad (5.15)$$

$$\beta_0 = \frac{1}{2} (1 - J_0/(2\mu))^{1/4} \left[\left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 - J_0/(2\mu)}} \right) \phi_0 + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 - J_0/(2\mu)}} \right) \phi_0^\dagger \right] \\ + \frac{h}{2\sqrt{2}\mu} \sqrt{N/3} \left(\frac{2\mu}{g} \right)^{1/4} \left[\frac{1 - \sqrt{2}/2}{(1 - J_0/(2\mu))^{3/4}} \right]. \quad (5.16)$$

As frequências naturais do sistema aparecem em três bandas:

$$\omega_{k,m} = \sqrt{2g\mu + gJ_{k,m}}, \quad m = 0, \pm 1, \quad (5.17)$$

onde $J_{k,m} = 2\sqrt{2}mJ \cos(k/2)$ and $J_k = J_{k,m=1}$ (veja Fig. 5.2). Observamos que as duas frequências dispersivas ($m = \pm$) representam a transformada de Fourier de uma cadeia linear antiferromagnética com acoplamento efetivo $J \rightarrow \sqrt{2}J$ e número de sítios igual a $2N/3$; já a banda localizada ($m = 0$) aparece devido à topologia

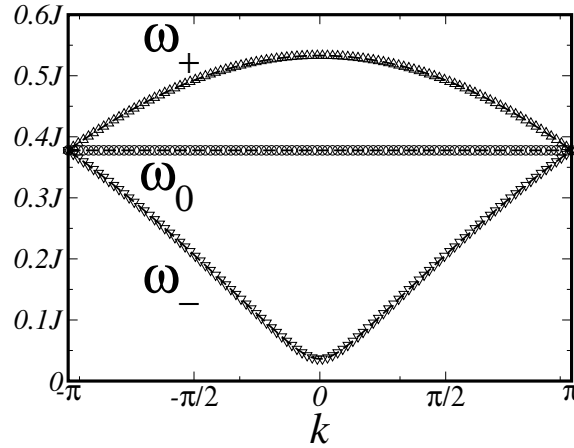


Figura 5.2: Frequências naturais do modelo para $g = T = 0.05J$ e $h = 0.05J$.

da cadeia AB_2 . A expansão, no limite de $k \rightarrow 0$, dos modos dispersivos resulta em $A_{\pm} \mp B_{\pm}k^2$, onde $A_{\pm}$ e $B_{\pm}$ são constantes positivas. Além disso a dependência em k^2 , típica de mágnons, está presente junto com um termo constante. Adiante na análise termodinâmica de observáveis como o calor específico e a entropia, investigaremos em detalhe o papel desses termos. Ainda observamos que todos os modos possuem um “gap” para g finito e são nulos para $g = 0$. Lembramos ainda que a presença de um gap nas autoenergias de um sistema físico garante que o sistema tenha correlações que decaiam exponencialmente com a distância e, portanto, seja não-crítico.

O Hamiltoniano na forma diagonal, Eq. (5.13), permite o cálculo das médias térmicas através do uso do operador densidade de estados:

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} = \prod_{k,m} \left\{ (1 + e^{-\beta \omega_{k,m}}) e^{-\beta \omega_{k,m} \lambda_{k,m}^{\dagger} \lambda_{k,m}} \right\}, \quad (5.18)$$

onde uma média térmica é definida por $\langle \dots \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \dots)$, e $\beta = 1/T$, T é a temperatura do modelo e a constante de Boltzmann k_B vale 1. As médias térmicas de um

e dois operadores bosônicos são:

$$\langle \lambda_{k,m} \rangle = \langle \lambda_{k,m}^\dagger \rangle = 0 \quad \text{e} \quad (5.19)$$

$$\langle \lambda_{k,m} \lambda_{p,n} \rangle = 0, \quad \langle \lambda_{k,m}^\dagger \lambda_{p,n} \rangle = \frac{\delta_{k,p} \delta_{m,n}}{e^{\beta \omega_{k,m}} - 1}. \quad (5.20)$$

A energia livre de Helmholtz, $F = U - TS$, onde $U = \langle H \rangle$ é a energia interna e $S = -\langle \ln \hat{\rho} \rangle$ é a entropia, pode ser obtida através do uso das médias, Eqs. (5.19) e (5.20), nas Eqs. (5.13) e (5.18). O resultado é:

$$F = T \sum_{k,m} \ln \left[2 \sinh \left(\frac{1}{2} \beta \omega_{k,m} \right) \right] - \frac{N}{3} \left[\frac{h^2(1 + \sqrt{2}/2)^2}{4(\mu + \sqrt{2}J)} + \frac{h^2(1 - \sqrt{2}/2)^2}{4(\mu - \sqrt{2}J)} \right] - \mu \frac{N}{4}, \quad (5.21)$$

que inclui um termo típico de bósons livres, um devido ao potencial químico e outro devido ao campo magnético externo.

Podemos expressar a restrição esférica, Eq. (5.3), como uma equação para o potencial químico através da condição $\partial F / \partial \mu = 0$:

$$\frac{h^2(1 + \sqrt{2}/2)^2}{4(\mu + \sqrt{2}J)^2} + \frac{h^2(1 - \sqrt{2}/2)^2}{4(\mu - \sqrt{2}J)^2} + \frac{3}{N} \sum_{k,m} \frac{g}{2\omega_{k,m}} \coth \left[\frac{1}{2} \beta \omega_{k,m} \right] = \frac{3}{4}. \quad (5.22)$$

Para obter o potencial químico μ da Eq. (5.22), vamos utilizar a fórmula de Euler-Maclaurin para obter:

$$\sum_{k,m} \rightarrow \sum_m \frac{N}{3} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi}, \quad N \gg 1. \quad (5.23)$$

Utilizando a Eq. (5.23) no último termo da Eq. (5.22), obtemos:

$$\begin{aligned} & \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{g}{2\omega_{k,m}} \coth \left[\frac{1}{2} \beta \omega_{k,m} \right] \\ &= 2 \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{g}{2\omega(\theta)} \coth \left[\frac{1}{2} \beta \omega(\theta) \right] + \frac{g}{2\omega_0} \coth \left[\frac{1}{2} \beta \omega_0 \right], \end{aligned} \quad (5.24)$$

onde as duas bandas dispersivas $(\omega_{k,\pm 1})$ são agora representadas por

$$\omega(\theta) = \sqrt{2g\mu + 2\sqrt{2}gJ \cos \theta}, \quad (5.25)$$

e a banda localizada é identificada como $\omega_0 = \sqrt{2g\mu}$. Para proceder à análise da Eq. (5.22) no limite do contínuo, $N \gg 1$, consideramos a seguinte função:

$$Y(a, b, c, \theta) = \frac{\sqrt{c} \coth(\sqrt{c(a + b \cos \theta)})}{\sqrt{a + b \cos \theta}}, \quad (5.26)$$

e a sua transformada de Fourier:

$$Y(a, b, c, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(a, b, c) \cos(n\theta), \quad (5.27)$$

$$A_n(a, b, c) = (2 - \delta_{n0}) \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} Y(a, b, c, \theta) \cos(n\theta), \quad (5.28)$$

$$B_0(a, c) = Y(a, b = 0, c, \theta), \quad (5.29)$$

de modo que podemos reescrever a Eq. (5.22), para $N \gg 1$, como:

$$\begin{aligned} & 2A_0 \left(\frac{2\mu}{T}, \frac{2\sqrt{2}J}{T}, \frac{g}{4T} \right) + B_0 \left(\frac{2\mu}{T}, \frac{g}{4T} \right) \\ &+ \frac{h^2(1 + \sqrt{2}/2)^2}{4(\mu + \sqrt{2}J)^2} + \frac{h^2(1 - \sqrt{2}/2)^2}{4(\mu - \sqrt{2}J)^2} = \frac{3}{4}. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Os coeficientes da série de Fourier, $A_n(a, b, c)$, podem ser calculados a partir da expansão em frações parciais da cotangente hiperbólica:

$$\coth x = \frac{1}{x} + \sum_{s=1}^{\infty} \frac{2x}{x^2 + s^2 \pi^2}, \quad (5.31)$$

e

$$\frac{1}{c + d \cos \theta} = \frac{1}{\sqrt{c^2 - d^2}} \left(1 + 2 \sum_{s=1}^{\infty} \left((c/d) - \sqrt{(c/d)^2 - 1} \right)^s \cos(s\theta) \right), \quad c > d > 0, \quad (5.32)$$

de forma a obter:

$$A_n(a, b, c) = (2 - \delta_{n0})(-1)^n \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{\left[(a_s/b) - \sqrt{(a_s/b)^2 - 1} \right]^n}{\sqrt{a_s^2 - b^2}}, \quad (5.33)$$

$$B_0(a, c) = \frac{1}{a} + 2 \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{a_s}, \quad a_s = a + \frac{s^2 \pi^2}{c}. \quad (5.34)$$

Neste ponto vamos ressaltar dois limites importantes para A_0 e B_0 . Para $g = 0$,

$$A_0 = \frac{T}{2\sqrt{\mu^2 - 2J^2}}, \quad B_0 = \frac{T}{2\mu}, \quad (5.35)$$

e, para $T \rightarrow 0$, temos $c = (g/4T) \rightarrow \infty$, tal que $a_{s+1} - a_s \rightarrow 0$, que no limite do contínuo da fórmula de Euler-Maclaurin resulta em:

$$\begin{aligned} A_0 &= \frac{\sqrt{g}}{\pi} \int_0^\infty \frac{dx}{\sqrt{(2\mu + x^2)^2 - 8J^2}} = \frac{g}{2\sqrt{2g(\mu + \sqrt{2}J)}} \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - (k \sin(\theta))^2}} \\ &= \frac{g}{2\sqrt{2g(\mu + \sqrt{2}J)}} \frac{2}{\pi} K(k), \quad k = \sqrt{\frac{2\sqrt{2}J}{\mu + \sqrt{2}J}}, \end{aligned} \quad (5.36)$$

onde $K(k)$ é a integral elíptica completa da primeira espécie. Como $\mu \geq \sqrt{2}J$ para garantir que as frequências naturais, Eq. (5.17), sejam reais temos que $0 < k \leq 1$. De maneira análoga ao resultado obtido na Eq. (5.35), podemos obter o limite de $T \rightarrow 0$ de B_0 fazendo $J = 0$ na Eq. (5.36):

$$B_0 = \frac{g}{2\sqrt{2g\mu}}. \quad (5.37)$$

5.2.2 Potencial Químico

Podemos obter expansões para o potencial químico em diversos limites através dos resultados obtidos anteriormente nesta seção; em alguns casos, entretanto, dificuldades analíticas nos fizeram utilizar métodos numéricos para encontrar a solução da Eq. (5.30). Com o uso da solução encontrada podemos obter por substituição todas as funções necessárias para o entendimento do modelo, conforme veremos nas próximas seções.

(A) $g = h = 0, T \ll J$.

Este limite corresponde ao modelo esférico clássico na cadeia AB_2 com campo magnético nulo e em baixas temperaturas. A partir da Eq. (5.30), podemos obter

a equação para o potencial químico no caso em que $g = h = 0$:

$$\frac{T}{2} \left[\frac{1}{\mu} + \frac{2}{\sqrt{\mu^2 - 2J^2}} \right] = \frac{3}{4}. \quad (5.38)$$

Definindo x através de $\mu = \sqrt{2}J(1+x)$ e $t = 2/(3J)$, podemos reescrever a Eq. (5.38) como a seguinte expansão para $x \rightarrow 0$:

$$t = x^{1/2} - \frac{\sqrt{2}}{2}x + \frac{3}{4}x^{3/2} + O(x^{5/2}). \quad (5.39)$$

Considere agora o *Ansatz*

$$x = a_2 t^2 + a_3 t^3 + a_4 t^4 + \dots, \quad (5.40)$$

que, substituído na Eq. (5.39), nos leva às seguintes equações para os coeficientes,

$$a_2^{1/2} = 1, \quad a_3/(2a_2^{1/2}) - (\sqrt{2}a_2)/2 = 0, \quad a_4/(2a_2^{1/2}) - a_3^2/(8a_2^{3/2}) - (\sqrt{2}a_3)/2 + (3a_2^{3/2})/4 = 0, \quad (5.41)$$

cuja solução nos leva ao resultado

$$\mu = \sqrt{2}J \left[1 + (2T/3J)^2 + \sqrt{2}(2T/3J)^3 + (2T/3J)^4 + O(T^5) \right], \quad g = h = 0, \quad T \ll J. \quad (5.42)$$

Observamos que o ponto $g = T = h = 0$ só é obtido mediante o anulamento das flutuações térmicas, pois qualquer aumento da temperatura afasta o potencial químico do seu valor para $g = T = h = 0$, $\mu = \sqrt{2}J$. O tipo de comportamento descrito na Eq. (5.42) vai se mostrar determinante no comportamento de observáveis tais como a susceptibilidade e comprimento de correlação.

(B) $g = h = 0, T \gg J$.

Este limite corresponde ao modelo esférico clássico em altas temperaturas e a campo magnético nulo. Considere as variáveis $b = 3J/(2T)$ e $y = J/\mu$, apropriadas para o estudo da Eq. (5.38) no limite $T \gg J$. Substituindo as variáveis b e y na equação para o potencial químico, Eq. (5.38), podemos reescrevê-la como uma expansão para $y \rightarrow 0$:

$$b = 3y + 2y^3 + 3y^5 + O(y^7). \quad (5.43)$$

Com o uso do *ansatz*:

$$y = a_1 b + a_3 b^3 + a_5 b^5 + \dots, \quad (5.44)$$

na Eq. (5.43), obtemos as seguintes equações para os coeficientes:

$$3a_1 = 1, \quad 3a_3 + 2a_1^3 = 0, \quad 3a_5 + 6a_1^2 a_3 + 3a_1^5 = 0, \quad (5.45)$$

cujas soluções fornece o seguinte resultado:

$$\mu = 2T + J^2/(3T) + J^4/(72T^3) + O(1/T^5), \quad g = h = 0, T \gg J. \quad (5.46)$$

Observamos que a dependência linear do potencial químico com a temperatura garante que o modelo obedeça a lei de Curie neste limite, conforme veremos adiante.

(C) $T = h = 0, g \ll J$.

Este limite representa o estado fundamental do modelo esférico quântico a campo nulo e para fracas flutuações quânticas. Utilizando os resultados obtidos nas Eqs. (5.36) e (5.37), podemos escrever a equação para o potencial químico, Eq. (5.30),

como:

$$\frac{g}{2\sqrt{2}g\mu} + \frac{g}{\sqrt{2g(\mu + \sqrt{2}J)}} \frac{2}{\pi} K \left(\sqrt{2\sqrt{2}J/(\mu + \sqrt{2}J)} \right) = \frac{3}{4}. \quad (5.47)$$

Definindo variáveis apropriadas para análise da Eq. (5.47): $s = (1/3)\sqrt{g/(\sqrt{2}J)}$ e z através da relação $\mu = \sqrt{2}J(-1 + 2/z^2)$, podemos reescrever a Eq. (5.47) como:

$$s = \frac{1}{z(1 - z^2/2)^{-1/2} + (4/\pi)zK(z)}. \quad (5.48)$$

Utilizando a expansão da função elíptica para $|z - 1| < 1$:

$$K(z) = \ln \left(\frac{4}{\sqrt{1-z}} \right) (1 - (z-1)/4 + O((z-1)^2)), \quad (5.49)$$

na Eq. (5.48), obtemos o limite assintótico:

$$z \sim 1 - 16 \exp \left(-(3\pi)/2 \sqrt{\frac{\sqrt{2}J}{g}} \right), \quad (5.50)$$

que nos leva ao resultado:

$$\mu \sim \sqrt{2}J \left[1 + 64 \exp \left(-(3\pi)/2 \sqrt{\frac{\sqrt{2}J}{g}} \right) \right], \quad T = h = 0, g \ll J. \quad (5.51)$$

Observamos que ao nos aproximarmos do ponto $g = T = h = 0$ através do estado fundamental quântico do modelo, obtemos uma expressão não-analítica para o potencial químico. Uma expressão deste tipo vai ser a origem matemática das expressões não-analíticas para o comprimento de correlação e susceptibilidade, conforme veremos adiante. O comportamento descrito na Eq. (5.51) indica que neste

regime o modelo se torna extremamente suscetível a qualquer variação das flutuações quânticas.

(D) $T = h = 0, g \gg J$.

Este limite representa o estado fundamental do modelo esférico quântico a campo nulo e para flutuações quânticas intensas. Definindo novas variáveis $c = \sqrt{(\sqrt{2}J)/g}$ e z através da relação $\mu = \sqrt{2}J(-1 + 2z^{-2})$, podemos reescrever a Eq. (5.47) como:

$$c = (1/3) \left(z(1 - z^2/2)^{-1/2} + (4/\pi)zK(z) \right). \quad (5.52)$$

Com o uso da expansão da função elíptica em torno de $z = 0$:

$$K(z) = \frac{\pi}{2} \left(1 + z^2/4 + (9z^4)/64 + O(z^6) \right), \quad (5.53)$$

podemos substituí-la na Eq. (5.52) para obter a expansão para c :

$$c = z + z^3/4 + z^5/8 + O(z^7). \quad (5.54)$$

Utilizando o *ansatz* na Eq. (5.54), obtemos as equações para os coeficientes:

$$a_1 = 1, a_3 + a_1^3/4 = 0, a_5 + (3/4)a_1^2a_3 + (1/8)a_1^5 = 0, \quad (5.55)$$

cujas soluções fornece o resultado:

$$z = c - c^3/4 + c^5/16 + O(c^7). \quad (5.56)$$

Substituindo a Eq. (5.56) em $\mu = \sqrt{2}J(-1 + 2z^{-2})$, obtemos o resultado:

$$\mu = 2g + J^2/(4g) + O(g^{-2}), \quad T = h = 0, \quad g \gg J. \quad (5.57)$$

A dependência linear do potencial químico com g representa a origem matemática da lei de Curie quântica obedecida pelo modelo neste regime, conforme veremos adiante no cálculo da susceptibilidade.

(E) $g = T = 0, h \ll J$.

Este limite representa o estado fundamental do modelo esférico clássico para campo magnético baixo. Quando temos somente o campo magnético presente no sistema, a equação para o potencial químico se simplifica:

$$\frac{h^2 (1 + \sqrt{2}/2)^2}{4 (\mu + \sqrt{2}J)^2} + \frac{h^2 (1 - \sqrt{2}/2)^2}{4 (\mu - \sqrt{2}J)^2} = \frac{3}{4}. \quad (5.58)$$

Definindo a variável x pela relação $\mu = \sqrt{2}J(1+x)$ e utilizando a Eq. (5.58) podemos obter a seguinte expansão para $x \rightarrow 0$:

$$(h/J)^2 = 12(3 + 2\sqrt{2})x^2 - 3(99 + 70\sqrt{2})x^4 + 3(99 + 70\sqrt{2})x^5 + O(x^6). \quad (5.59)$$

Com o uso do *ansatz* :

$$x = c_1(h/J) + c_2(h/J)^2 + c_3(h/J)^3 + c_4(h/J)^4 + c_5(h/J)^5 + O((h/J)^6), \quad (5.60)$$

na Eq. (5.59) obtemos as seguintes equações para os coeficientes:

$$\begin{aligned} c_1^2 - 12(3 + 2\sqrt{2}) &= 1, \quad 2c_1c_2 = 0, \quad 12(3 + 2\sqrt{2})(c_2^2 + c_1c_3) - 3(99 + 70\sqrt{2})c_1^4 = 0, \\ -12(99 + 70\sqrt{2})c_1^3c_2 + 24(3 + 2\sqrt{2})(c_1c_4 + 2c_2c_3) + 3(99 + 70\sqrt{2})c_1^5 &= 0, \end{aligned} \quad (5.61)$$

cujas soluções fornecem o resultado desejado:

$$\begin{aligned} \mu = \sqrt{2}J \left(1 + \frac{\sqrt{9 - 6\sqrt{2}}}{6}(h/J) + \frac{(9 + 6\sqrt{2})\sqrt{9 - 6\sqrt{2}}}{1728}(h/J)^3 \right. \\ \left. - \frac{1}{1152}(h/J)^4 + O((h/J)^5) \right), \quad g = T = 0, h \ll J. \end{aligned} \quad (5.62)$$

Note que para campos magnéticos baixos o comportamento do potencial químico é linear com respeito ao campo magnético. Este resultado demonstra que a simetria entre os sentidos a favor e contrário ao campo magnético foi quebrada, indicando a presença de ordem de longo alcance para $g = T = h = 0$; conforme veremos adiante. (F) $g = T = 0, h \gg J$.

Este é o estado fundamental do modelo esférico quântico a campo nulo e no regime de altos valores do campo magnético. Utilizando a variável $y = (\sqrt{2}J)/\mu$ na Eq. (5.58), obtemos a expansão para $y \rightarrow 0$:

$$\frac{2J^2}{h^2} = y^2 - (4\sqrt{2}y^3)/2 + 3y^4 + O(y^5). \quad (5.63)$$

Para resolver a Eq. (5.63), utilizamos o *ansatz*:

$$y = d_1(J/h) + d_2(J/h)^2 + d_3(J/h)^3 + d_4(J/h)^4 + O((J/h)^5), \quad (5.64)$$

cujas substituição na Eq. (5.63) fornece a equação para os coeficientes:

$$d_1^2 = 2, 2d_1d_2 - (4\sqrt{2})/3d_1^3 = 0, 2d_1d_3 + d_2^2 - 4\sqrt{2}d_1^2d_2 + 3d_1^4 = 0. \quad (5.65)$$

A solução da Eq. (5.65) permite obter a solução desejada:

$$\mu = h \left(1 - (4J)/3h + 3(J/h)^2 + O((J/h)^3) \right), \quad g = T = 0, h \gg J. \quad (5.66)$$

Observamos que a dependência linear do potencial químico com o campo magnético é a origem da saturação do modelo para campos magnético altos, onde o sentido paralelo ao campo magnético é favorecido.

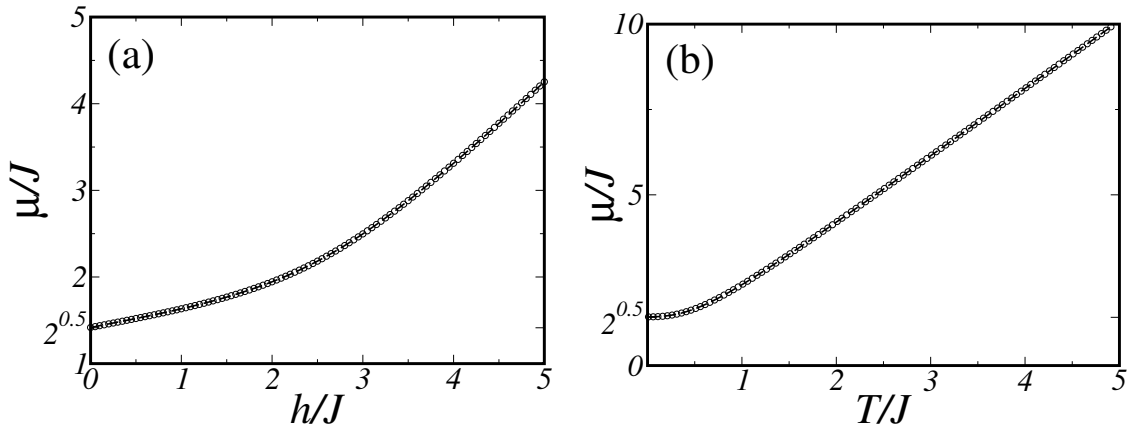


Figura 5.3: Potencial químico em função de: (a) h/J para $g = T = 0.05J$ e (b) g/J para $T = h = 0.05J$.

(G) $h \gg \{J, g, T\}$.

Este é o regime de saturação magnética do modelo esférico quântico. Quando $h \gg \{J, g, T\}$, a equação para o potencial químico, Eq. (5.30), se reduz à Eq. (5.58). Sendo assim, o resultado neste limite é o mesmo obtido para $g = T = 0, h \gg J$

[regime (F)]:

$$\mu = h \left(1 - (4J)/3h + 3(J/h)^2 + O((J/h)^3) \right), \quad h \gg \{J, g, T\}. \quad (5.67)$$

No final das contas, os regimes (F) e (G) são idênticos, pois na Eq. (5.30) o campo magnético h está em um termo à parte, sem se acoplar com g e T . Lembrando que este comportamento garante a saturação magnética do modelo e está demonstrado na Fig. 5.3(a).

(H) $T \gg \{J, g, h\}$.

Este é o regime de altas temperaturas do modelo esférico quântico. No limite $T \gg \{J, g, h\}$, podemos utilizar os limites assintóticos das Eqs. (5.33) e (5.34), $A_0 \sim T/(2\mu)$ e $B_0 \sim T/(2\mu)$, e substituí-los na equação do potencial químico, Eq. (5.30), para obter

$$3T/(2\mu) \sim 3/4. \quad (5.68)$$

A solução da equação anterior nos leva ao resultado

$$\mu \sim 2T, \quad T \gg \{J, g, h\}, \quad (5.69)$$

o qual corrobora aquele obtido no regime (B). Lembramos que este tipo de comportamento, demonstrado na Fig. 5.3(b), garante a validade da Lei de Curie para o modelo neste limite, conforme veremos adiante.

(I) $g \gg \{J, T, h\}$.

Este é o regime altamente quântico do modelo esférico. Considerando o limite

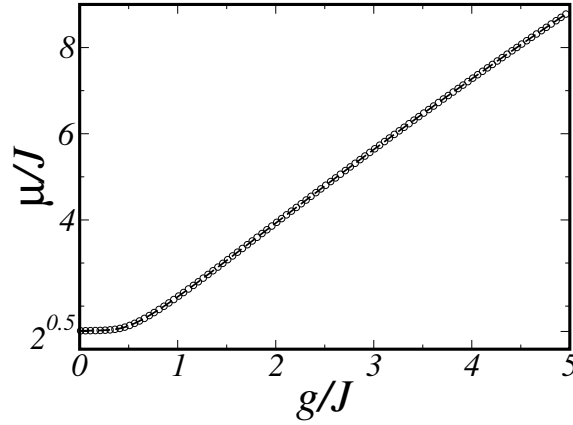


Figura 5.4: Potencial químico em função de g para $T = h = 0.05J$.

$g \gg \{J, T, h\}$ das Eqs. (5.33) e (5.34), obtemos os seguintes assintóticos:

$$A_0 \sim 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{T}{2\mu + x_l^2}, \quad g \gg \{J, T, h\}, \quad (5.70)$$

$$B_0 \sim 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{T}{2\mu + x_l^2}, \quad g \gg \{J, T, h\}, \quad (5.71)$$

onde $x_l = (2\pi T l)/\sqrt{g}$. Como $x_{l+1} - x_l = (2\pi T)/\sqrt{g} \rightarrow 0$, quando $g \gg \{J, T, h\}$, podemos transformar a soma na Eq. (5.71) na integral

$$A_0 \sim \frac{2\sqrt{g}}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{dx}{2\mu + x^2} = \frac{g}{2\sqrt{2g\mu}}, \quad (5.72)$$

$$B_0 \sim \frac{2\sqrt{g}}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{dx}{2\mu + x^2} = \frac{g}{2\sqrt{2g\mu}}, \quad (5.73)$$

que, substituída na equação do potencial químico, nos fornece o resultado

$$\frac{3}{2\sqrt{2g\mu}} \sim \frac{3}{4}. \quad (5.74)$$

A solução da equação acima resulta no limite assintótico para o potencial químico

$$\mu \sim 2g, \quad g \gg \{J, T, h\}, \quad (5.75)$$

confirmando o resultado obtido no regime (D). Este comportamento, descrito na Fig. 5.4, garante a Lei de Curie quântica do modelo, conforme veremos adiante.

(J) $h \ll \{J, g, T\}$.

Este é o regime de baixo campo magnético do modelo esférico quântico. A equação para o potencial químico, Eq. (5.30), é escrita como

$$2A_0 + B_0 + h^2 l(\mu) = 3/4, \quad (5.76)$$

onde, utilizando as Eqs. (5.33) e (5.34),

$$A_0 = \frac{T}{\sqrt{4\mu^2 - 8J^2}} + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{2T}{\sqrt{(2\mu + x_l^2) - 8J^2}}, \quad x_l = (2\pi T l)/\sqrt{g}, \quad (5.77)$$

$$B_0 = \frac{T}{2\mu} + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{2T}{2\mu + x_l^2}, \quad (5.78)$$

$$l(\mu) = \frac{1}{4} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{(\mu + \sqrt{2}J)^2} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{(\mu - \sqrt{2}J)^2} \right]. \quad (5.79)$$

Note que tanto A_0 como B_0 e $l(\mu)$ são finitos para $\mu \neq \sqrt{2}J$, e em particular para $h = 0$. Considere então as seguintes derivadas:

$$\frac{\partial A_0}{\partial \mu} = -\frac{2T}{\sqrt{\mu^2 - 2J^2}} - \sum_{l=1}^{\infty} \frac{4T(2\mu + x_l^2)}{[(2\mu + x_l^2)^2 - 8J^2]^{3/2}} < 0, \quad (5.80)$$

$$\frac{\partial B_0}{\partial \mu} = -\frac{T}{2\mu^2} - \sum_{l=1}^{\infty} \frac{4T}{(2\mu + x_l^2)^2} < 0, \quad (5.81)$$

$$\frac{\partial l}{\partial \mu} = -\frac{1}{2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{(\mu + \sqrt{2}J)^3} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{(\mu - \sqrt{2}J)^3} \right] \quad (5.82)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 A_0}{\partial \mu^2} &= -\frac{4T}{(4\mu^2 - 8J^2)^{3/2}} - \sum_{l=1}^{\infty} \frac{4T}{[(2\mu + x_l^2)^2 - 8J^2]^{3/2}} + \frac{3T\mu^2}{[\mu^2 - 2J^2]^{5/2}} \\ &\quad - \sum_{l=1}^{\infty} \frac{24T(2\mu + x_l^2)^2}{[(2\mu + x_l^2)^2 - 8J^2]^{5/2}} \end{aligned} \quad (5.83)$$

$$\frac{\partial^2 B_0}{\partial \mu^2} = \frac{3T}{\mu^3} + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{24T}{(2\mu + x_l^2)^3} \quad (5.84)$$

$$\frac{\partial^2 l}{\partial \mu^2} = \frac{3}{2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{(\mu + \sqrt{2}J)^4} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{(\mu - \sqrt{2}J)^4} \right], \quad (5.85)$$

onde $x_l = (2\pi T l)g^{-1/2}$. Estas equações são finitas para $\mu \neq \sqrt{2}J$, e em particular para $h = 0$. Agora, derivamos a equação Eq. (5.76) em relação a h :

$$\left(2\frac{\partial A_0}{\partial \mu} + \frac{\partial B_0}{\partial \mu} \right) \frac{\partial \mu}{\partial h} + 2hl(\mu) + h^2 \frac{\partial l}{\partial \mu} \frac{\partial \mu}{\partial h} = 0, \quad (5.86)$$

e em seguida consideramos o limite $h \ll \{J, g, T\}$, que nos leva ao resultado

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial \mu}{\partial h} = 0. \quad (5.87)$$

Derivamos a Eq. (5.76) uma segunda vez em relação a h :

$$2l(\mu) + \left[2\frac{\partial^2 A_0}{\partial \mu^2} + \frac{\partial^2 B_0}{\partial h^2} + h^2 \frac{\partial^2 l}{\partial \mu^2} \right] \left(\frac{\partial \mu}{\partial h} \right)^2 + \left[2\frac{\partial A_0}{\partial \mu} + \frac{\partial B_0}{\partial \mu} + \frac{\partial B_0}{\partial \mu} + h^2 \frac{\partial l}{\partial \mu} \right] \frac{\partial^2 \mu}{\partial h^2} + 4h \frac{\partial l}{\partial \mu} \frac{\partial \mu}{\partial h} = 0, \quad (5.88)$$

cujo limite $h \ll \{J, g, T\}$ fornece o resultado

$$\mu_2 \equiv \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial^2 \mu}{\partial h^2} = -2 \lim_{h \rightarrow 0} \frac{l(\mu)}{\partial(2A_0 + B_0)/\partial \mu} > 0. \quad (5.89)$$

Reunindo esses resultados, Eqs. (5.87) e (5.89), obtemos o limite desejado:

$$\mu \approx \mu_0 + \mu_2 h^2, \quad h \ll \{J, g, T\}, \quad (5.90)$$

onde $\mu_0 = \mu(h = 0) > \sqrt{2}J$ e $\mu_2 = \lim_{h \rightarrow 0} (\partial^2 \mu / \partial h^2) > 0$. Observamos que neste regime o potencial químico tem uma dependência parabólica com o campo magnético, conforme demonstrado na Fig. 5.3(a). Esta dependência garante a simetria do modelo em relação ao sentido favorável e oposto ao campo magnético. Lembramos ainda que no regime (E), i. e. nas ausências de flutuações térmicas e quânticas; Eq. (5.62), esta simetria foi quebrada e ressaltamos que ela é recuperada pela presença de flutuações quânticas e[ou] térmicas.

(K) $T \ll \{J, g, h\}$.

Este é o regime de baixas temperaturas do modelo esférico quântico. Considere

as seguintes derivadas das Eqs. (5.77)-(5.79):

$$\frac{\partial A_0}{\partial \mu} = -\frac{2T}{\sqrt{\mu^2 - 2J^2}} - \sum_{l=1}^{\infty} \frac{4T(2\mu + x_l^2)}{[(2\mu + x_l^2)^2 - 8J^2]^{3/2}} < 0, \quad (5.91)$$

$$\frac{\partial B_0}{\partial \mu} = -\frac{T}{2\mu^2} - \sum_{l=1}^{\infty} \frac{4T}{(2\mu + x_l^2)^2} < 0, \quad (5.92)$$

$$\frac{\partial l}{\partial \mu} = -\frac{1}{2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{(\mu + \sqrt{2}J)^3} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{(\mu - \sqrt{2}J)^3} \right], \quad (5.93)$$

onde $x_l = (2\pi Tl)g^{-1/2}$. No limite $T \ll \{J, g, h\}$ temos que $x_{l+1} - x_l = (2\pi Tl)/\sqrt{g} \rightarrow 0$ e, portanto, temos que as somas podem ser trocadas pelas seguintes integrais:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{\partial A_0}{\partial \mu} = -\frac{2\sqrt{g}}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{(2\mu + x^2)}{[(2\mu + x^2)^2 - 8J^2]^{3/2}} dx < 0, \quad \mu > \sqrt{2}J, \quad (5.94)$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{\partial B_0}{\partial \mu} = -\frac{2\sqrt{g}}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{dx}{(2\mu + x^2)^2} < 0, \quad (5.95)$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{\partial l}{\partial \mu} = -\frac{1}{2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{(\mu + \sqrt{2}J)^3} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{(\mu - \sqrt{2}J)^3} \right]. \quad (5.96)$$

A partir das Eqs. (5.77)-(5.79), podemos obter os limites assintóticos:

$$A_0 \sim \frac{\sqrt{g}}{\pi} \int_{\frac{2\pi T}{\sqrt{g}}}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{(2\mu + x^2)^2 - 8J^2}}, \quad T \rightarrow 0 \quad (5.97)$$

$$B_0 \sim \frac{\sqrt{g}}{\pi} \int_{\frac{2\pi T}{\sqrt{g}}}^{\infty} \frac{dx}{2\mu + x^2}, \quad T \rightarrow 0 \quad (5.98)$$

que fornecem os limites assintóticos para as derivadas:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{\partial A_0}{\partial T} = -\frac{1}{\sqrt{\mu^2 - 2J^2}} < 0 \quad (5.99)$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{\partial B_0}{\partial T} = -\frac{1}{\mu}. \quad (5.100)$$

Derivando a Eq. (5.76) com respeito a T e substituindo os resultados das Eqs. (5.91)-(5.93), (5.99), (5.100), obtemos:

$$\mu_{1,T} \equiv \lim_{T \rightarrow 0} \frac{\partial \mu}{\partial T} = -\lim_{g \rightarrow 0} \frac{\partial(2A_0 + B_0)/\partial T}{\partial(2A_0 + B_0 + h^2 l(\mu))/\partial \mu} < 0, \quad (5.101)$$

e portanto:

$$\mu = \mu_0 + \mu_1 T + O(T^2), \quad T \ll \{J, g, h\}, \quad \mu_{0,T} = \mu(T=0), \quad \mu_{1,T} = \lim_{T \rightarrow 0} \partial(\mu)/\partial T < 0. \quad (5.102)$$

Ressaltamos que o comportamento linear do potencial químico com a temperatura é a garantia de que o modelo obedecerá a Lei de Curie neste regime. Observamos ainda que as ausências das flutuações quânticas e campo magnético faz com que o comportamento do modelo mude drasticamente para aquele descrito pela Eq. (5.42), Fig. 5.3(b), regime (A).

(L) $g \ll \{J, T, h\}$.

Este é o regime de fracas flutuações quânticas do modelo esférico quântico. Considere os seguintes assintóticos para as Eqs. (5.77)-(5.79):

$$A_0 \sim \frac{T}{\sqrt{4\mu^2 - 8J^2}} + \frac{g}{12T}, \quad g \rightarrow 0 \quad (5.103)$$

$$B_0 \sim \frac{T}{2\mu} + \frac{g}{12T}, \quad g \rightarrow 0, \quad (5.104)$$

onde usamos o resultado: $\sum_{l=1}^{\infty} l^{-2} = \pi^2/6$. Com as Eqs. (5.103) e (5.104) obtemos as seguintes derivadas:

$$\lim_{g \rightarrow 0} \frac{\partial A_0}{\partial g} = \frac{1}{12T} > 0, \quad \lim_{g \rightarrow 0} \frac{\partial B_0}{\partial g} = \frac{1}{12T} > 0. \quad (5.105)$$

De maneira analógica podemos obter os seguintes assintóticos para as Eqs. (5.80)-(5.83):

$$\lim_{g \rightarrow 0} \frac{\partial A_0}{\partial \mu} = -\frac{4T\mu}{(4\mu^2 - 8J^2)^{3/2}} < 0 \quad (5.106)$$

$$\lim_{g \rightarrow 0} \frac{\partial B_0}{\partial \mu} = -\frac{T}{2\mu^2} < 0 \quad (5.107)$$

$$\lim_{g \rightarrow 0} \frac{\partial l}{\partial \mu} = -\frac{1}{2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{(\mu + \sqrt{2}J)^3} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{(\mu - \sqrt{2}J)^3} \right] < 0. \quad (5.108)$$

Derivando a Eq. (5.76) com respeito a g e substituindo os resultados das Eqs. (5.105)-(5.108), obtemos:

$$\mu_{1,g} \equiv \lim_{g \rightarrow 0} \frac{\partial \mu}{\partial g} = -\lim_{g \rightarrow 0} \frac{\partial(A_0 + 2B_0)/\partial g}{\partial(2A_0 + B_0 + h^2 l(\mu))/\partial \mu} > 0, \quad (5.109)$$

obtendo, assim:

$$\mu = \mu_{0,g} + \mu_{1,g}g + O(g^2), \quad g \ll \{J, T, h\}, \quad (5.110)$$

onde $\mu_{0,g} \equiv \mu(g = 0)$. Ressaltamos a mudança notável de um comportamento não-analítico, regime (C), Eq. (5.51), para o comportamento linear descrito pela Eq. (5.110). Esta mudança se torna ainda mais notável que a simples presença do campo magnético e[ou] da temperatura é capaz de fazer um comportamento do tipo singularidade essencial desaparecer em favor de um comportamento analítico.

Observamos que o potencial químico possui uma dependência complexa e similar em relação à temperatura (T) e à constante de acoplamento quântica (g) e ao campo magnético (h), conforme demonstrado pelas Eqs. (5.69), (5.75), (5.90) e (5.110) assim como pelas Figs. 5.3 e 5.4. No entanto, nas vizinhanças do ponto $g = T = h = 0$ o potencial químico possui uma dependência não-analítica com respeito a g [Eq. (5.51)] e uma dependência analítica com respeito a T e h [Eqs. (5.42) e (5.62)]. E nesta situação o modelo reage de maneira diversa com respeito a g e T . Para baixos valores do campo magnético o potencial químico tem um comportamento par em relação a h [Eq. (5.90)]. Esta simetria é quebrada para valores altos do campo magnético [Eq. (5.67)] onde o modelo atinge sua saturação magnética, conforme observamos na Fig. 5.3(a). Nas proximidades do ponto $g = T = h = 0$, temos igualmente que a simetria é quebrada para $h \ll J$ [Eq. (5.62)], indicando que o ponto $g = T = h = 0$ é o único ponto crítico do modelo.

5.3 Magnetização e Susceptibilidade

As variáveis de spin, Eq. (5.4), podem ser expressas, após as transformações de Bogoliubov, Eqs. (5.13)-(5.16), e definições auxiliares, Eqs. (5.8)-(5.12), como

segue:

$$\begin{aligned}
S_{jA} = & \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{\frac{3}{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} \left(1 + \frac{J_k}{2\mu} \right)^{-1/4} \cos(kj) (\alpha_{k+} + \alpha_{k+}^\dagger) \\
& + \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{\frac{3}{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} \left(1 - \frac{J_k}{2\mu} \right)^{-1/4} \cos(kj) (\beta_{k+} + \beta_{k+}^\dagger) \\
& + \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{\frac{3}{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} \left(1 - \frac{J_k}{2\mu} \right)^{-1/4} i \sin(kj) (\alpha_{k-} - \alpha_{k-}^\dagger) \\
& + \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{\frac{3}{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} \left(1 - \frac{J_k}{2\mu} \right)^{-1/4} i \sin(kj) (\beta_{k-} - \beta_{k-}^\dagger) \quad (5.111) \\
& + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \left(1 + \frac{J_0}{2\mu} \right)^{-1/4} (\alpha_0 + \alpha_0^\dagger) \\
& + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \left(1 - \frac{J_0}{2\mu} \right)^{-1/4} (\beta_0 + \beta_0^\dagger) \\
& + \frac{\sqrt{2}}{2} \left[\frac{h}{2(\mu + \sqrt{2}J)} - \frac{h}{2(\mu - \sqrt{2}J)} \right],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_{jB\sigma} = & \frac{\sigma}{2} \sqrt{\frac{3}{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_k \cos(kx_i) (a_{kB}^{al} + (a_{kB}^{al})^\dagger) \\
& + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_k i \sin(kx_i) (a_{kB}^{al} - (a_{kB}^{al})^\dagger) \\
& + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} \left(1 + \frac{J_k}{2\mu} \right)^{-1/4} \cos(k(j+1/2)) (\alpha_{k+} + (\alpha_{k+}^\dagger)) \\
& - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} \left(1 - \frac{J_k}{2\mu} \right)^{-1/4} \cos(k(j+1/2)) (\beta_{k+} + (\beta_{k+}^\dagger)) \\
& + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} \left(1 + \frac{J_k}{2\mu} \right)^{-1/4} i \sin(k(j+1/2)) (\alpha_{k-} - (\alpha_{k-}^\dagger)) \quad (5.112) \\
& - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{k>0} \left(1 - \frac{J_k}{2\mu} \right)^{-1/4} i \sin(k(j+1/2)) (\beta_{k-} - (\beta_{k-}^\dagger)) \\
& + \frac{\sqrt{2}}{4} \sqrt{\frac{3}{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \left(1 + \frac{J_0}{2\mu} \right)^{-1/4} (\alpha_0 + (\alpha_0)^\dagger) \\
& - \frac{\sqrt{2}}{4} \sqrt{\frac{3}{N}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \left(1 - \frac{J_0}{2\mu} \right)^{-1/4} (\beta_0 + (\beta_0)^\dagger) \\
& + \frac{1}{2} \left[\frac{h}{2(\mu + \sqrt{2}J)} + \frac{h}{2(\mu - \sqrt{2}J)} \right],
\end{aligned}$$

onde $\sigma = +1(-1)$ para sítios B_1 (B_2).

Através do uso das médias térmicas, Eqs. (5.19) e (5.20), obtemos:

$$\langle S_A \rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} \left[\frac{h(1 + \sqrt{2}/2)}{2(\mu + \sqrt{2}J)} - \frac{h(1 - \sqrt{2}/2)}{2(\mu - \sqrt{2}J)} \right], \quad (5.113)$$

$$\langle S_B \rangle = \frac{1}{2} \left[\frac{h(1 + \sqrt{2}/2)}{2(\mu + \sqrt{2}J)} + \frac{h(1 - \sqrt{2}/2)}{2(\mu - \sqrt{2}J)} \right], \quad (5.114)$$

$$M_{cell} = \left[\frac{h(1 + \sqrt{2}/2)^2}{2(\mu + \sqrt{2}J)} + \frac{h(1 - \sqrt{2}/2)^2}{2(\mu - \sqrt{2}J)} \right], \quad (5.115)$$

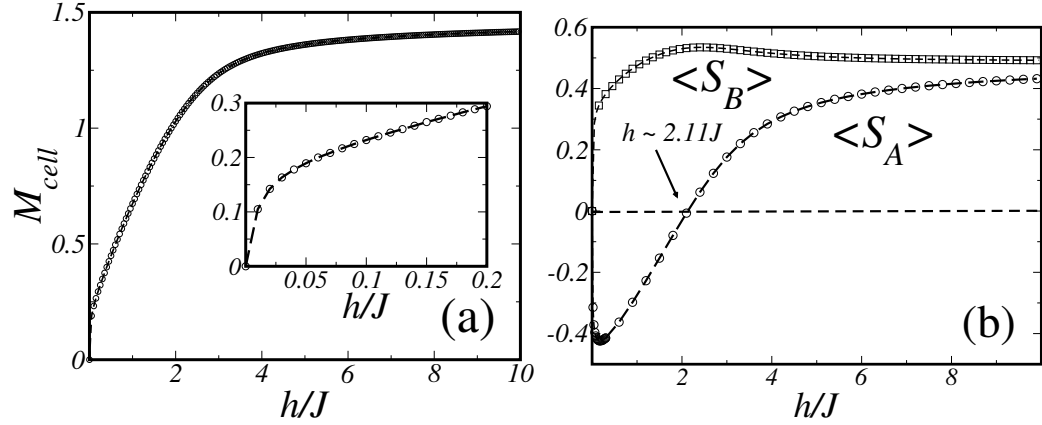


Figura 5.5: (a) Magnetização da célula e (b) spin médio nos sítios A ($-\circ-$) e $B_{1,2}$ ($-\square-$) em função de h/J , para $g = 0.05J$ and $T = 0.05J$.

onde $\langle S_A \rangle \equiv \langle S_{iA} \rangle$, $\langle S_B \rangle \equiv \langle S_{iB_{1,2}} \rangle$ e $M_{cell} = \langle S_A \rangle + 2\langle S_B \rangle$. Observamos que as Eqs. (5.113) e (5.114) possuem muitas semelhanças com o resultado obtido para a cadeia AB antiferromagnética, Eqs. (4.32) e (4.33). Em particular note que o acoplamento é modificado de $J \rightarrow \sqrt{2}J$, o campo magnético uniforme é modificado por $h \rightarrow (1 + \sqrt{2}/2)h$ e o campo *staggered* é obtido através de $h' \equiv h(1 - \sqrt{2}/2)$ e pelo acréscimo das constantes que garantem o limite correto de saturação para o modelo: $\langle S_A \rangle \sim \langle S_B \rangle \sim 1/2$.

Com o uso dos resultados obtidos para o potencial químico, podemos obter uma série de aproximações para a magnetização (M_{cell}) e para os spins médios ($\langle S_A \rangle$, $\langle S_B \rangle$). Note primeiro que $M_{cell} = \langle S_A \rangle = \langle S_B \rangle = 0$, sempre que $h = 0$ e $\mu \neq \sqrt{2}J$.

Vamos em seguida calcular alguns desses limites.

(E) $g = T = 0, h \ll J$.

Substituindo o resultado obtido para o potencial químico, Eq. (5.62), nas Eqs.

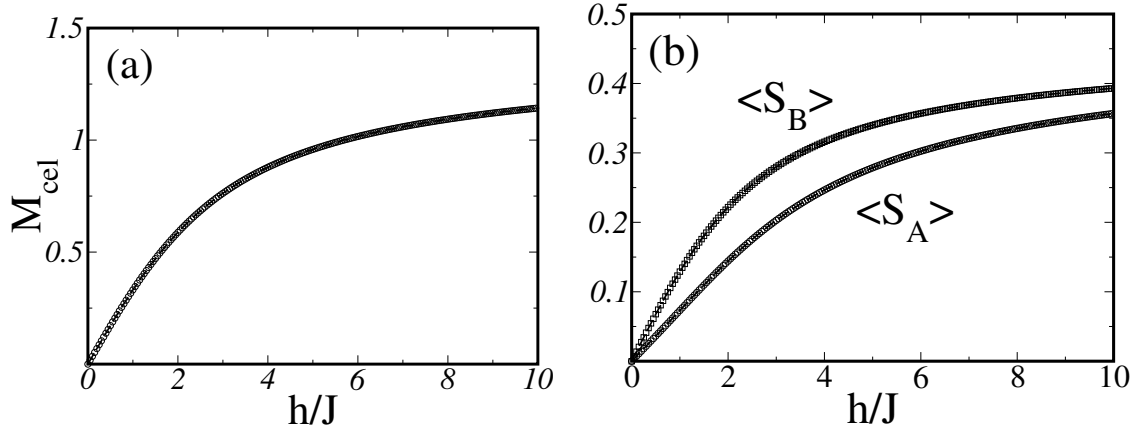


Figura 5.6: (a) Magnetização da célula para $g = T = J$ em função de h/J , para $g = T = J$. (b) Spin médio no sítio A , $\langle S_A \rangle$ ($- \bigcirc -$) e spin médio no sítio $B_{1,2}$, $\langle S_B \rangle$ ($- \square -$) em função de h/J , para $g = T = J$.

(5.113)-(5.115) para a magnetização e spins locais, obtemos os seguintes resultados:

$$\begin{aligned} \langle S_A \rangle &= -\sqrt{\frac{3}{8}} + \frac{\sqrt{2} + 2}{8}(h/J) \\ &+ \left(\frac{3(9 + 6\sqrt{2})^{3/2}}{1728} - \frac{(2 + \sqrt{2})\sqrt{9 - 6\sqrt{2}}}{24} \right) (h/J)^2 + \dots \end{aligned} \quad (5.116)$$

$$\begin{aligned} \langle S_B \rangle &= \sqrt{\frac{3}{16}} + \frac{\sqrt{2}}{16}(1 + \sqrt{2}/2)(h/J) \\ &- \left(\frac{18(1 - \sqrt{2}/2)(9 + 6\sqrt{2})^{3/2}}{1728} + \frac{(2 + \sqrt{2})\sqrt{9 - 6\sqrt{2}}}{12} \right) (h/J)^2 + \dots \end{aligned} \quad (5.117)$$

$$\begin{aligned} M_{cell} &= (\sqrt{2} - 1)\sqrt{\frac{3}{8}} + \frac{4 + 3\sqrt{2}}{16}(h/J) \\ &- \left(\frac{6(9 + 6\sqrt{2})(3/2 - \sqrt{2})}{1728\sqrt{2}} + \frac{(3/2 + \sqrt{2})\sqrt{9 - 6\sqrt{2}}}{6\sqrt{2}} \right) (h/J)^2 + \dots \end{aligned} \quad (5.118)$$

Estes resultados demonstram a quebra espontânea de simetria do modelo para o ponto $g = T = h = 0$, resultado este previsto pela dependência cúbica do potencial químico na proximidade do ponto em questão, Eq. (5.62). Esse fato ainda vai ser confirmado pelo cálculo das funções de correlação. Observamos que resultados similares foram obtidos para os valores locais de spin no limite $g = T = h = 0$ do modelo esférico quântico antiferromagnético, na presença de um campo magnético *staggered*, conforme as Eqs. (4.119) e (4.120).

(F) $g = T = 0, h \gg J$.

Substituindo o resultado para o potencial químico, Eq. (5.66), nas Eqs. (5.113)-(5.115), obtemos os seguintes resultados:

$$\langle S_A \rangle = \frac{1}{2} - \frac{J}{3h} - \frac{41J^2}{18h^2} + O(J^3/h^3) \quad (5.119)$$

$$\langle S_A \rangle = \frac{1}{2} + \frac{J}{6h} - \frac{17J^2}{18h^2} + O(J^3/h^3) \quad (5.120)$$

$$M_{cell} = \frac{3}{2} - \frac{25J^2}{6h^2} + O(J^3/h^3). \quad (5.121)$$

Estes resultados demonstram a saturação magnética do modelo neste regime. Este comportamento é esperado pela dependência linear do potencial químico neste regime, Eq. (5.66).

(G) $h \gg \{J, g, T\}$.

Substituindo o resultado para o potencial químico, Eq. (5.67) nas Eqs. (5.113)-

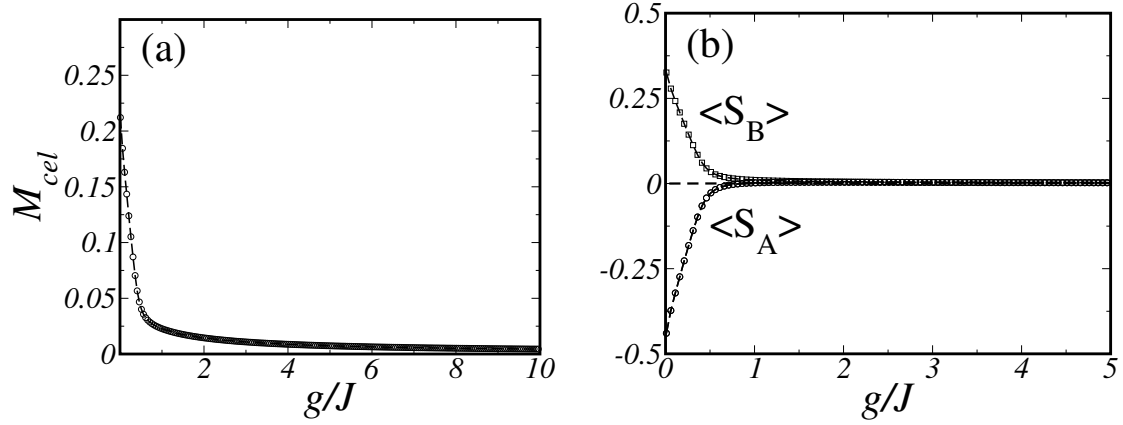


Figura 5.7: (a) Magnetização da célula em função de g/J para $T = h = 0.05J$. (b) Spin médio em um sítio A $\langle S_B \rangle$ (— $\square$ —), spin médio em um sítio $B_{1,2}$ em função de g/J $\langle S_A \rangle$, para $T = h = 0.05J$.

(5.115) , obtemos os seguintes resultados para a magnetização e spins locais:

$$\langle S_A \rangle = \frac{1}{2} - \frac{J}{3h} - \frac{41J^2}{18h^2} + O(J^3/h^3) \quad (5.122)$$

$$\langle S_A \rangle = \frac{1}{2} + \frac{J}{6h} - \frac{17J^2}{18h^2} + O(J^3/h^3) \quad (5.123)$$

$$M_{cell} = \frac{3}{2} - \frac{25J^2}{6h^2} + O(J^3/h^3). \quad (5.124)$$

Notamos que obtivemos a mesma saturação magnética obtida no regime (F), resultado esperado devido a igualdade entre as Eqs. (5.66) e (5.67). Essa saturação está demonstrada na Fig. 5.6.

(H) $T \gg \{J, g, h\}$.

Através do uso da Eq. (5.69) para o potencial químico, obtemos os seguintes resultados:

$$\langle S_A \rangle \sim \frac{h}{4T}, \quad \langle S_B \rangle \sim \frac{h}{4T}, \quad M_{cell} \sim \frac{3h}{4T}. \quad (5.125)$$

Estes resultados demonstram a validade da Lei de Curie para o modelo esférico quântico. Lembrando ainda que a origem matemática deste resultado reside na dependência linear do potencial químico neste regime, Eq. (5.69).

(I) $g \gg \{J, T, h\}$.

Utilizando a Eq. (5.75) para o potencial químico, obtemos os seguintes resultados para a magnetização e valores médios de spin:

$$\langle S_A \rangle \sim \frac{h}{4g}, \langle S_B \rangle \sim \frac{h}{4g}, M_{cell} \sim \frac{3h}{4g}. \quad (5.126)$$

De forma análoga ao regime (H), observamos que o modelo obedece a uma Lei de Curie quântica, através da substituição de T por g na Eq. (5.125). Esse comportamento está também ilustrado na Fig. 5.7.

(J) $h \ll \{J, g, T\}$.

Com o uso da Eq. (5.90) para o potencial químico podemos obter as seguintes

equações:

$$\begin{aligned}\langle S_A \rangle &= \frac{\sqrt{2}}{4} \left[\frac{1 + \sqrt{2}/2}{\mu_0 + \sqrt{2}J} - \frac{1 - \sqrt{2}/2}{\mu_0 - \sqrt{2}J} \right] h \\ &- \frac{\sqrt{2}}{4} \left[\frac{1 + \sqrt{2}/2}{(\mu_0 + \sqrt{2}J)^2} - \frac{1 - \sqrt{2}/2}{(\mu_0 - \sqrt{2}J)^2} \right] \mu_2 h^3\end{aligned}\quad (5.127)$$

$$\begin{aligned}\langle S_B \rangle &= \frac{1}{4} \left[\frac{1 + \sqrt{2}/2}{\mu_0 + \sqrt{2}J} + \frac{1 - \sqrt{2}/2}{\mu_0 - \sqrt{2}J} \right] h \\ &- \frac{1}{4} \left[\frac{1 + \sqrt{2}/2}{(\mu_0 + \sqrt{2}J)^2} + \frac{1 - \sqrt{2}/2}{(\mu_0 - \sqrt{2}J)^2} \right] \mu_2 h^3\end{aligned}\quad (5.128)$$

$$\begin{aligned}M_{cell} &= \frac{1}{2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{\mu_0 + \sqrt{2}J} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{\mu_0 - \sqrt{2}J} \right] h \\ &- \frac{1}{4} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{(\mu_0 + \sqrt{2}J)^2} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{(\mu_0 - \sqrt{2}J)^2} \right] \mu_2 h^3.\end{aligned}\quad (5.129)$$

Neste regime de campo magnético baixo observamos uma dependência ímpar da magnetização com o campo. Esse comportamento indica a presença da simetria neste regime, conforme demonstrado na Fig. 5.6. Ressaltamos ainda que o modelo quebra a simetria apenas nas proximidades do ponto $g = T = h = 0$, Eqs. (5.116)-(5.118).

(K) $T \ll \{J, g, h\}$.

Com o auxílio da Eq. (5.102) para o potencial químico podemos obter os seguintes

resultados para a magnetização e spins locais:

$$\begin{aligned}\langle S_A \rangle &= \frac{\sqrt{2}}{4} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)h}{\mu_{0,T} + \sqrt{2}J} - \frac{(1 - \sqrt{2}/2)h}{\mu_{0,T} - \sqrt{2}J} \right] \\ &- \frac{\sqrt{2}}{4} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)h}{(\mu_{0,T} + \sqrt{2}J)^2} - \frac{(1 - \sqrt{2}/2)h}{(\mu_{0,T} - \sqrt{2}J)^2} \right] \mu_{1,T}T\end{aligned}\quad (5.130)$$

$$\begin{aligned}\langle S_B \rangle &= \frac{1}{4} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)h}{\mu_{0,T} + \sqrt{2}J} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)h}{\mu_{0,T} - \sqrt{2}J} \right] \\ &- \frac{1}{4} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)h}{(\mu_{0,T} + \sqrt{2}J)^2} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)h}{(\mu_{0,T} - \sqrt{2}J)^2} \right] \mu_{1,T}T\end{aligned}\quad (5.131)$$

$$\begin{aligned}M_{cell} &= \frac{1}{2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2 h}{\mu_{0,T} + \sqrt{2}J} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2 h}{\mu_{0,T} - \sqrt{2}J} \right] \\ &- \frac{1}{2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2 h}{(\mu_{0,T} + \sqrt{2}J)^2} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2 h}{(\mu_{0,T} - \sqrt{2}J)^2} \right] \mu_{1,T}T,\end{aligned}\quad (5.132)$$

onde $\mu_{0,T}$, $\mu_{1,T}$ está definido na Eq. (5.102).

(L) $g \ll \{J, T, h\}$.

Substituindo o resultado para o potencial químico, Eq. (5.110) nas Eqs. (5.113)-

(5.115), obtemos as seguintes aproximações para a magnetização e spins locais:

$$\begin{aligned}\langle S_A \rangle &= \frac{\sqrt{2}}{4} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)h}{\mu_{0,g} + \sqrt{2}J} - \frac{(1 - \sqrt{2}/2)h}{\mu_{0,g} - \sqrt{2}J} \right] \\ &- \frac{\sqrt{2}}{4} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)h}{(\mu_{0,g} + \sqrt{2}J)^2} - \frac{(1 - \sqrt{2}/2)h}{(\mu_{0,g} - \sqrt{2}J)^2} \right] \mu_{1,g}g\end{aligned}\quad (5.133)$$

$$\begin{aligned}\langle S_B \rangle &= \frac{1}{4} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)h}{\mu_{0,g} + \sqrt{2}J} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)h}{\mu_{0,g} - \sqrt{2}J} \right] \\ &- \frac{1}{4} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)h}{(\mu_{0,g} + \sqrt{2}J)^2} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)h}{(\mu_{0,g} - \sqrt{2}J)^2} \right] \mu_{1,g}g\end{aligned}\quad (5.134)$$

$$\begin{aligned}M_{cell} &= \frac{1}{2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2 h}{\mu_{0,g} + \sqrt{2}J} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2 h}{\mu_{0,g} - \sqrt{2}J} \right] \\ &- \frac{1}{2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2 h}{(\mu_{0,g} + \sqrt{2}J)^2} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2 h}{(\mu_{0,g} - \sqrt{2}J)^2} \right] \mu_{1,g}g,\end{aligned}\quad (5.135)$$

onde $\mu_{0,g}$ e $\mu_{1,g}$ está definido na Eq. (5.110).

Primeiro observamos que apesar da magnetização da célula (M_{cell}) apresentar um comportamento paramagnético quântico para quaisquer g e T finitos [observe a Fig. (5.5)(a)], os spins médios nos sítios A e B podem ter orientações diferentes quando o valor de μ é modificado pela restrição esférica Eq. (5.30), como demonstrado na Fig.(5.5)(b). Sendo assim, para certas regiões do espaço de parâmetros $\{g, T, h\}$, com h finito, os spins médios na subrede A apontam em uma direção oposta ao dos sítios nas subredes $B_{1,2}$, desta forma permitindo um ferrimagnetismo de curto alcance induzido pelo campo magnético [Fig. 5.5(b)] e um crescimento rápido de M_{cell} para campos magnéticos baixos [Fig. (5.5)(a)]. Esta ordem de curto alcance, devida às interações antiferromagnéticas e à topologia AB_2 , é aniquilada para valores grandes de g , T ou h , e em seu lugar temos uma ordem paramagnética usual, conforme

demonstrado nas Figs. 5.6 e 5.7. Desta forma, quando o campo magnético cresce o spin médio $\langle S_A \rangle$ passa a crescer após atingir o seu mínimo, conforme demonstrado na Fig. 5.5(b). Observamos que o valor para o qual $\langle S_A \rangle$ muda de sinal é compatível em magnitude com os valores onde o spin médio em uma subrede A troca de sinal nos modelos de Ising, Heisenberg quântico e clássico na cadeia AB_2 [24, 26]. A superfície que separa as regiões $\langle S_A \rangle > 0$ e $\langle S_A \rangle < 0$ ($\langle S_B \rangle > 0$ e $h \neq 0$ em ambos os casos) é obtida através das Eqs. (5.30) e (5.113) no caso especial em que $\langle S_A \rangle = 0$, ou seja, $\mu = 2J$:

$$2A_0 \left(\frac{4J}{T}, \frac{2\sqrt{2}J}{T}, \frac{g}{4T} \right) + B_0 \left(\frac{4J}{T}, \frac{g}{4T} \right) + \frac{h^2}{4J^2} \frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{(2 + \sqrt{2})^2} + \frac{h^2}{4J^2} \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{(2 - \sqrt{2})^2} = \frac{3}{4}, \quad (5.136)$$

já que podemos reescrever a Eq. (5.113) como $\langle S_A \rangle = [(\mu - 2J)h]/[2(\mu^2 - 2J^2)]$. Utilizando as Eqs. (5.35)-(5.37) podemos obter os seguintes casos limites da Eq.(5.136):

$$\frac{h^2}{8J^2} + \frac{(1 + 2\sqrt{2})T}{4J} = \frac{3}{4}, \quad g = 0, \quad (5.137)$$

e

$$\left[\frac{K \left(\sqrt{2\sqrt{2}/(2 + \sqrt{2})} \right)}{2 + \sqrt{2}} + 1/4 \right] \sqrt{g/J} + h^2/(8J^2) = 3/4, \quad T = 0. \quad (5.138)$$

Por outro lado, depois que o máximo em $\langle S_B \rangle$ é atingido, $\langle S_A \rangle = \langle S_B \rangle \rightarrow 1/2$ e $M_{cell} \rightarrow 3/2$ no limite de saturação do modelo, $(h/J) \rightarrow \infty$, conforme demonstrado na Fig. 5.5. Observamos ainda que um máximo em $\langle S_B \rangle$ não é incompatível com

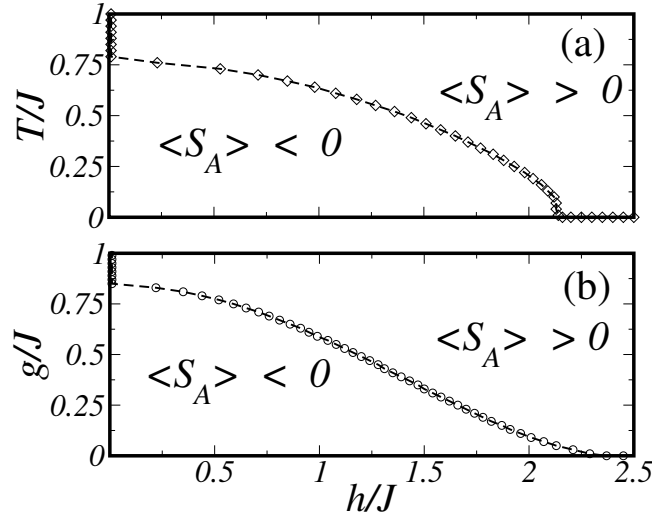


Figura 5.8: Diagramas de fase da superfície $\langle S_A \rangle = 0$ que delimita a mudança de sinal nos sítios A (para $\mu = 2J$) : (a) T/J em função de h/J para $g = 0.05J$ e (b) g/J em função de h/J para $T = 0.05J$.

o modelo esférico, já que a restrição esférica, Eq. (5.3), limita a *soma* de todos os valores médios $\langle S_{i\alpha}^2 \rangle$. Desta forma, os valores médios locais de spin podem variar continuamente e sem limites superiores ou inferiores; sendo assim, é possível encontrar soluções com $\langle S_B^2 \rangle > 1/4$, desde que $\langle S_A^2 \rangle < 1$ de maneira tal que a equação Eq. (5.3) seja satisfeita.

Os diagramas de fase da Fig. (5.8) mostram que o comportamento em $h = 0$ é determinado pela existência ou não de um zero em $\langle S_A \rangle$ com h finito, conforme demonstrado na Fig. 5.5(b). No limite de desordem térmica (quântica) intensa, Fig. 5.8(a) [5.8(b)], o ferrimagnetismo de curto alcance induzido pelo campo, com $\langle S_A \rangle < 0$ e $\langle S_B \rangle > 0$, se torna instável. Sendo assim, o modelo apresenta um comportamento paramagnético desordenado usual, com $\langle S_A \rangle > 0$, $\langle S_B \rangle > 0$ e desaparecimento do zero em $\langle S_A \rangle$ para h finito.

Outro ponto importante é que as Eqs. (5.113)-(5.115) apresentam pólos apenas

em $\mu = -\sqrt{2}J$ e $\mu = \sqrt{2}J$; o primeiro não é físico, pois permite a existência de uma frequência imaginária e o segundo acontece apenas quando $g = T = h = 0$. Soluções não triviais da Eq. (5.30) ocorrem somente para $\mu > \sqrt{2}J$. Isto indica que o modelo esférico quântico na cadeia AB_2 a campo magnético nulo não permite uma quebra espontânea de simetria térmica ($T \neq 0$) ou quântica ($g \neq 0$), de um estado paramagnético para um ferrimagnético. Além disso, utilizando as Eqs. (5.116)-(5.118) no caso $g = T = h = 0$, os spins médios e a magnetização assumem os seguintes valores:

$$\langle S_A \rangle = -\sqrt{\frac{3}{8}}, \quad \langle S_B \rangle = \sqrt{\frac{3}{16}}, \quad M_{cell} = (\sqrt{2} - 1)\sqrt{\frac{3}{8}}, \quad (5.139)$$

de tal forma que o spin médio de uma célula unitária é menor que $1/2$. Observamos que o modelo de Hubbard na cadeia AB_2 , assim como o seu limite para forte acoplamento em banda semi-cheia, o modelo de Heisenberg quântico antiferromagnético na cadeia AB_2 , apresentam estado fundamental a campo magnético nulo ferrimagnético com spin médio de uma célula $M_{cell} = 1/2$, devido a um teorema de Lieb [24,25,47].

5.3.1 Susceptibilidade

Derivando as Eqs. (5.113)-(5.115) em relação a h , podemos obter a susceptibilidade dos sítios nas subredes A (χ_A), $B_{1,2}$ (χ_B) e da célula (χ_{cel}):

$$\begin{aligned}\chi_A &= \frac{1}{4J} \left[\frac{1 + \sqrt{2}/2}{\mu/(\sqrt{2}J) + 1} - \frac{1 - \sqrt{2}/2}{\mu/(\sqrt{2}J) - 1} \right] \\ &\quad - \frac{\sqrt{2}h}{8J^2} \left(\frac{\partial \mu}{\partial h} \right) \left[\frac{1 + \sqrt{2}/2}{(\mu/(\sqrt{2}J) + 1)^2} - \frac{1 - \sqrt{2}/2}{(\mu/(\sqrt{2}J) - 1)^2} \right],\end{aligned}\quad (5.140)$$

$$\begin{aligned}\chi_B &= \frac{\sqrt{2}}{8J} \left[\frac{1 + \sqrt{2}/2}{\mu/(\sqrt{2}J) + 1} + \frac{1 - \sqrt{2}/2}{\mu/(\sqrt{2}J) - 1} \right] \\ &\quad - \frac{h}{8J^2} \left(\frac{\partial \mu}{\partial h} \right) \left[\frac{1 + \sqrt{2}/2}{(\mu/(\sqrt{2}J) + 1)^2} + \frac{1 - \sqrt{2}/2}{(\mu/(\sqrt{2}J) - 1)^2} \right],\end{aligned}\quad (5.141)$$

$$\begin{aligned}\chi_{cel} &= \frac{\sqrt{2}}{4J} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{\mu/(\sqrt{2}J) + 1} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{\mu/(\sqrt{2}J) - 1} \right] \\ &\quad - \frac{h}{4J^2} \left(\frac{\partial \mu}{\partial h} \right) \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{(\mu/(\sqrt{2}J) + 1)^2} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{(\mu/(\sqrt{2}J) - 1)^2} \right].\end{aligned}\quad (5.142)$$

(A) $g = h = 0, T \ll J$.

Substituindo a Eq. (5.42) para o potencial químico nas Eqs. (5.141)-(5.142) para as susceptibilidades nos sítios A e $B_{1,2}$ e da célula, obtemos:

$$\chi_A = -\frac{9(2 - \sqrt{2})}{32}(J/T^2) + \frac{3(\sqrt{2} - 1)}{8}(1/T) + \dots \quad (5.143)$$

$$\chi_B = \frac{9(\sqrt{2} - 1)}{32}(J/T^2) - \frac{3\sqrt{2}(\sqrt{2} - 1)}{16}(1/T) + \frac{(6 - \sqrt{2})\sqrt{2}}{16} + \dots \quad (5.144)$$

$$\chi_{cell} = \frac{27\sqrt{2} - 36}{32}(1/T^2) + \frac{6\sqrt{2} - 3}{8}(1/T) + \frac{22\sqrt{2} - 10}{16}. \quad (5.145)$$

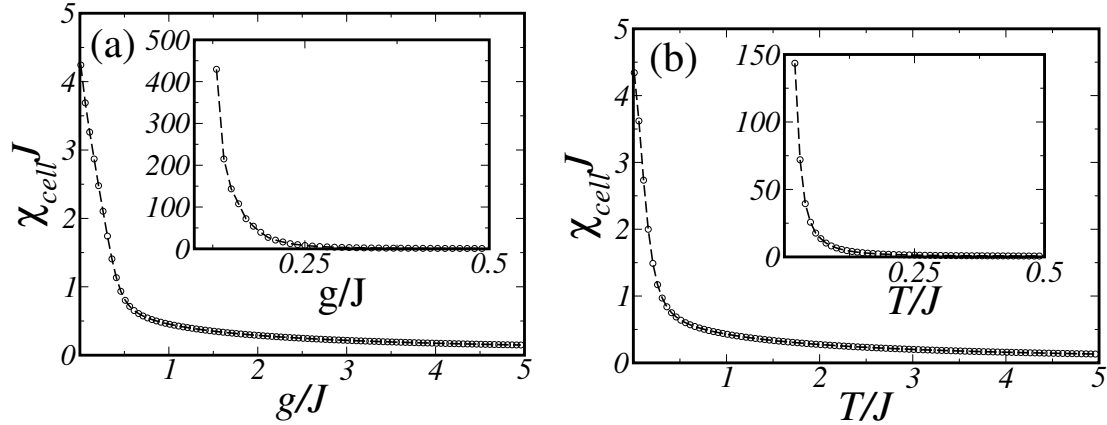


Figura 5.9: (a) Susceptibilidade da célula em função de g/J , para $T = h = 0.05J$ e para $T = h = 0$ no gráfico inscrito. (b) Susceptibilidade da célula em função de T/J , para $g = h = 0.05J$ e para $g = h = 0$ no gráfico inscrito.

Este regime está ilustrado no gráfico inscrito da Fig. 5.9(b). Observamos que um resultado similar foi obtido para a susceptibilidade *staggered* no modelo esférico quântico antiferromagnético na cadeia AB , no limite $T \ll J$, $g = h = h' = 0$, conforme descrito pela Eq. (4.112).

(B) $g = h = 0$, $T \gg J$.

Através do uso da Eq. (5.46) para o potencial químico podemos obter os seguintes resultados:

$$\chi_A = 1/(4T) + \sqrt{2}J/(8T^2) + J^2/(12T^3) + \dots \quad (5.146)$$

$$\chi_B = 1/(4T) - J/(8T^2) + J^2/(12T^3) + \dots \quad (5.147)$$

$$\chi_{cell} = 3/(4T) + (\sqrt{2} + 2)J/(8T^2) + J^2/(4T^3) + \dots \quad (5.148)$$

Observamos que o resultado obtido na Eq. (5.42) é a origem matemática do comportamento do tipo Lei de Curie do modelo esférico clássico neste regime. Ressaltamos

ainda que este comportamento está ilustrado no gráfico inscrito da Fig. 5.9(b).

(C) $T = h = 0, g \ll J$.

Substituindo a Eq. (5.51) nas Eqs. (5.141)-(5.142), obtemos os seguintes assintóticos:

$$\chi_A \sim -\frac{1}{256}(1 - \sqrt{2}/2) \exp \left[\frac{3\pi}{2} \sqrt{(\sqrt{2}J)/g} \right] \quad (5.149)$$

$$\chi_B \sim \frac{\sqrt{2} - 1}{512} \exp \left[\frac{3\pi}{2} \sqrt{(\sqrt{2}J)/g} \right] \quad (5.150)$$

$$\chi_{cell} \sim \frac{3(\sqrt{2} - 1)}{512} \exp \left[\frac{3\pi}{2} \sqrt{(\sqrt{2}J)/g} \right]. \quad (5.151)$$

Observamos que este regime está ilustrado no gráfico inscrito da Fig. 5.9(a). Ressaltamos ainda que uma singularidade essencial na susceptibilidade *staggered* também foi obtida no modelo esférico quântico na cadeia AB no limite $T = h = h' = 0, g \ll J$, conforme descrito pela Eq. (4.99). O sinal negativo em χ_A é um indicativo de que a ordem de longo alcance no ponto $g = T = h = 0$ é ferrimagnética com $\langle S_A \rangle$ apontando em uma direção oposta a $\langle S_B \rangle$.

(D) $T = h = 0, g \gg J$.

Com o uso da Eq. (5.57) para o potencial químico e das Eqs. (5.141)-(5.142), obtemos os seguintes resultados para as susceptibilidades locais e da célula:

$$\chi_A = 1/(4g) - J/(4g^2) + 3J^2/(4g^3) + \dots \quad (5.152)$$

$$\chi_B = 1/(4g) - \sqrt{2}J/(8g^2) + 3J^2/(32g^3) + \dots \quad (5.153)$$

$$\chi_{cell} = 3/(4g) - \frac{2 + \sqrt{2}}{4}(J/g^2) + 15J^2/(16g^3) + \dots \quad (5.154)$$

Salientamos que um resultado semelhante foi obtido no regime (B), indicando que o modelo obedece a um paramagnetismo quântico do tipo lei de Curie. Este regime

está ilustrado no gráfico inscrito da Fig. 5.9(a).

(E) $g = T = 0, h \ll J$.

Utilizando a Eq. (5.62) e as Eqs. (5.141)-(5.142), obtemos os resultados:

$$\begin{aligned}\chi_A &= -\frac{1-\sqrt{2}/2}{6} \left(12\sqrt{9+6\sqrt{2}} - (9+6\sqrt{2})\sqrt{9-6\sqrt{2}} \right) (1/h) + (1+\sqrt{2}/2)/(8J) \\ &- \frac{1-\sqrt{2}/2}{3} \left(3(9+6\sqrt{2})^{3/2} + (153+108\sqrt{2})\sqrt{9-6\sqrt{2}} \right) (h/J^2) + \dots \quad (5.155)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\chi_B &= \frac{(2-\sqrt{2})\sqrt{9+6\sqrt{2}}}{24} \left(24 - \sqrt{18-12\sqrt{2}} \right) (1/h) + (1+\sqrt{2})/(16J) \\ &+ \left[\frac{\sqrt{2}-1}{6} \sqrt{9-6\sqrt{2}}(153+108\sqrt{2}) - 9(2-\sqrt{2})(9+6\sqrt{2})^{3/2} \right. \\ &- \left. \frac{1+\sqrt{2}}{192} \sqrt{9-6\sqrt{2}} \right] (h/J^2) + \dots \quad (5.156)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\chi_{cell} &= \frac{2-\sqrt{2}}{12} \left(16 - \sqrt{18-12\sqrt{2}} \right) \left(\sqrt{9+6\sqrt{2}} \right) (1/h) + (4+3\sqrt{2})/(16J) \\ &+ \left\{ \frac{\sqrt{2}-1}{3} \left[(153+108\sqrt{2}) \left(\sqrt{9-6\sqrt{2}} \right) - 18 \right] (2-\sqrt{2})(9+6\sqrt{2})^{3/2} \right. \\ &- \frac{1+\sqrt{2}}{96} \sqrt{9-6\sqrt{2}} - (1/2)[90+63\sqrt{2}]\sqrt{9-6\sqrt{2}} \\ &- \left. \frac{6-3\sqrt{2}}{2} \sqrt{9+6\sqrt{2}} \right\} (h/J^2) + \dots \quad (5.157)\end{aligned}$$

Este resultado está ilustrado no gráfico inscrito da Fig. 5.10.

(F) $g = T = 0, h \gg J$.

Substituindo o resultado, Eq. (5.66), nas Eqs. (5.141)-(5.142), obtemos os

seguintes resultados para as susceptibilidades locais e da célula:

$$\chi_A = J/(3h^2) + 41J^2/(9h^3) + \dots \quad (5.158)$$

$$\chi_B = -J/(6h^2) + 17J^2/(9h^3) + \dots \quad (5.159)$$

$$\chi_{cell} = 25J^2/(3h^3). \quad (5.160)$$

Este resultado está ilustrado no gráfico inscrito da Fig. 5.10.

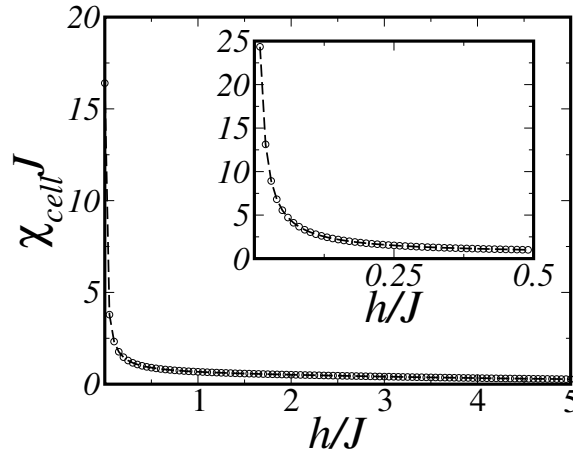


Figura 5.10: Susceptibilidade da célula em função de h/J , para $g = T = 0.05J$ e para $g = T = 0$ no gráfico inscrito.

(G) $h \gg \{J, g, T\}$.

Substituindo a Eq. (5.67), nas Eqs. (5.141)-(5.142), obtemos os resultados:

$$\chi_A = J/(3h^2) + 41J^2/(9h^3) + \dots \quad (5.161)$$

$$\chi_B = -J/(6h^2) + 17J^2/(9h^3) + \dots \quad (5.162)$$

$$\chi_{cell} = 25J^2/(3h^3). \quad (5.163)$$

Salientamos que o mesmo resultado foi obtido no regime (F) devido à forma idêntica do potencial químico neste regime, como está ilustrado na Fig. 5.10.

(H) $T \gg \{J, g, h\}$.

Com o uso da Eq. (5.69) para o potencial químico e das Eqs. (5.141)-(5.142) para a susceptibilidade da célula, podemos obter os seguintes assintóticos:

$$\chi_A \sim 1/(4T), \quad \chi_B \sim 1/(4T), \quad \chi_{cell} \sim 3/(4T). \quad (5.164)$$

Este comportamento do tipo Lei de Curie está ilustrado na Fig. 5.9(b).

(I) $g \gg \{J, T, h\}$.

Utilizando a Eq. (5.75) para o potencial químico, podemos obter os seguintes assintóticos:

$$\chi_A \sim 1/(4g), \quad \chi_B \sim 1/(4g), \quad \chi_{cell} \sim 3/(4g). \quad (5.165)$$

Esta Lei de Curie quântica está ilustrada na Fig. 5.9(a).

(J) $h \ll \{J, g, T\}$.

Através da substituição da Eq. (5.90) para o potencial químico nas Eqs. (5.141)-(5.142), obtemos as seguintes aproximações para a susceptibilidade da célula e para as susceptibilidades locais:

$$\begin{aligned} \chi_A &= \frac{1}{4J} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{\mu_0/(\sqrt{2}J) + 1} - \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{\mu_0/(\sqrt{2}J) - 1} \right] \\ &\quad - \frac{3\sqrt{2}}{8J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{(\mu_0/(\sqrt{2}J) + 1)^2} - \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{(\mu_0/(\sqrt{2}J) - 1)^2} \right] \mu_2 h^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\chi_B &= \frac{\sqrt{2}}{8J} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{\mu_0/(\sqrt{2}J) + 1} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{\mu_0/(\sqrt{2}J) - 1} \right] \\
&\quad - \frac{3}{8J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{(\mu_0/(\sqrt{2}J) + 1)^2} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{(\mu_0/(\sqrt{2}J) - 1)^2} \right] \mu_2 h^2 \\
\chi_{cell} &= \frac{\sqrt{2}}{4J} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{\mu_0/(\sqrt{2}J) + 1} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{\mu_0/(\sqrt{2}J) - 1} \right] \\
&\quad - \frac{3}{4J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{(\mu_0/(\sqrt{2}J) + 1)^2} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{(\mu_0/(\sqrt{2}J) - 1)^2} \right] \mu_2 h^2, \quad (5.166)
\end{aligned}$$

onde μ_2 está definido na Eq. (5.89). Ressaltamos que a presença das flutuações térmicas e[ou] quânticas faz a susceptibilidade atingir um máximo finito, invés da divergência obtida no regime (E). Este comportamento está ilustrado na Fig. 5.10. (K) $T \ll \{J, g, h\}$.

Utilizando a Eq. (5.102) para o potencial químico, podemos obter os seguintes resultados para as susceptibilidades locais e da célula:

$$\begin{aligned}
\chi_A &= \left\{ \frac{1}{4J} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) + 1} - \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) - 1} \right] \right. \\
&\quad - \frac{\sqrt{2}}{8J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) + 1)^2} - \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) - 1)^2} \right] h\mu'_{0,T} \Big\} \\
&\quad - \left\{ \frac{\sqrt{2}}{8J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) + 1)^2} - \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) - 1)^2} \right] (1 + h\mu'_{1,T}) \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{4J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) + 1)^3} - \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) - 1)^3} \right] h\mu'_{0,T} \right\} T + \dots,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\chi_B &= \left\{ \frac{\sqrt{2}}{8J} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) + 1} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) - 1} \right] \right. \\
&- \frac{1}{8J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) + 1)^2} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) - 1)^2} \right] h\mu'_{0,T} \Big\} \\
&- \left\{ \frac{1}{8J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) + 1)^2} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) - 1)^2} \right] (1 + h\mu'_{1,T}) \right. \\
&- \frac{\sqrt{2}}{8J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) + 1)^3} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) - 1)^3} \right] h\mu'_{0,T} \Big\} T + \dots, \\
\\
\chi_{cell} &= \left\{ \frac{\sqrt{2}}{4J} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) + 1} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) - 1} \right] \right. \\
&- \frac{1}{4J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{(\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) + 1)^2} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{(\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) - 1)^2} \right] h\mu'_{0,T} \Big\} \\
&- \left\{ \frac{1}{4J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{(\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) + 1)^2} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{(\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) - 1)^2} \right] (1 + h\mu'_{1,T}) \right. \\
&- \frac{\sqrt{2}}{4J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{(\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) + 1)^3} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{(\mu_{0,T}/(\sqrt{2}J) - 1)^3} \right] h\mu'_{0,T} \Big\} T + \dots. \quad (5.167)
\end{aligned}$$

onde $\mu'_{0,T} = \partial(\mu_{0,T})/\partial h$ e $\mu'_{1,T} = \partial(\mu_{1,T})/\partial(h)$. Observamos ainda que a presença do campo magnético e[ou] da flutuação quântica faz com que a susceptibilidade atinja um máximo finito, ao invés da divergência obtida no regime (A). Este comportamento está ilustrado na Fig. 5.9(b).

(L) $g \ll \{J, T, h\}$.

Utilizando as Eqs. (5.141)-(5.142) combinadas com a Eq. (5.110), obtemos as

seguintes aproximações para as susceptibilidades locais e da célula:

$$\begin{aligned}\chi_A = & \left\{ \frac{1}{4J} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) + 1} - \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) - 1} \right] \right. \\ & - \frac{\sqrt{2}}{8J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) + 1)^2} - \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) - 1)^2} \right] h\mu'_{0,g} \Big\} \\ & - \left\{ \frac{\sqrt{2}}{8J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) + 1)^2} - \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) - 1)^2} \right] (1 + h\mu'_{1,g}) \right. \\ & \left. - \frac{1}{4J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) + 1)^3} - \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) - 1)^3} \right] h\mu'_{0,g} \right\} g + \dots,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\chi_B = & \left\{ \frac{\sqrt{2}}{8J} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) + 1} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) - 1} \right] \right. \\ & \left. - \frac{1}{8J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) + 1)^2} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) - 1)^2} \right] h\mu'_{0,g} \right\} \\ & - \left\{ \frac{1}{8J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) + 1)^2} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) - 1)^2} \right] (1 + h\mu'_{1,g}) \right. \\ & \left. - \frac{\sqrt{2}}{8J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) + 1)^3} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)}{(\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) - 1)^3} \right] h\mu'_{0,g} \right\} g + \dots,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{cell} = & \left\{ \frac{\sqrt{2}}{4J} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) + 1} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) - 1} \right] \right. \\
& - \left. \frac{1}{4J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{(\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) + 1)^2} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{(\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) - 1)^2} \right] h\mu'_{0,g} \right\} \\
& - \left\{ \frac{1}{4J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{(\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) + 1)^2} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{(\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) - 1)^2} \right] (1 + h\mu'_{1,g}) \right. \\
& - \left. \frac{\sqrt{2}}{4J^2} \left[\frac{(1 + \sqrt{2}/2)^2}{(\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) + 1)^3} + \frac{(1 - \sqrt{2}/2)^2}{(\mu_{0,g}/(\sqrt{2}J) - 1)^3} \right] h\mu'_{0,g} \right\} g + \dots, \quad (5.168)
\end{aligned}$$

onde $\mu'_{0,g} = \partial(\mu_{0,g})/\partial h$ e $\mu'_{1,g} = \partial(\mu_{1,g})/\partial(h)$.

Observamos na Eq. (5.151) a presença de uma divergência não-analítica em χ_{cell} devido às flutuações quânticas quando $g/J \rightarrow 0$ com $T = h = 0$ [veja o gráfico inscrito na Fig. 5.9(a)]. Neste caso a presença de flutuações térmicas e/ou do campo magnético faz com que χ_{cell} atinja um máximo finito, conforme demonstrado na Eq. (5.168) e na Fig. 5.9(a). Um máximo finito parecido em χ_{cell} é induzido pela presença de flutuações térmicas e/ou quânticas no regime descrito pela Eq. (5.157), conforme resultado obtido na Eq. (5.166) e demonstrado na Fig. 5.10. De maneira análoga, um máximo finito em χ_{cell} é induzido pela presença de flutuações quânticas e/ou do campo magnético no regime descrito pela Eq. (5.145), conforme resultado obtido na Eq. (5.167) e demonstrado na Fig. 5.9(b). Esta análise confirma que a presença do campo magnético, flutuações quânticas e térmicas destroem a ordem ferrimagnética de longo alcance, e em seu lugar aparece uma ordem ferrimagnética de curto alcance, caracterizada por valores grandes, mas finitos, de χ_{cell} e por um crescimento rápido de M_{cell} para campos magnéticos baixos, conforme descrito pela Eq. (5.166) e demon-

strando no gráfico inscrito na Fig. (5.5)(a). Ressaltamos que a lei de potência T^{-2} , na susceptibilidade, quando $T/J \rightarrow 0$ para $g = h = 0$, descrita pela Eq. (5.167); também se faz presente nos modelos esféricos clássicos [1, 13] e quânticos [17] na cadeia linear, modelo de Heisenberg ferromagnético clássico [48] e quântico [49] na cadeia linear, assim como nos modelos Heisenberg anti-ferromagnéticos quântico e clássico [25, 26] na cadeia AB_2 .

Por outro lado, o comportamento paramagnético usual é obtido pelo regime descrito nas Eqs. (5.163)-(5.165), onde a típica Lei de Curie é obtida tanto considerando as flutuações térmicas quanto quânticas.

5.4 Funções de Correlação

Usando as Eqs. (5.19),(5.20) e (5.111), podemos obter o cumulante entre spins nos sítios A e nas células i e j :

$$\langle S_{iA} S_{jA} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jA} \rangle = \frac{1}{2} \sum_k \left\{ \frac{g}{2\omega_{k,+}} \coth \left[\frac{1}{2} \beta \omega_{k,+} \right] + \frac{g}{2\omega_{k,-}} \coth \left[\frac{1}{2} \beta \omega_{k,-} \right] \right\} \cos [2k(j-i)], \quad (5.169)$$

que, através do uso da Eq. (5.23), pode ser reescrita como:

$$\langle S_{iA} S_{jA} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jA} \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \cos [2(j-i)\theta] \frac{g}{2\omega(\theta)} \coth \left[\frac{1}{2} \beta \omega(\theta) \right]. \quad (5.170)$$

Sendo assim, com o uso das Eqs. (5.28) e (5.29), podemos reescrever a equação acima como

$$\langle S_{iA} S_{jA} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jA} \rangle = \frac{1 + \delta_{ij}}{2} A_{2(j-i)} \left(\frac{2\mu}{T}, \frac{2\sqrt{2}J}{T}, \frac{g}{4T} \right). \quad (5.171)$$

Através de argumentos parecidos, podemos obter o cumulante entre spins nos sítios B do mesmo tipo, ou seja, entre um no sítio $B_{1,2}$ da célula i , e outro no sítio $B_{1,2}$ da célula j ,

$$\begin{aligned} \langle S_{iB_{1,2}} S_{jB_{1,2}} \rangle - \langle S_{iB_{1,2}} \rangle \langle S_{jB_{1,2}} \rangle &= \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \cos[2(j-i)\theta] \frac{g}{2\omega(\theta)} \coth \left[\frac{1}{2} \beta \omega(\theta) \right] \\ &\quad + \frac{\delta_{ij}}{2} \frac{g}{2\omega_0} \coth \left[\frac{1}{2} \beta \omega_0 \right] \\ &= \frac{1 + \delta_{ij}}{4} A_{2(j-i)} \left(\frac{2\mu}{T}, \frac{2\sqrt{2}J}{T}, \frac{g}{4T} \right) \\ &\quad + \frac{\delta_{ij}}{2} B_0 \left(\frac{2\mu}{T}, \frac{g}{4T} \right). \end{aligned} \quad (5.172)$$

Da mesma forma, o cumulante entre spins no sítio B_1 da célula i , e no sítio B_2 da célula j ,

$$\begin{aligned} \langle S_{iB_1} S_{jB_2} \rangle - \langle S_{iB_1} \rangle \langle S_{jB_2} \rangle &= \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \cos[2(j-i)\theta] \frac{g}{2\omega(\theta)} \coth \left[\frac{1}{2} \beta \omega(\theta) \right] \\ &\quad - \frac{\delta_{ij}}{2} \frac{g}{2\omega_0} \coth \left[\frac{1}{2} \beta \omega_0 \right] \\ &= \frac{1 + \delta_{ij}}{4} A_{2(j-i)} \left(\frac{2\mu}{T}, \frac{2\sqrt{2}J}{T}, \frac{g}{4T} \right) \\ &\quad - \frac{\delta_{ij}}{2} B_0 \left(\frac{2\mu}{T}, \frac{g}{4T} \right); \end{aligned} \quad (5.173)$$

e também para spins nos sítios A da célula i , e sítio $B_{1,2}$ da célula j :

$$\begin{aligned} \langle S_{iA} S_{jB_{1,2}} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jB_{1,2}} \rangle &= \frac{\sqrt{2}}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \cos \{ [2(j-i) + 1] \theta \} \frac{g}{2\omega(\theta)} \coth \left[\frac{1}{2} \beta \omega(\theta) \right] \\ &= \frac{\sqrt{2}}{4} A_{2(j-i)+1} \left(\frac{2\mu}{T}, \frac{2\sqrt{2}J}{T}, \frac{g}{4T} \right). \end{aligned} \quad (5.174)$$

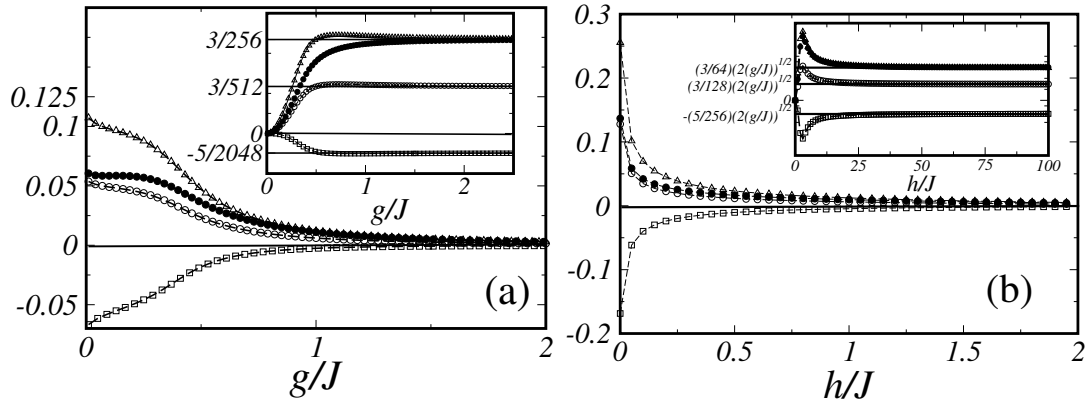


Figura 5.11: Cumulante entre spins B_1 e B_2 na mesma célula ($-\bullet-$) e entre spins em células primeiro-vizinhas [sítios A ($-\triangle-$), $B_{1,2}$ ($-\circ-$), e A com $B_{1,2}$ ($-\square-$)]: (a) em função de g/J , para $T = 0.05J$ e $h = 0.05J$; (b) em função de h/J , para $g = 0.05J$ e $T = 0.05J$. Os gráficos inscritos demonstram a convergência para limites paramagnéticos dos cumulantes multiplicados por (a): $(g/J)^2$ (os três primeiros cumulantes) e $(g/J)^3$ (último cumulante); e (b): $(h/J)^{5/2}$ (os três primeiros cumulantes) e $(h/J)^{7/2}$ (último cumulante).

Note que as funções de correlação entre spins se comportam de uma maneira que confirma a ordem ferrimagnética de curto alcance induzida pelo campo magnético, que já foi demonstrada pela análise da magnetização e susceptibilidade. Conforme demonstrado na Fig. 5.11 para spins em células primeiro-vizinhas, sítios A e $B_{1,2}$

possuem um cumulante negativo que se anula para $g \gg \{J, T, h\}$ [Fig. (5.11(a)) e $h \gg \{J, g, T\}$ [Fig. (5.11)(b)]. No último caso, os spins tendem a saturar-se como, por exemplo, $\langle S_{iA} S_{jA} \rangle \rightarrow \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jA} \rangle = (1/2)^2$, e de maneira similar para as outras correlações no limite paramagnético de campo alto, conforme demonstrado na Fig. (5.13)(b). De maneira similar obtemos a mesma saturação para valores grandes de g ou T , já que a correlação se anula como função de g e T uma vez que, por exemplo, $\langle S_{iA} \rangle \sim 1/T$ [$\langle S_{iA} \rangle \sim 1/g$] para $T \gg \{J, g, h\}$ [$g \gg \{J, T, h\}$], conforme demonstrado na Fig. 5.13(a).

Estes limites podem ser obtidos analiticamente através do uso dos assintóticos das Eqs. (5.33) e (5.34) nas Eqs. (5.171)-(5.174). Utilizando um cálculo semelhante ao realizado na derivação das Eqs. (4.59), (4.67), (4.72), (4.75) e (4.78), obtemos para $g \gg \{J, T, h\}$ or $T \gg \{J, g, h\}$:

$$A_n \sim \begin{cases} (-1)^n [(2 - \delta_{n,0})/4] (\sqrt{2}J/4g)^n [(2n-1)!!/(2n)!!], & g \gg \{J, T, h\}, \\ (-1)^n [(2 - \delta_{n,0})/4] (\sqrt{2}J/4T)^n, & T \gg \{J, g, h\}, \end{cases}$$

$$B_0 \sim A_0 - A_2, \quad g \gg \{J, T, h\} \text{ or } T \gg \{J, g, h\},$$
(5.175)

desta forma revelando o decaimento com a distância do cumulante na forma de lei de potência, para valores altos de g e T . Em particular, conforme demonstrado no gráfico inscrito na Fig. 5.11(a), através do uso da Eq. (5.175) nas Eqs. (5.171)-(5.174), o limite assintótico para $g \gg \{J, T, h\}$ do cumulante entre spins B_1 e B_2 na mesma célula vale:

$$\langle S_{iB_1} S_{iB_2} \rangle - \langle S_{iB_1} \rangle \langle S_{iB_2} \rangle = (A_0 - B_0)/2 \sim (3J^2)/(256g^2), \quad (5.176)$$

enquanto os cumulantes entre spins em células primeiro-vizinhas valem

$$\langle S_{iA} S_{(i+1)A} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{(i+1)A} \rangle = A_2/2 \sim (3J^2/256g^2), \quad (5.177)$$

$$\langle S_{iB_{1,2}} S_{(i+1)B_{1,2}} \rangle - \langle S_{iB_{1,2}} \rangle \langle S_{(i+1)B_{1,2}} \rangle = (A_2/4) \sim (3J^2)/(512g^2), \quad (5.178)$$

e

$$\langle S_{iA} S_{(i+1)B_{1,2}} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{(i+1)B_{1,2}} \rangle = (\sqrt{2}/4)A_3 \sim (-5J^3)/(2048g^3). \quad (5.179)$$

Estes limites são confirmados pela análise numérica demonstrada no gráfico inscrito da Fig. 5.11(a).

Por outro lado, para $h \gg \{J, T, h\}$ temos

$$A_n \sim \begin{cases} (-1)^n [(2 - \delta_{n,0})/2] (T/h) (\sqrt{2}J/2h)^n, & g = 0, \quad h \gg \{J, g, T\}, \\ (-1)^n [(2 - \delta_{n,0})/4] (\sqrt{2gh}/h) (\sqrt{2}J/2h)^n [(2n-1)!!/(2n)!!], & g \neq 0, \\ h \gg \{J, g, T\}, \end{cases}$$

$$B_0 \sim A_0 - A_2, \quad h \gg \{J, g, T\}, \quad (5.180)$$

que implica

$$\langle S_{iB_1} S_{iB_2} \rangle - \langle S_{iB_1} \rangle \langle S_{iB_2} \rangle = (A_0 - B_0)/2 \sim (3\sqrt{2gh}J^2)/(64h^3), \quad (5.181)$$

$$\langle S_{iA} S_{(i+1)A} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{(i+1)A} \rangle = A_2/2 \sim (3\sqrt{2gh}J^2/64h^3), \quad (5.182)$$

$$\langle S_{iB_1} S_{(i+1)B_2} \rangle - \langle S_{iB_{1,2}} \rangle \langle S_{(i+1)B_{1,2}} \rangle = (A_2/4) \sim (3\sqrt{2gh}J^2)/(128h^3) \quad (5.183)$$

e

$$\langle S_{iA} S_{(i+1)B_{1,2}} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{(i+1)B_{1,2}} \rangle = (\sqrt{2}/4) A_3 \sim (-5\sqrt{2gh}J^3)/(256h^4), \quad (5.184)$$

conforme ilustrado no gráfico inscrito na Fig. 5.11(b) através de uma análise numérica bem mais lenta.

No modelo esférico quântico encontramos decaimentos similares nas razões (J/g) , Eq. (4.60); (J/T) , Eq. (4.68); (J/h) , Eqs. (4.73) e (4.76); e na razão (J/h') , Eqs. (4.79) e (4.80). Para análise do ponto crítico $g = T = h = 0$, usamos os limites

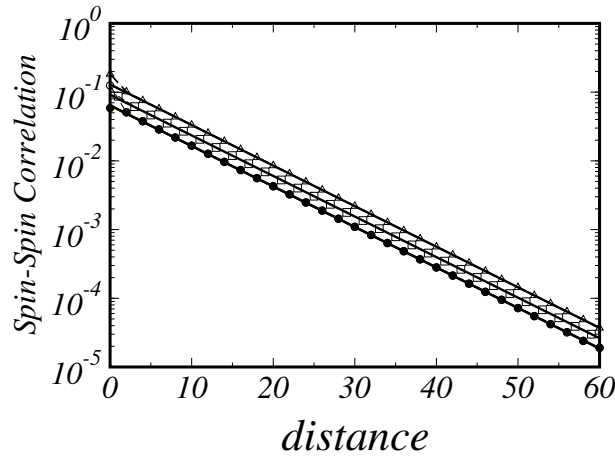


Figura 5.12: Valor absoluto dos cumulantes entre spins nos sítios A ($-\triangle-$), sítios $B_{1,2}$ ($-\circ-$), sítios B_1 e B_2 ($-\bullet-$); e sítios A e $B_{1,2}$ ($-\square-$) em função da distância (em unidades de d); para $g = 0.05J$, $T = 0.05J$ e $h = 0.05J$. As linhas retas indicam o decaimento exponencial.

específicos da Eq. (5.33). No caso em que $g = 0$,

$$A_n = 2(-1)^n A_0 \left(\frac{\mu}{\sqrt{2}J} - \sqrt{\frac{\mu^2}{2J^2} - 1} \right)^n; \quad (5.185)$$

para $T \rightarrow 0$, seguindo os mesmos passos que levaram às Eqs. (5.36) e (4.92), obtemos

$$A_n = 2(-1)^n \frac{\sqrt{g}}{\pi} \int_0^\infty dx \frac{\left[(2\mu + x^2)/(2\sqrt{2}J) - \sqrt{((2\mu + x^2)/(8J^2))^2 - 1} \right]^n}{\sqrt{(2\mu + x^2)^2 - 8J^2}}. \quad (5.186)$$

O ponto $g = T = h = 0$ pode ser acessado usando tanto a Eq. (5.185) como a Eq. (5.186), apesar da necessidade de análise de ponto de sela na integral presente no último caso. Em ambos os casos, obtemos $A_n = \frac{3}{4}(-1)^n$, e todas as correlações passam a independender da distância, assumindo valores consistentes com a restrição esférica, Eq. (5.22),

$$\langle S_{iA} S_{jA} \rangle = \frac{3}{8}, \quad \langle S_{iB_{1,2}} S_{jB_{1,2}} \rangle = \frac{3}{16}, \quad \langle S_{iA} S_{jB_{1,2}} \rangle = -\frac{3\sqrt{2}}{16}. \quad (5.187)$$

Salientamos ainda a coerência entre as Eqs. (5.139) e (5.187):

$$\langle S_{iA} \rangle^2 = \langle S_{iA} S_{jA} \rangle, \quad (5.188)$$

$$\langle S_{iB_{1,2}} \rangle^2 = \langle S_{iB_{1,2}} S_{jB_{1,2}} \rangle \quad (5.189)$$

$$\langle S_{iA} \rangle \langle S_{jB_{1,2}} \rangle = \langle S_{iA} S_{jB_{1,2}} \rangle, \quad (5.190)$$

que caracteriza a quebra espontânea de simetria [41].

É relevante notar que a soma de todas as funções de correlação não é proporcional à susceptibilidade da célula Eq. (5.142). Esta característica também está presente no modelo esférico médio clássico [29]. No caso quântico, entretanto, o motivo desta discrepância reside no fato que devemos obter a magnetização através de uma média térmica e em seguida derivá-la com respeito ao campo magnético para obter a susceptibilidade; a ordem destas operações não pode ser al-

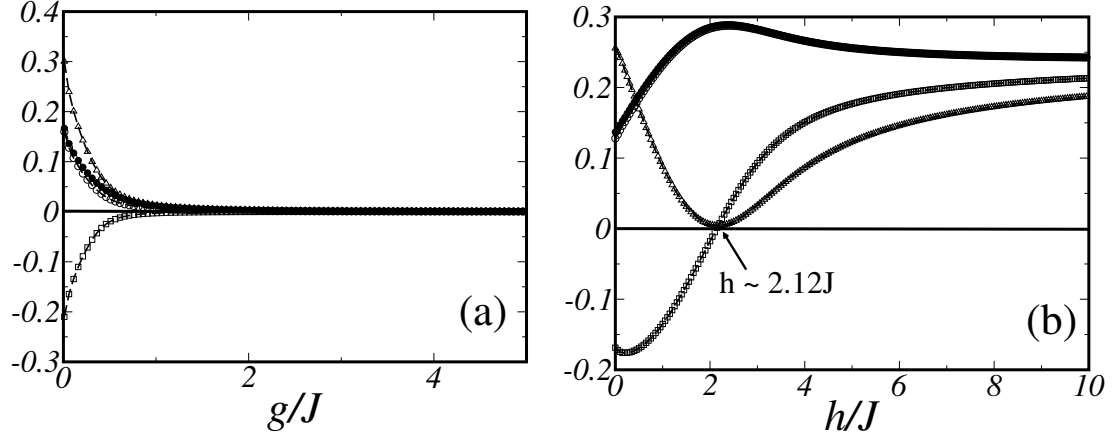


Figura 5.13: Correlação entre spins B_1 e B_2 na mesma célula ($-\bullet-$) e entre spins em células primeiro-vizinhas [sítios A ($-\triangle$), $B_{1,2}$ ($-\circ-$), e A com $B_{1,2}$ ($-\square-$)]: (a) em função de g/J , para $T = h = 0.05J$; (b) em função de h/J , para $g = T = 0.05J$.

terada, pois $[P_{i\alpha}^2, S_{j\beta}] = -2\delta_{ij}\delta_{\alpha,\beta}P_{i\alpha}$ no Hamiltoniano, Eq. (5.1), e isto implica que $\partial e^{-\beta H}/\partial h \neq -\beta e^{-\beta H}\partial H/\partial h$.

5.4.1 Comprimento de Correlação

Em todos os casos, excluindo a situação onde $g = T = h = 0$, as funções de correlação decaem exponencialmente com a distância, conforme esperado para um sistema sem transição de fase quântica ($g \neq 0$) ou térmica ($T \neq 0$) [veja Fig. (5.12)]. De fato, isto pode ser garantido demonstrando a presença de um comprimento de correlação no sistema. Escrevendo $A_n = [(2T(-1)^n)/(\sqrt{4\mu^2 - 8J^2})] \exp(-n/\xi)$, identificamos, a partir da Eq. (5.33) com $s = 0$ e $n \gg 1$:

$$\xi = -\frac{1}{\ln\left(\frac{\mu}{\sqrt{2}J} - \sqrt{\frac{\mu^2}{2J^2} - 1}\right)}. \quad (5.191)$$

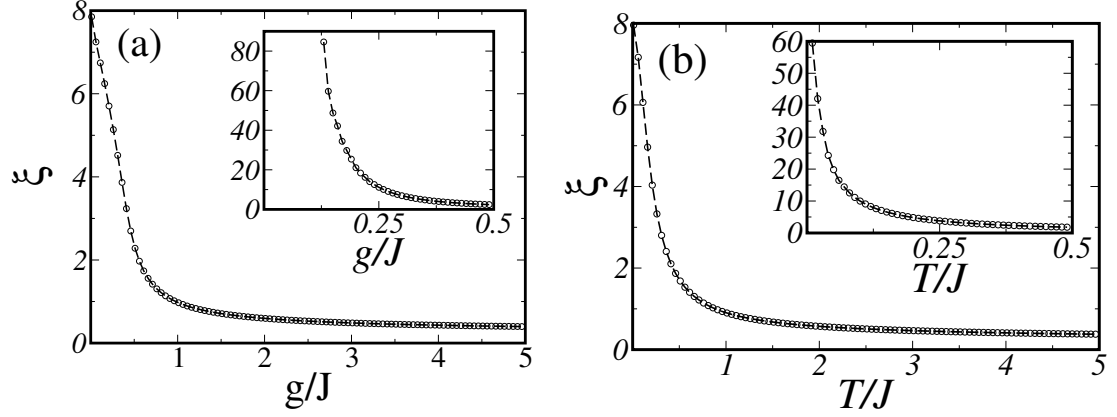


Figura 5.14: (a) Comprimento de correlação em função de g/J para $T = h = 0.05J$ e para $T = h = 0$ no gráfico inscrito. (b) Comprimento de correlação em função de T/J para $g = h = 0.05J$ e para $g = h = 0$ no gráfico inscrito.

A fórmula acima também pode ser obtida para o caso $T \rightarrow 0$, a partir de uma análise cuidadosa de ponto de sela da Eq. (5.186).

A partir dos resultados obtidos para o potencial químico, podemos obter várias aproximações para o comprimento de correlação.

(A) $g = h = 0, T \ll J$.

Combinando a Eq. (5.42) para o potencial químico com a Eq. (5.191), obtemos:

$$\xi = \frac{3\sqrt{2}}{4} \frac{J}{T} - \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{2}}{9} \frac{T}{J} + \dots, \quad g = h = 0, T \ll J. \quad (5.192)$$

Observamos que um comportamento similar foi obtido para o comprimento de correlação do modelo esférico quântico antiferromagnético na cadeia AB no limite $g = h = h' = 0, T \ll J$, conforme descrito na Eq. (4.100). Este regime está ilustrado no gráfico inscrito da Fig. 5.14(b).

(B) $g = h = 0, T \gg J$.

Através do uso da Eq. (5.46), podemos obter o seguinte assintótico para o comprimento de correlação:

$$\xi \sim \frac{1}{\ln(T/J)}, \quad g = h = 0, T \gg J. \quad (5.193)$$

Este regime está ilustrado no gráfico inscrito da Fig. 5.14(b).

(C) $T = h = 0, g \ll J$.

Substituindo a Eq. (5.51) para o potencial químico na Eq. (5.191), obtemos o seguinte resultado para o comprimento de correlação:

$$\xi \sim \frac{\sqrt{2}}{16} \exp \left[\frac{3\pi}{4} \sqrt{(\sqrt{2}J)/g} \right], \quad T = h = 0, g \ll J. \quad (5.194)$$

Observamos que uma singularidade essencial também foi obtida para o comprimento de correlação do modelo antiferromagnético quântico na cadeia AB , conforme o resultado obtido na Eq. (4.113). Este regime está ilustrado no gráfico inscrito da Fig. 5.14(a).

(D) $T = h = 0, g \gg J$.

Utilizando a Eq. (5.57) e o comprimento de correlação, obtemos o seguinte assintótico:

$$\xi \sim \frac{1}{\ln(g/J)}, \quad T = h = 0, g \gg J. \quad (5.195)$$

Este comportamento está ilustrado no gráfico inscrito da Fig. 5.14(a).

(E) $g = T = 0, h \ll J$.

Substituindo a Eq. (5.62) para o potencial químico no comprimento de correlação,

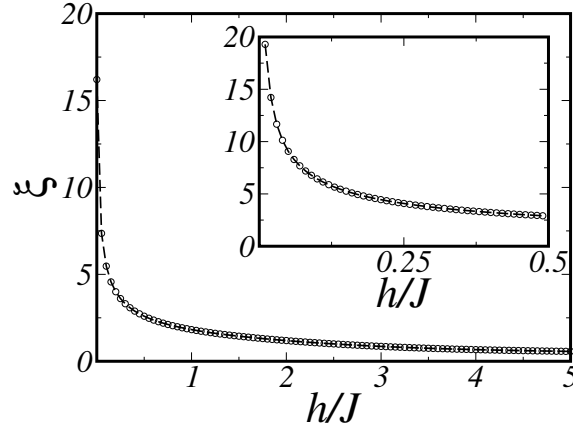


Figura 5.15: Comprimento de correlação em função de h/J , para $g = T = 0.05J$ e para $g = T = 0$ no gráfico inscrito.

obtemos:

$$\xi = 2\sqrt{9 + 6\sqrt{2}}\sqrt{\frac{J}{h}} + 2\sqrt{9 + 6\sqrt{2}}\sqrt{\frac{h}{J}} + \dots, \quad g = T = 0, \quad h \ll J. \quad (5.196)$$

Este comportamento está descrito no gráfico inscrito da Fig. 5.15.

(F) $g = T = 0, h \gg J$.

Com o uso da Eq. (5.66) para o potencial químico podemos obter o seguinte assintótico para o comprimento de correlação:

$$\xi \sim \frac{1}{\ln(h/J)}, \quad g = T = 0, \quad h \gg J. \quad (5.197)$$

Este comportamento está descrito no gráfico inscrito da Fig. 5.15.

(G) $h \gg \{J, g, T\}$.

Substituindo a Eq. (5.67) na Eq. (5.191), obtemos o seguinte resultado para o

comprimento de correlação:

$$\xi \sim \frac{1}{\ln(h/J)}, \quad h \gg \{J, g, T\}, \quad (5.198)$$

resultado assintoticamente idêntico ao do regime (F), como esperado. Este regime está ilustrado na Fig. 5.15.

(H) $T \gg \{J, g, h\}$.

Combinando a Eq. (5.69) para o potencial químico com a Eq. (5.191), obtemos o seguinte resultado para o comprimento de correlação:

$$\xi \sim \frac{1}{\ln(T/J)}, \quad T \gg \{J, g, h\}, \quad (5.199)$$

de acordo com a Eq. (5.194). Este regime está ilustrado na Fig. 5.14(b).

(I) $g \gg \{J, T, h\}$.

Substituindo a Eq. (5.75) para o potencial químico no comprimento de correlação, Eq. (5.191), obtemos o seguinte assintótico:

$$\xi \sim \frac{1}{\ln(g/J)}, \quad g \gg \{J, T, h\}, \quad (5.200)$$

de acordo com a Eq. (5.195). Este comportamento está ilustrado na Fig. 5.14(a).

(J) $h \ll \{J, g, T\}$.

Com o uso da Eq. (5.90) para o potencial químico e da Eq. (5.191) para o

comprimento de correlação, obtemos:

$$\xi \sim -\frac{1}{\ln \left[\mu_0/(\sqrt{2}J) - \sqrt{\mu_0^2/(2J^2) - 1} \right]} - \frac{\mu_0\mu_2}{\sqrt{\mu_0^2 - 2J^2} \left(\mu_0 - \sqrt{\mu_0^2 - 2J^2} \right) \ln \left[\mu_0/(\sqrt{2}J) - \sqrt{\mu_0^2/(2J^2) - 1} \right]} h^2, \quad h \ll \{J, g, T\}. \quad (5.201)$$

Observamos que a presença das flutuações térmicas e[ou] quânticas faz o comprimento de correlação atingir um máximo finito, ao invés da divergência obtida no regime (E). Este regime está ilustrado na Fig. 5.15.

(K) $T \ll \{J, g, h\}$.

Substituindo a Eq. (5.102) no comprimento de correlação, Eq. (5.191), obtemos o seguinte resultado:

$$\xi \sim -\frac{1}{\ln \left[\mu_0/(\sqrt{2}J) - \sqrt{\mu_0^2/(2J^2) - 1} \right]} - \frac{\mu_0\mu_1}{\sqrt{\mu_0^2 - 2J^2} \left(\mu_0 - \sqrt{\mu_0^2 - 2J^2} \right) \ln \left[\mu_0/(\sqrt{2}J) - \sqrt{\mu_0^2/(2J^2) - 1} \right]} T, \quad T \ll \{J, g, h\}. \quad (5.202)$$

Ressaltamos que a presença das flutuações térmicas e[ou] campo magnético faz com que o comprimento de correlação atinja um máximo finito, indo em uma direção oposta ao resultado obtido no regime (A). Este regime está ilustrado na Fig. 5.14(b).

(L) $g \ll \{J, T, h\}$.

Combinando a Eq. (5.110) para o potencial químico com o comprimento de correlação, Eq. (5.191), obtemos o seguinte resultado:

$$\xi \sim -\frac{1}{\ln \left[\mu_0/(\sqrt{2}J) - \sqrt{\mu_0^2/(2J^2) - 1} \right]} - \frac{\mu_0\mu_1}{\sqrt{\mu_0^2 - 2J^2} \left(\mu_0 - \sqrt{\mu_0^2 - 2J^2} \right) \ln \left[\mu_0/(\sqrt{2}J) - \sqrt{\mu_0^2/(2J^2) - 1} \right]} g, \\ g \ll \{J, T, h\}. \quad (5.203)$$

Este limite está ilustrado na Fig. 5.14(b).

Observamos na Eq. (5.194) a presença de uma divergência não-analítica em ξ devido às flutuações quânticas quando $g/J \rightarrow 0$, com $T = h = 0$ [veja o gráfico inscrito na Fig. 5.14(a)]. Neste caso a presença de flutuações térmicas e/ou do campo magnético faz com que ξ assumam um máximo finito, conforme demonstrado na Eq. (5.203) e na Fig. 5.14(a). Um máximo finito parecido ocorre em ξ devido à presença de flutuações térmicas e/ou quânticas no regime descrito pela Eq. (5.196), conforme resultado obtido na Eq. (5.201) e demonstrado na Fig. 5.15. De maneira similar, um máximo finito em ξ é devido à presença de flutuações quânticas e/ou campo magnético no regime descrito pela Eq. (5.192), de acordo com o resultado obtido na Eq. (5.202) e ilustrado na Fig. 5.14(b). Ressaltamos que esta análise reforça os resultados obtidos com a análise da susceptibilidade da célula. Note em particular a coerência entre as Eqs. (5.192), (5.194), (5.196) e as Eqs. (5.145), (5.151), (5.157), onde a relação $\chi_{cell} \sim \xi^2$ é observada em todos esses casos [13].

5.5 Entropia e Calor Específico

A entropia do sistema pode ser calculada a partir da Eq. (5.21) como segue:

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \sum_{k,m} \left\{ \frac{\beta \omega_{k,m}}{\exp(\beta \omega_{k,m}) - 1} - \ln(1 - \exp(-\beta \omega_{k,m})) \right\}. \quad (5.204)$$

A partir da equação acima podemos prontamente obter o calor específico,

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} = \sum_{k,m} \frac{(\beta \omega_{k,m})^2 \exp(\beta \omega_{k,m})}{(\exp(\beta \omega_{k,m}) - 1)^2} \left(1 - \frac{g}{\omega_{k,m}^2} T \frac{\partial \mu}{\partial T} \right), \quad (5.205)$$

conforme ilustrado na Fig. 5.16. Note que ambas expressões são formalmente idênticas às de uma sistema de bósons livres, exceto pela presença do termo com uma dependência explícita em g na Eq. (5.205) característico do modelo esférico, conforme as Eqs. (2.79) e (3.122). De fato, o termo que apresenta a derivada $\partial \mu / \partial T$ está presente no modelo esférico clássico [1].

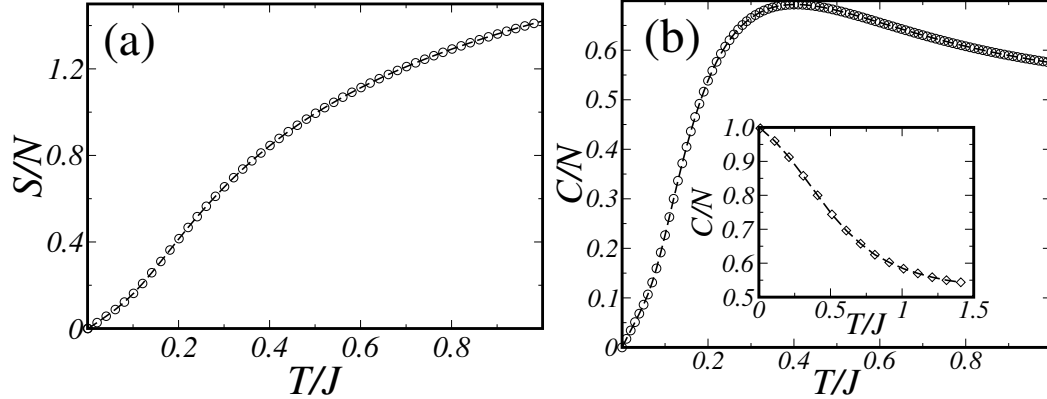


Figura 5.16: (a) Entropia e (b) calor específico em função de T , para $g = 0.1J$ e $h = 0$ (gráfico inscrito: $g = h = 0$).

Note que para $g \neq 0$, o conhecido problema do modelo esférico em baixas temperaturas (C finito e S divergente) [1] não aparece nas Eqs. (5.204) e (5.205). Entretanto, considerando o limite $g \rightarrow 0$, o problema aparece na Eq. (5.204) [veja gráfico inscrito na Fig. 5.16(b)] como:

$$\begin{aligned} S &\sim S_{div} + S_{div}^{BK} - \frac{1}{2} \sum_{k,m} \ln \frac{(2\mu + J_{k,m})}{2\sqrt{2}J} + N, \\ &= S_{div} + S_{div}^{BK} - \frac{1}{2} \left[2\frac{N}{3} \ln \left(\frac{\mu}{\sqrt{2}J} - \sqrt{\frac{\mu^2}{2J^2} - 1} \right) + \frac{N}{3} \ln \frac{\mu}{\sqrt{2}J} \right] + N, \quad N \gg 1, \end{aligned} \quad (5.206)$$

com $S_{div} = (N/2) \ln(T/g)$ e $S_{div}^{BK} = (N/2) \ln[T/(2\sqrt{2}J)]$. Observamos que o termo S_{div} não está presente no modelo esférico clássico, conforme Eq. (2.78). Realizando o limite $T \rightarrow 0$ através da trajetória $g = T$, o termo extra (S_{div}) desaparece e o resultado clássico [1], Eq. (2.79), é recuperado:

$$C^{BK} = \frac{N}{2} \left[1 + 4K^2 \frac{dz_s}{dK} \right], \quad (5.207)$$

com $K = J/8T$ and $z_s = \mu/J$. Utilizando os resultados para o potencial químico, podemos obter aproximações para o calor específico, como segue.

(A) $g = h = 0, T \ll J$.

Através do uso da Eq. (5.42) para o potencial químico e da Eq. (5.207), obtemos o seguinte resultado:

$$\frac{C^{BK}}{N} = 1/2 - \frac{2\sqrt{2}}{9}(T/J) - \frac{24}{27}(T/J)^2 + \frac{8\sqrt{2}}{81}(T/J)^3 + \dots, \quad g = h = 0, T \ll J. \quad (5.208)$$

Este é o comportamento de baixas temperaturas do modelo esférico clássico na cadeia AB_2 , incluindo a correção apropriada, conforme resultado obtido na Eq. (5.207).

(B) $g = h = 0, T \gg J$.

Substituindo a Eq. (5.46) para o potencial químico na Eq. (5.207), obtemos o resultado:

$$\frac{C^{BK}}{N} = \frac{1}{12}(J/T)^2 + \frac{1}{96}(J/T)^4 + \dots, \quad g = h = 0, T \gg J. \quad (5.209)$$

Este é o regime de altas temperaturas do modelo esférico clássico na cadeia AB_2 , incluindo a correção apropriada, conforme resultado obtido na Eq. (5.207).

(H) $T \gg \{J, g, h\}$.

Considerando o limite $(T/J) \rightarrow \infty$, obtemos a partir da Eq. (5.69), os seguintes resultados:

$$\frac{S}{N} \sim \frac{1}{2} \ln \left(\frac{T}{4g} \right) + 1, \quad (5.210)$$

$$\frac{C}{N} \sim \frac{1}{2}. \quad (5.211)$$

Ressaltamos que os graus de liberdade associados com o momento canônico conjugado às variáveis de spin ($P_{i\alpha}^2$) não contribuem para o calor específico em altas temperaturas, devido ao termo extra com dependência explícita com g presente na Eq. (5.205). Lembramos ainda que um resultado análogo foi obtido para a cadeia AB , Eqs. (4.143) e (4.143).

(K) $T \ll \{J, g, h\}$.

Para $(T/J) \rightarrow 0$, considere os termos dominantes das Eqs. (5.204) e (5.205):

$$\frac{S}{N} = \sum_{k,m} \beta \omega_{k,m} e^{-\beta \omega_{k,m}} \quad (5.212)$$

$$\frac{C}{N} = \sum_{k,m} (\beta \omega_{k,m})^2 e^{-\beta \omega_{k,m}}. \quad (5.213)$$

Considerando o limite do contínuo, obtemos as seguintes expressões para a entropia e para o calor específico:

$$\frac{S}{N} = \frac{2}{3} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \beta \omega(\theta) e^{-\beta \omega(\theta)} + \frac{1}{3} \beta \omega_0 e^{-\beta \omega_0} \quad (5.214)$$

$$\frac{C}{N} = \frac{2}{3} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} (\beta \omega(\theta))^2 e^{-\beta \omega(\theta)} + \frac{1}{3} (\beta \omega_0)^2 e^{-\beta \omega_0}, \quad (5.215)$$

onde os modos dispersivos estão representados por $\omega(\theta) = \sqrt{2g(\mu + \sqrt{2}J \cos(\theta))}$ e o modo localizado por $\omega_0 = \sqrt{2g\mu}$. Como $\beta \rightarrow \infty$, podemos considerar o ponto de sela na integral das equações acima para $\theta = \pi$. Sendo assim, podemos utilizar que $\beta \omega(\theta) = \frac{\theta_d}{T} \left(1 + \frac{\sqrt{2}J}{4(\mu_0 - \sqrt{2}J)}(\theta - \pi)^2\right)$ e $\beta \omega_0 = \frac{\theta_l}{T}$, onde $\theta_d = \sqrt{2g(\mu_0 - \sqrt{2}J)}$ e $\theta_l = \sqrt{2g\mu_0}$. Desta forma, podemos obter o resultado desejado realizando uma integral gaussiana em θ :

$$\frac{S}{N} \sim \frac{1}{3} \left(\frac{\theta_l}{T}\right) \exp\left(-\frac{\theta_l}{T}\right) + \frac{2}{3} D \left(\frac{\theta_d}{T}\right)^{0.5} \exp\left(-\frac{\theta_d}{T}\right), \quad (5.216)$$

$T \ll \{J, g, h\},$

$$\frac{C}{N} \sim \frac{1}{3} \left(\frac{\theta_l}{T}\right)^2 \exp\left(-\frac{\theta_l}{T}\right) + \frac{2}{3} D \left(\frac{\theta_d}{T}\right)^{1.5} \exp\left(-\frac{\theta_d}{T}\right), \quad (5.217)$$

$T \ll \{J, g, h\},$

onde $\mu_0 = \mu(g, T = 0, h)$ e $D = \sqrt{4\pi(\mu_0/(\sqrt{2}J) - 1)}$. A dependência exponencial é devido ao modo localizado; o segundo termo em S e C nas Eqs. (5.217) e Eq. (5.218) está relacionado com o mínimo não nulo para os modos dispersivos, conforme demonstrado na Fig. 5.2. No segundo termo da Eq. (5.218) a dependência constante em k no limite de $k \rightarrow 0$ das frequências dos modos dispersivos, Eq. (5.17), leva a uma dependência exponencial acompanhada de um fator $1/T^2$ (similar ao modelo de Einstein); por outro lado, o termo em k^2 gera um fator $T^{0.5}$ típico de onda de spin, desta forma justificando a dependência global em $1/T^{1.5}$. Um resultado similar foi obtido para o caso do modelo esférico quântico em redes hipercúbicas, Eqs. (3.130) e (3.132).

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas

Nesta tese, utilizamos o modelo esférico quântico para estudar o efeito das flutuações quânticas no comportamento termodinâmico da rede hipercúbica d -dimensional e das cadeias AB e AB_2 antiferromagnéticas.

No caso da rede hipercúbica, mostramos que o modelo apresenta transição de fase térmica ($T \neq 0$) a partir de três dimensões e quântica a partir de duas dimensões e, para o caso clássico, transição de fase a temperatura finita a partir de três dimensões. Através de cálculos detalhados de observáveis como magnetização e susceptibilidade obtivemos os expoentes críticos do modelo esférico quântico ferromagnético em redes hipercúbicas. Esses expoentes críticos são os mesmos do modelo esférico quântico antiferromagnético, já que o caso antiferromagnético equivale ao caso ferromagnético pela substituição do campo magnético uniforme pelo campo magnético *staggered*, pela introdução do sinal Néel na magnetização e funções de correlação e pela mudança de sinal na constante de acoplamento ferromagnética, $J \rightarrow -J$. Esse resultado justifica o fato de termos obtido os mesmos expoentes críticos de Vojta [17]. No caso específico das funções de correlação, verificamos que os com-

portamentos na proximidade da região crítica a temperatura finita e para o estado fundamental quântico se equivalem através da transformação $(T/J) \rightarrow \sqrt{g/J}$ e da dimensão efetiva $d \rightarrow d+z$, onde z é o expoente dinâmico do modelo. Este expoente pode ser também obtido através da análise do comportamento das frequências do modelo para $k \rightarrow 0$, corroborando o resultado obtido através do cálculo das funções de correlação, ou seja, $z = 1$.

Verificamos também que a discrepância do modelo esférico é corrigida em baixas temperaturas através do cálculo da entropia e do calor específico neste regime. A dependência em baixas temperaturas revela a presença de um “gap” finito no espectro do modelo para qualquer g diferente de zero, fato este confirmado pelo decaimento exponencial com a distância das funções de correlação para valores de $\{g, T, h\}$ distantes da região crítica.

Na cadeia AB , obtivemos que o modelo esférico quântico só apresenta quebra espontânea de simetria nas ausências de flutuações térmicas e quânticas e do campo magnético uniforme e limite nulo do campo magnético *staggered*. Verificamos ainda que na ausência de campo *staggered*, o modelo não apresenta transição de fase no ponto $g = T = h = h' = 0$, apesar de obtermos divergências na susceptibilidade e comprimento de correlação. Neste caso obtemos que as funções de correlação se tornam independentes da distância e assumem valores consistentes com uma possível ordem antiferromagnética de longo alcance. Esta ordem, contudo, não existe neste caso, pois somente a presença do campo *staggered* pode quebrar a degenerescência entre os possíveis estados antiferromagnéticos da cadeia AB . Lembramos que a cadeia Heisenberg AB antiferromagnética também não apresenta quebra espontânea de simetria no estado fundamental quântico ($T = 0$).

Os valores locais de spin na cadeia AB podem apresentar um comportamento an-

tiferromagnético de curto alcance na presença de campo magnético *staggered* e para flutuações quânticas e térmicas pouco intensas e valores baixos do campo magnético uniforme quando comparado com o campo magnético *staggered*. Essa ordem de curto alcance é destruída para valores altos do campo magnético uniforme e aumento das flutuações térmicas e/ou quânticas.

No modelo esférico clássico na cadeia AB , a conhecida discrepância do modelo esférico clássico em relação à terceira lei da termodinâmica também se faz presente. A presença de flutuações quânticas no modelo ($g \neq 0$) corrige esta falha. Além disso um cálculo mais detalhado da entropia e do calor específico revela que a termodinâmica de baixas temperaturas do modelo esférico quântico na cadeia AB pode ser comparada com aquela da cadeia Heisenberg XXZ . Como na cadeia XXZ , o calor específico da cadeia AB demonstra que o modelo apresenta um “gap” no espectro. Já a termodinâmica de altas temperaturas do modelo esférico quântico se assemelha a de um oscilador harmônico quântico, cuja frequência depende da temperatura e do parâmetro quântico g .

O modelo esférico quântico na cadeia AB_2 apresenta uma quebra espontânea de simetria com ordenamento ferrimagnético de longo alcance para o único ponto crítico $g = T = h = 0$. As funções de correlação para $g = T = h = 0$ independem da distância e assumem valores finitos consistentes com a restrição esférica e com a ordem ferrimagnética. Podemos nos aproximar do ponto crítico de diversas maneiras: para $T = h = 0$ e $(g/J) \rightarrow 0$ a susceptibilidade χ_{cell} (e comprimento de correlação) exibem uma singularidade essencial, i.e., $\ln \chi_{cell} \sim 1/\sqrt{g}$, enquanto para $g = T = 0$ e $(h/J) \rightarrow 0$ ou para $g = h = 0$ e $(T/J) \rightarrow 0$ temos que $\chi_{cell} \sim 1/h$ e $\chi_{cell} \sim 1/T^2$, respectivamente. Em qualquer caminho escolhido a relação $\chi_{cell} \sim \xi^2$ é mantida. Por outro lado, para quaisquer g , T ou h finitos, temos que as flutuações

térmicas e quânticas destroem a ordem de longo alcance no modelo. Neste regime, os spins mantêm um ordenamento ferrimagnético de curto alcance para uma certa região do espaço de parâmetros $\{g, T, h\}$. Esta região, que corresponde à superfície determinada pela condição $\mu = 2J$, surge em consequência das interações anti-ferromagnéticas e da topologia AB_2 . Esse comportamento ferrimagnético de curto alcance é caracterizado por um aumento rápido da magnetização para valores baixos do campo magnético, além de máximos na susceptibilidade e comprimento de correlação para baixos valores do campo magnético ou flutuação térmicas e quânticas pouco intensas. Esses resultados são confirmados pela análise das funções de correlação, que decaem exponencialmente com a distância neste regime. Para flutuações térmicas e quânticas intensas e altos valores do campo magnético, o modelo se comporta como um paramagneto usual, i. e., segue a Lei de Curie, conforme demonstrado por cálculos da magnetização, susceptibilidade e comprimento de correlação. A análise dos limites assintóticos das funções de correlação, para $\{g, T, h\} \gg J$, também confirma esse resultado.

O modelo esférico clássico na cadeia AB_2 também apresenta uma discrepância em relação à terceira lei da termodinâmica. Esta falha é também corrigida pela presença das flutuações quânticas. Como no caso da cadeia AB , a termodinâmica do modelo esférico quântico na cadeia AB_2 pode ser comparada com aquela de uma cadeia Heisenberg XXZ , inclusive demonstrando que o sistema possui um “gap” finito no espectro para qualquer g finito. De maneira similar, a termodinâmica do modelo esférico quântico na cadeia AB_2 se assemelha a de um oscilador harmônico quântico, com frequência dependente da temperatura e do parâmetro quântico g .

A compreensão do comportamento termodinâmico do modelo esférico nas cadeias AB e AB_2 pode ser ampliada pelo estudo do modelo biesférico quântico na cadeia AB

com spin alternados q_A e q_B . Conforme obtido no Apêndice A, existe a possibilidade matemática de ordem ferrimagnética para $q_A \neq q_B$ e de ordem antiferromagnética para $q_A = q_B$, tanto de curto alcance como de longo alcance. Desta maneira, através do estudo numérico do modelo biesférico seria possível reproduzir os resultados obtidos para as cadeias AB e AB_2 em um diagrama de fases mais rico, $\{g, T, h, h', q_A, q_B\}$. Assim poderíamos compreender melhor as semelhanças e diferenças entre as cadeias AB e AB_2 dentro do contexto do modelo esférico quântico. Entre outros estudos, a análise dos valores locais de spin e da susceptibilidade poderia indicar a presença de uma ou mais regiões com ordem de curto alcance tanto ferrimagnética quanto antiferromagnética. Se isto for possível, um estudo das funções de correlação confirmaria os resultados obtidos através dos observáveis mencionados anteriormente.

Além disso, os modos normais foram obtidos para a rede hipercúbica, cadeia AB e AB_2 . Desta forma, seria possível estudar o comportamento magnético do modelo esférico fora do equilíbrio termodinâmico, através de um operador *matriz densidade* fenomenológico.

Apêndice A

Modelo Biesférico Quântico na Cadeia AB

No capítulo 4 observamos que uma quebra espontânea de simetria para um ordenamento aniferromagnético a $g = T = h = 0$ no modelo esférico quântico na cadeia AB só foi obtida mediante a introdução (e posterior anulamento) de um campo magnético *staggered* que operasse “artificialmente” a quebra de degenerescência do seu estado fundamental. Neste apêndice, vamos tentar flexibilizar o spin em cada sítio na tentativa de obter uma região de comportamento antiferromagnético ou ferromagnético, sem a necessidade do artifício do campo *staggered* como no caso da cadeia alternada de spin 1/2-1. Desta maneira considere agora uma generalização do modelo esférico [33] para uma cadeia de spins alternados, ou seja, os sítios A tem um spin q_A e os sítios B têm um spin q_B . O Hamiltoniano do sistema pode ser

escrito como:

$$\begin{aligned}
 H = & \frac{g}{2} \sum_i (P_{iA}^2 + P_{iB}^2) + \mu_A \sum_i (S_{iA}^2 - q_A^2) + \mu_B \sum_i (S_{iB}^2 - q_B^2) \\
 & + \frac{J}{2} \sum_{\langle i\alpha, j\beta \rangle} S_{i\alpha} S_{j\beta} - h \sum_i (S_{iA} + S_{iB}) - h' \sum_i (S_{iA} - S_{iB}).
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

Na equação acima, $S_{i\alpha}$ é uma variável de spin em um sítio $\alpha = A, B$ localizado em uma célula $i = 1, \dots, N/2$, onde N é o número de sítios da cadeia AB , g é a constante de acoplamento quântica, h é um campo externo e h' é um campo magnético *staggered*, ambos em unidades de energia (o campo *staggered* foi inicialmente considerado apenas à guisa de comparação com os resultados do capítulo 4; como exposto, tentamos neste apêndice investigar a possibilidade de aparecimento de ordem no estado fundamental a $h' = 0$, no caso em que $q_A \neq q_B$). $P_{i\alpha}$ indica o momento conjugado à variável de spin $S_{i\alpha}$, onde as seguintes relações de comutação são obedecidas:

$$[S_{i\alpha}, S_{j\beta}] = 0, \quad [P_{i\alpha}, P_{j\beta}] = 0, \quad [S_{i\alpha}, S_{j\beta}] = i\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}; \tag{A.2}$$

$\langle \dots \rangle$ indica soma sobre os primeiros vizinhos da cadeia AB , e μ_A e μ_B são os potenciais químicos associados às seguintes restrições esféricas médias:

$$\sum_i (\langle S_{iA}^2 \rangle - q_A^2) = 0, \quad \sum_i (\langle S_{iB}^2 \rangle - q_B^2) = 0. \tag{A.3}$$

Podemos introduzir operadores de criação e destruição através das equações:

$$S_{i\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{g}{2\mu_\alpha} \right)^{1/4} (a_{i\alpha} + a_{i\alpha}^\dagger), \quad (\text{A.4})$$

$$P_{i\alpha} = \frac{-i}{\sqrt{2}} \left(\frac{2\mu_\alpha}{g} \right)^{1/4} (a_{i\alpha} - a_{i\alpha}^\dagger), \quad \alpha = A, B. \quad (\text{A.5})$$

$$(\text{A.6})$$

Substituindo as transformações, Eqs. (A.4), (A.5), na Eq. (A.1) obtemos a seguinte forma para o Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} H = & \sqrt{2g\mu_A} \sum_i a_{iA}^\dagger a_{iA} + \sqrt{2g\mu_B} \sum_i a_{iB}^\dagger a_{iB} + \frac{N}{2} (\sqrt{2g\mu_A} + \sqrt{2g\mu_B} - \mu_A(q_A)^2 + \mu_B(q_B)^2) \\ & + \frac{J}{2} \left(\frac{g^2}{4\mu_A\mu_B} \right)^{1/4} \sum_i (a_{iB}^\dagger a_{i+1A} + a_{iB} a_{i+1A}^\dagger + a_{iB} a_{i+1A} + a_{iB}^\dagger a_{i+1A}^\dagger) \\ & + \frac{J}{2} \left(\frac{g^2}{4\mu_A\mu_B} \right)^{1/4} \sum_i (a_{iB} a_{iA} + a_{iB} a_{iA}^\dagger + a_{iB}^\dagger a_{iA} + a_{iB}^\dagger a_{iA}^\dagger) \\ & - \frac{(h+h')}{\sqrt{2}} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} \sum_i (a_{iA} + a_{iA}^\dagger) - \frac{(h-h')}{\sqrt{2}} \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} \sum_i (a_{iB} + a_{iB}^\dagger). \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Considere agora a transformada de Fourier:

$$a_{j\alpha} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k e^{ikj} a_{k\alpha}, \quad \alpha = A, B, \quad k = \frac{2\pi}{N/2} \nu, \quad \nu = 0, \dots, N/2 - 1, \quad (\text{A.8})$$

onde $\sum_k e^{ik(j-j')} = \frac{N}{2}\delta_{j,j'}$. Com o resultado da Eq. (A.8), o Hamiltoniano, Eq. (A.7), assume o seguinte formato:

$$\begin{aligned}
 H = & \omega_A \sum_k a_{kA}^\dagger a_{kA} + \frac{N}{2}(\omega_A - \mu_A q_A^2) + \omega_B \sum_k a_{kB}^\dagger a_{kB} + \frac{N}{2}(\omega_B - \mu_B q_B^2) \\
 & + \frac{1}{2} \sum_k J_k \left(\frac{g^2}{4\mu_A \mu_B} \right)^{1/4} \left[a_{kB}^\dagger a_{kA} e^{ik/2} + a_{kA}^\dagger a_{kB} e^{-ik/2} + a_{kB} a_{-kA} e^{-ik/2} + a_{kA}^\dagger a_{-kB}^\dagger e^{ik/2} \right] \\
 & - \frac{(h+h')}{\sqrt{N}} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} (a_{0A} + a_{0A}^\dagger) - \frac{(h-h')}{\sqrt{N}} \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} (a_{0B} + a_{0B}^\dagger), \quad (\text{A.9})
 \end{aligned}$$

onde $\omega_A = \sqrt{2g\mu_A}$ e $\omega_B = \sqrt{2g\mu_B}$, $J_k = 2J \cos(k/2)$. Considere agora a transformação que torna explícita a simetria entre os sítios A e B :

$$\psi_k = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{kA} + e^{-ik/2}a_{kB}), \quad \phi_k = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{kA} - e^{-ik/2}a_{kB}). \quad (\text{A.10})$$

Substituindo a transformação Eq. (A.10) no Hamiltoniano, Eq. (A.9), obtemos a seguinte forma para o Hamiltoniano:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{k>0} \left[(\omega_A + \omega_B)/2 + \frac{gJ_k}{2\sqrt{\omega_A \omega_B}} \right] (\psi_k^\dagger \psi_k + \psi_{-k}^\dagger \psi_{-k}) \\
 & + \sum_{k>0} \left[(\omega_A + \omega_B)/2 - \frac{gJ_k}{2\sqrt{\omega_A \omega_B}} \right] (\phi_k^\dagger \phi_k + \phi_{-k}^\dagger \phi_{-k}) \\
 & + (1/2)(\omega_A - \omega_B) \sum_{k>0} (\psi_k^\dagger \phi_k + \psi_{-k}^\dagger \phi_{-k} + h.c.) + \sum_{k>0} \frac{gJ_k}{2\sqrt{\omega_A \omega_B}} (\psi_{-k} \psi_k - \phi_{-k} \phi_k + h.c.)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left((\omega_A + \omega_B)/2 + \frac{gJ_0}{2\sqrt{\omega_A\omega_B}} \right) \psi_0^\dagger \psi_0 + \left((\omega_A + \omega_B)/2 - \frac{gJ_0}{2\sqrt{\omega_A\omega_B}} \right) \phi_0^\dagger \phi_0 \\
& + \frac{1}{2}(\omega_A - \omega_B)(\psi_0^\dagger \phi_0 + \phi_0^\dagger \psi_0) + \frac{gJ_0}{4\sqrt{\omega_A\omega_B}}(\psi_0^2 - \phi_0^2 + h.c.) \\
& - \frac{1}{2} \left[\sqrt{N}(h + h') \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} + \sqrt{N}(h - h') \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} \right] (\psi_0 + \psi_0^\dagger) \\
& - \frac{1}{2} \left[\sqrt{N}(h + h') \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} - \sqrt{N}(h - h') \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} \right] (\phi_0 + \phi_0^\dagger).
\end{aligned} \tag{A.11}$$

Observamos que o fato dos potenciais químicos serem diferentes introduz cruzamentos novos entre os operadores, tais como $\psi_k^\dagger \phi_k$ ou $\psi_{-k}^\dagger \phi_{-k}$. Estes cruzamentos não existiam na equação equivalente do modelo antiferromagnético na cadeia AB , Eq. (4.10). Esses cruzamentos, assim como o termo envolvendo o campo magnético, tornam a diagonalização do Hamiltoniano, Eq. (A.11), bem mais complexa.

Introduzindo, agora, a transformação que torna explícita a conservação global do momento:

$$\Delta_k^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_k + \psi_{-k}), \quad \Delta_k^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_k - \psi_{-k}), \quad k > 0 \tag{A.12}$$

$$\Theta_k^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_k + \phi_{-k}), \quad \Theta_k^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_k - \phi_{-k}), \quad k > 0, \tag{A.13}$$

$$\tag{A.14}$$

Com as transformações acima, Eqs. (A.12)-(A.13), obtemos a seguinte forma para o Hamiltoniano, Eq. (A.11):

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{0 < k < \pi} \left((\omega_A + \omega_B)/2 + \frac{gJ_k}{2\sqrt{\omega_A\omega_B}} \right) \Delta_k^{(+)} \Delta_k^{(+)} \\
& + \sum_{0 < k < \pi} \left((\omega_A + \omega_B)/2 - \frac{gJ_k}{2\sqrt{\omega_A\omega_B}} \right) \Theta_k^{(+)} \Theta_k^{(+)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{0 < k < \pi} \frac{gJ_k}{4\sqrt{\omega_A\omega_B}} \left((\Delta_k^{(+)})^2 - (\Theta_k^{(+)})^2 + h.c. \right) \\
& + \frac{1}{2}(\omega_A - \omega_B) \sum_{0 < k < \pi} \left((\Delta_k^{(+)})^\dagger \Theta_k^{(+)} + h.c. \right) \\
& + \sum_{0 < k < \pi} \left((\omega_A + \omega_B)/2 + \frac{gJ_k}{2\sqrt{\omega_A\omega_B}} \right) (\Delta_k^{(-)})^\dagger \Delta_k^{(-)} \\
& + \sum_{0 < k < \pi} \left((\omega_A + \omega_B)/2 - \frac{gJ_k}{2\sqrt{\omega_A\omega_B}} \right) (\Theta_k^{(-)})^\dagger \Theta_k^{(-)} \\
& + \frac{1}{2}(\omega_A - \omega_B) \sum_{0 < k < \pi} \left((\Delta_k^{(-)})^\dagger \Theta_k^{(-)} + h.c. \right) \\
& - \sum_{0 < k < \pi} \frac{gJ_k}{4\sqrt{\omega_A\omega_B}} \left((\Delta_k^{(-)})^2 - (\Theta_k^{(-)})^2 \right) \\
& + \left(\frac{1}{2}(\omega_A + \omega_B) + \frac{gJ_0}{2\sqrt{\omega_A\omega_B}} \right) \psi_0^\dagger \psi_0 + \left(\frac{1}{2}(\omega_A + \omega_B) - \frac{gJ_0}{2\sqrt{\omega_A\omega_B}} \right) \phi_0^\dagger \phi_0 \\
& + \frac{gJ_0}{4\sqrt{\omega_A\omega_B}} (\psi_0^2 - \phi_0^2 + h.c.) + \frac{1}{2}(\omega_A + \omega_B) (\psi_{-\pi}^\dagger \psi_{-\pi} + \phi_{-\pi}^\dagger \phi_{-\pi}) \\
& - \frac{\sqrt{N}}{2\sqrt{2}} \left[(h + h') \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} + (h - h') \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} \right] (\psi_0 + \psi_0^\dagger) \\
& - \frac{\sqrt{N}}{2\sqrt{2}} \left[(h + h') \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} - (h - h') \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} \right] (\phi_0 + \phi_0^\dagger) \\
& + \frac{1}{2}(\omega_A - \omega_B) (\psi_{-\pi}^\dagger \phi_{-\pi} + \phi_{-\pi}^\dagger \psi_{-\pi}) + \frac{N}{2}(\omega_A - \mu_A q_A^2) + \frac{N}{2}(\omega_B - \mu_B q_B^2). \quad (\text{A.15})
\end{aligned}$$

Mais uma vez, o fato dos potenciais químicos serem diferentes introduz cruzamentos novos, tais como $(\Delta_k^{(+)})^\dagger \Theta_k^{(+)}$, com respeito à equação equivalente para o modelo antiferromagnético na cadeia AB , Eq. (4.14)

Com o auxílio dos resultados obtidos para o modelo de transformações de Bogoliubov descrito no Apêndice B.2, apresentamos os operadores bosônicos que diag-

nalizam o Hamiltoniano, Eq. (A.15):

$$\begin{aligned}
 \alpha_{k(+)} = \frac{1}{2} \left(\frac{A_1(k) - 2B_1(k)}{A_1(k) + 2B_1(k)} \right)^{1/4} \left\{ \left[U_k \left(1 + \sqrt{\frac{A_1(k) + 2B_1(k)}{A_1(k) - 2B_1(k)}} \right) \right. \right. \\
 - W_k \left(1 - \sqrt{\frac{A_1(k) + 2B_1(k)}{A_1(k) - 2B_1(k)}} \right) \left. \right] \Delta_k^{(+)} + \left[W_k \left(1 + \sqrt{\frac{A_1(k) + 2B_1(k)}{A_1(k) - 2B_1(k)}} \right) \right. \\
 - U_k \left(1 - \sqrt{\frac{A_1(k) + 2B_1(k)}{A_1(k) - 2B_1(k)}} \right) \left. \right] (\Delta_k^{(+)})^\dagger - V_k \left(1 + \sqrt{\frac{A_1(k) + 2B_1(k)}{A_1(k) - 2B_1(k)}} \right) \Theta_k^{(+)} \\
 \left. + V_k \left(1 - \sqrt{\frac{A_1(k) + 2B_1(k)}{A_1(k) - 2B_1(k)}} \right) \Theta_k^{(+)} \right\},
 \end{aligned} \tag{A.16}$$

$$\begin{aligned}
 \alpha_{k(-)} = \frac{1}{2} \left(\frac{A_1(k) + 2B_1(k)}{A_1(k) - 2B_1(k)} \right)^{1/4} \left\{ \left[U_k \left(1 + \sqrt{\frac{A_1(k) - 2B_1(k)}{A_1(k) + 2B_1(k)}} \right) \right. \right. \\
 + W_k \left(1 - \sqrt{\frac{A_1(k) - 2B_1(k)}{A_1(k) + 2B_1(k)}} \right) \left. \right] \Delta_k^{(-)} + \left[-W_k \left(1 + \sqrt{\frac{A_1(k) - 2B_1(k)}{A_1(k) + 2B_1(k)}} \right) \right. \\
 - U_k \left(1 - \sqrt{\frac{A_1(k) - 2B_1(k)}{A_1(k) + 2B_1(k)}} \right) \left. \right] (\Delta_k^{(-)})^\dagger - V_k \left(1 + \sqrt{\frac{A_1(k) - 2B_1(k)}{A_1(k) + 2B_1(k)}} \right) \Theta_k^{(-)} \\
 \left. + V_k \left(1 - \sqrt{\frac{A_1(k) - 2B_1(k)}{A_1(k) + 2B_1(k)}} \right) \Theta_k^{(-)} \right\},
 \end{aligned} \tag{A.17}$$

$$\begin{aligned}
\beta_k^{(+)} = & \frac{1}{2} \left(\frac{A_2(k) - 2B_2(k)}{A_2(k) + 2B_2(k)} \right)^{1/4} \left\{ V_k \left(1 + \sqrt{\frac{A_2(k) + 2B_2(k)}{A_2(k) - 2B_2(k)}} \right) \Delta_k^{(+)} \right. \\
& - V_k \left(1 - \sqrt{\frac{A_2(k) + 2B_2(k)}{A_2(k) - 2B_2(k)}} \right) (\Delta_k^{(+)})^\dagger + \left[U_k \left(1 + \sqrt{\frac{A_2(k) + 2B_2(k)}{A_2(k) - 2B_2(k)}} \right) \right. \\
& + W_k \left(1 - \sqrt{\frac{A_2(k) + 2B_2(k)}{A_2(k) - 2B_2(k)}} \right) \left. \right] \Theta_k^{(+)} + \left[-W_k \left(1 + \sqrt{\frac{A_2(k) + 2B_2(k)}{A_2(k) - 2B_2(k)}} \right) \right. \\
& \left. - U_k \left(1 - \sqrt{\frac{A_2(k) + 2B_2(k)}{A_2(k) - 2B_2(k)}} \right) \right] (\Theta_k^{(+)})^\dagger \left. \right\},
\end{aligned}
\tag{A.18}$$

$$\begin{aligned}
\beta_k^{(-)} = & \frac{1}{2} \left(\frac{A_2(k) + 2B_2(k)}{A_2(k) - 2B_2(k)} \right)^{1/4} \left\{ V_k \left(1 + \sqrt{\frac{A_2(k) - 2B_2(k)}{A_2(k) + 2B_2(k)}} \right) \Delta_k^{(-)} \right. \\
& - V_k \left(1 - \sqrt{\frac{A_2(k) - 2B_2(k)}{A_2(k) + 2B_2(k)}} \right) (\Delta_k^{(-)})^\dagger + \left[U_k \left(1 + \sqrt{\frac{A_2(k) - 2B_2(k)}{A_2(k) + 2B_2(k)}} \right) \right. \\
& - W_k \left(1 - \sqrt{\frac{A_2(k) - 2B_2(k)}{A_2(k) + 2B_2(k)}} \right) \left. \right] \Theta_k^{(-)} + \left[W_k \left(1 + \sqrt{\frac{A_2(k) - 2B_2(k)}{A_2(k) + 2B_2(k)}} \right) \right. \\
& \left. - U_k \left(1 - \sqrt{\frac{A_2(k) - 2B_2(k)}{A_2(k) + 2B_2(k)}} \right) \right] (\Theta_k^{(-)})^\dagger \left. \right\},
\end{aligned}
\tag{A.19}$$

$$\begin{aligned}
\alpha_0 = & \frac{1}{2} \left(\frac{A_1(0) - 2B_1(0)}{A_1(0) + 2B_1(0)} \right)^{1/4} \left\{ \left[U_0 \left(1 + \sqrt{\frac{A_1(0) + 2B_1(0)}{A_1(0) - 2B_1(0)}} \right) \right. \right. \\
& - W_0 \left(1 - \sqrt{\frac{A_1(0) + 2B_1(0)}{A_1(0) - 2B_1(0)}} \right) \left. \right] \psi_0 + \left[W_0 \left(1 + \sqrt{\frac{A_1(0) + 2B_1(0)}{A_1(0) - 2B_1(0)}} \right) \right. \\
& - U_0 \left(1 - \sqrt{\frac{A_1(0) + 2B_1(0)}{A_1(0) - 2B_1(0)}} \right) \left. \right] \psi_0^\dagger - V_0 \left(1 + \sqrt{\frac{A_1(0) + 2B_1(0)}{A_1(0) - 2B_1(0)}} \right) \phi_0 \\
& + V_0 \left(1 - \sqrt{\frac{A_1(0) + 2B_1(0)}{A_1(0) - 2B_1(0)}} \right) \left. \right\} \\
& + \frac{\sqrt{N}}{2\sqrt{2}} \left(\frac{A_1(0) - 2B_1(0)}{A_1(0) + 2B_1(0)} \right)^{1/4} \left\{ - \left[\frac{(h + h')}{\sqrt{A_1(0)^2 - 4B_1(0)^2}} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} \right. \right. \\
& + \frac{(h - h')}{\sqrt{A_1(0)^2 - 4B_1(0)^2}} \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} \left. \right] (U_0 - W_0) - \left[\frac{(h + h')}{\sqrt{A_1(0)^2 - 4B_1(0)^2}} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} \right. \\
& - \frac{(h - h')}{\sqrt{A_1(0)^2 - 4B_1(0)^2}} \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} \left. \right] V_0 \left. \right\},
\end{aligned}
\tag{A.20}$$

$$\begin{aligned}
\beta_0 = & \frac{1}{2} \left(\frac{A_2(0) - 2B_2(0)}{A_2(0) + 2B_2(0)} \right)^{1/4} \left\{ V_0 \left(1 + \sqrt{\frac{A_2(0) + 2B_2(0)}{A_2(0) - 2B_2(0)}} \right) \psi_0 \right. \\
& - V_0 \left(1 - \sqrt{\frac{A_2(0) + 2B_2(0)}{A_2(0) - 2B_2(0)}} \right) \psi_0^\dagger + \left[U_0 \left(1 + \sqrt{\frac{A_2(0) + 2B_2(0)}{A_2(0) - 2B_2(0)}} \right) \right. \\
& + W_0 \left(1 - \sqrt{\frac{A_2(0) + 2B_2(0)}{A_2(0) - 2B_2(0)}} \right) \left. \right] \phi_0 + \left[-W_0 \left(1 + \sqrt{\frac{A_2(0) + 2B_2(0)}{A_2(0) - 2B_2(0)}} \right) \right. \\
& - U_0 \left(1 - \sqrt{\frac{A_2(0) + 2B_2(0)}{A_2(0) - 2B_2(0)}} \right) \left. \right] \phi_0^\dagger \left. \right\} \\
& + \frac{\sqrt{N}}{2\sqrt{2}} \left(\frac{A_2(0) - 2B_2(0)}{A_2(0) + 2B_2(0)} \right)^{1/4} \left\{ - \left[\frac{(h + h')}{\sqrt{A_2(0)^2 - 4B_2(0)^2}} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} \right. \right. \\
& + \left. \frac{(h - h')}{\sqrt{A_2(0)^2 - 4B_2(0)^2}} \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} \right] V_0 + \left[\frac{(h + h')}{\sqrt{A_2(0)^2 - 4B_2(0)^2}} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} \right. \\
& - \left. \left. \frac{(h - h')}{\sqrt{A_2(0)^2 - 4B_2(0)^2}} \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} \right] (U_0 + W_0) \right\}, \tag{A.21}
\end{aligned}$$

e

$$\alpha_{-\pi} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{-\pi} + \phi_{-\pi}), \quad \beta_{-\pi} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{-\pi} - \phi_{-\pi}), \tag{A.22}$$

onde $A_1(k)$, $A_2(k)$, $B_1(k)$, $B_2(k)$, U_k , V_k e W_k serão explicitados adiante.

Com estes operadores, Eqs. (A.16)-(A.22), podemos diagonalizar o Hamiltoniano,

Eq. (A.15), como:

$$\begin{aligned}
H = & \sum_k \omega_k^{(1)} \alpha_k^\dagger \alpha_k + \sum_k \omega_k^{(2)} \beta_k^\dagger \beta_k - \frac{N}{2} (\mu_A q_A^2 + \mu_B q_B^2) \\
& - \frac{N}{8} \left\{ \left[\frac{(h+h')}{\sqrt{|A_1(0) + 2B_1(0)|}} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} - \frac{(h-h')}{\sqrt{|A_1(0) + 2B_1(0)|}} \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} \right] (U_0 - W_0) \right. \\
& - \left. \left[\frac{(h+h')}{\sqrt{|A_1(0) + 2B_1(0)|}} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} + \frac{(h-h')}{\sqrt{|A_1(0) + 2B_1(0)|}} \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} \right] V_0 \right\}^2 \\
& - \frac{N}{8} \left\{ \left[\frac{(h+h')}{\sqrt{|A_2(0) + 2B_2(0)|}} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} + \frac{(h-h')}{\sqrt{|A_2(0) + 2B_2(0)|}} \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} \right] V_0 \right. \\
& + \left. \left[\frac{(h+h')}{\sqrt{|A_2(0) + 2B_2(0)|}} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} - \frac{(h-h')}{\sqrt{|A_2(0) + 2B_2(0)|}} \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} \right] (U_0 + W_0) \right\}^2, \tag{A.23}
\end{aligned}$$

onde temos que:

$$\alpha_k = \begin{cases} \alpha_k^{(+)}, & k > 0 \\ \alpha_0 = \alpha_0, & k = 0 \\ \alpha_{-k}^{(-)}, & k < 0 \\ \alpha_{-\pi} = \alpha_{-\pi}, & k = -\pi, \end{cases} \quad \beta_k = \begin{cases} \beta_k^{(+)}, & k > 0 \\ \beta_0 = \beta_0, & k = 0 \\ \beta_{-k}^{(-)}, & k < 0 \\ \beta_{-\pi} = \beta_{-\pi}, & k = -\pi, \end{cases} \tag{A.24}$$

$$\omega_k^{(1)} = \begin{cases} \sqrt{A_1(k)^2 - 4B_1(k)^2}, & k \neq -\pi, \\ \omega_A, & k = -\pi \end{cases} \quad \begin{cases} \sqrt{A_2(k)^2 - 4B_2(k)^2}, & k \neq -\pi \\ \omega_B, & k = -\pi, \end{cases} \tag{A.25}$$

$$A_1(k) = \frac{1}{2}(\omega_A + \omega_B) + \frac{gJ_k}{\sqrt{\omega_A \omega_B}} \left[-\frac{1}{2}(1 + R_2(k)^2) + U_k^2[1 + R_2(k)^2(1 - R_1(k)^2)] \right], \tag{A.26}$$

$$A_2(k) = \frac{1}{2}(\omega_A + \omega_B) + \frac{gJ_k}{\sqrt{\omega_A\omega_B}} \left[\frac{1}{2}(1 + R_2(k)^2) - U_k^2[1 + R_2(k)^2(1 - R_1(k)^2)] \right], \quad (\text{A.27})$$

$$B_1(k) = -\frac{R_1(k)}{4}(\omega_A + \omega_B) + \frac{gJ_k R_1(k)}{2\sqrt{\omega_A\omega_B}} \left[\frac{1}{2}R_2(k)^2 - U_k^2[1 + R_2^2(1 - R_1(k)^2)] \right], \quad (\text{A.28})$$

$$B_2(k) = \frac{R_1(k)}{4}(\omega_A + \omega_B) + \frac{gJ_k R_1(k)}{2\sqrt{\omega_A\omega_B}} \left[\frac{1}{2}R_2(k)^2 - U_k^2[1 + R_2^2(1 - R_1(k)^2)] \right], \quad (\text{A.29})$$

$$R_1(k) = \frac{J}{(\mu_A\mu_B)^{1/4}(\sqrt{\mu_A} + \sqrt{\mu_B})} \cos(k/2), \quad R_2(k) = \frac{(\sqrt{\mu_A} - \sqrt{\mu_B})(\mu_A\mu_B)^{1/4}}{J} \sec(k/2), \quad (\text{A.30})$$

$$U_k = \begin{cases} (1 - R_1(k)^2)^{-1/2} \sqrt{(1/2) \left\{ 1 + [1 + R_2(k)^2(1 - R_1(k)^2)]^{-1/2} \right\}}, & |R_1(0)| < 1, \\ (1 - R_1(k)^2)^{-1/2} \sqrt{(1/2) \left\{ 1 + [1 + R_2(k)^2(1 - R_1(k)^2)]^{-1/2} \right\}}, & |R_1(0)| = 1, k \neq 0 \\ R_2(0)/2, & |R_1(0)| = 1, k = 0 \\ (1 - R_1(k)^2)^{-1/2} \sqrt{(1/2) \left\{ 1 + [1 + R_2(k)^2(1 - R_1(k)^2)]^{-1/2} \right\}}, & |R_1(0)| > 1, |k| > |k^*| \\ R_2(k^*)/2, & |R_1(0)| > 1, |k| = k^* \\ \text{sgn}(R_2(k))(R_1(k)^2 - 1)^{-1/2} \times \\ \left\{ (1/2) [(1 + R_2(k)^2(1 - R_1(k)^2))^{-1/2} - 1] \right\}^{1/2}, & |R_1(0)| > 1, |k| < k^*, \end{cases} \quad (\text{A.31})$$

$$V_k = \begin{cases} -\operatorname{sgn}(R_2(k)) \sqrt{(1/2) \left\{ 1 - [1 + R_2(k)^2(1 - R_1(k)^2)]^{-1/2} \right\}}, & |R_1(0)| < 1, \\ -\operatorname{sgn}(R_2(k)) \sqrt{(1/2) \left\{ 1 - [1 + R_2(k)^2(1 - R_1(k)^2)]^{-1/2} \right\}}, & |R_1(0)| = 1, k \neq 0, \\ 1, & |R_1(0)| = 1, k = 0 \\ -\operatorname{sgn}(R_2(k)) \sqrt{(1/2) \left\{ 1 - [1 + R_2(k)^2(1 - R_1(k)^2)]^{-1/2} \right\}}, & |R_1(0)| > 1, |k| > k^*, \\ 1, & |R_1(0)| > 1, |k| = k^* \\ \sqrt{(1/2) \left\{ 1 + [1 + R_2(k)^2(1 - R_1(k)^2)] \right\}}, & |R_1(0)| > 1, |k| < k^*, \end{cases} \quad (\text{A.32})$$

$$W_k = \begin{cases} R_1(k)(1 - R_1(k)^2)^{-1/2} \sqrt{\left\{ 1 + [1 + R_2(k)^2(1 - R_1(k)^2)]^{-1/2} \right\}}, & |R_1(0)| < 1 \\ R_1(k)(1 - R_1(k)^2)^{-1/2} \sqrt{\left\{ 1 + [1 + R_2(k)^2(1 - R_1(k)^2)]^{-1/2} \right\}}, & |R_1(0)| = 1, k \neq 0 \\ R_1(0)R_2(0)/2, & |R_1(0)| = 1, k = 0, \\ R_1(k)(1 - R_1(k)^2)^{-1/2} \sqrt{\left\{ 1 + [1 + R_2(k)^2(1 - R_1(k)^2)]^{-1/2} \right\}}, & |R_1(0)| > 1, |k| > k^* \\ R_1(k^*)R_2(k^*)/2, & |R_1(0)| > 1, |k| = k^* \\ \operatorname{sgn}(R_2(k))R_1(k)(R_1(k)^2 - 1)^{-1/2} \times \\ \sqrt{(1/2) \left\{ [1 + R_2(k)^2(1 - R_1(k)^2)] - 1 \right\}}, & |R_1(0)| > 1, |k| < k^*, \end{cases} \quad (\text{A.33})$$

onde $k^* = 2 \arccos(1/R_1(0))$.

Invertendo as transformações que diagonalizaram o Hamiltoniano, Eqs. (A.8), (A.10), (A.12), (A.13), (A.16), (A.17), (A.18), (A.19), (A.20), (A.21), (A.22) e substituindo o resultado nas Eqs. (A.4) e (A.5), obtemos as seguintes fórmulas para

as variáveis de spin:

$$\begin{aligned}
S_{jA} = & \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} \sum_{0 < k < \pi} \left(\frac{A_1(k) - 2B_1(k)}{A_1(k) + 2B_1(k)} \right)^{1/4} (U_k - V_k - W_k) \cos(kj) \left(\alpha_k^{(+)} + (\alpha_k^{(+)})^\dagger \right) \\
& + \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} \sum_{0 < k < \pi} \left(\frac{A_2(k) - 2B_2(k)}{A_2(k) + 2B_2(k)} \right)^{1/4} (U_k + V_k + W_k) \cos(kj) \left(\beta_k^{(+)} + (\beta_k^{(+)})^\dagger \right) \\
& + \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} \sum_{0 < k < \pi} \left(\frac{A_1(k) - 2B_1(k)}{A_1(k) + 2B_1(k)} \right)^{1/4} (U_k - V_k - W_k) i \sin(kj) \left(\alpha_k^{(-)} - (\alpha_k^{(-)})^\dagger \right) \\
& + \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} \sum_{0 < k < \pi} \left(\frac{A_2(k) - 2B_2(k)}{A_2(k) + 2B_2(k)} \right)^{1/4} (U_k + V_k + W_k) i \sin(kj) \left(\beta_k^{(-)} - (\beta_k^{(-)})^\dagger \right) \\
& + \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} \left(\frac{A_1(0) - 2B_1(0)}{A_1(0) + 2B_1(0)} \right)^{1/4} (U_0 - V_0 - W_0) \left(\alpha_0 + \alpha_0^\dagger \right) \\
& + \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} \left(\frac{A_2(0) - 2B_2(0)}{A_2(0) + 2B_2(0)} \right)^{1/4} (U_0 + V_0 + W_0) \left(\beta_0 + \beta_0^\dagger \right) \\
& + \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} (-1)^j (\alpha_{-\pi} + \alpha_{-\pi}^\dagger) \\
& + \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} (U_0 - V_0 - W_0) \left[\frac{(h + h')}{|A_1(0) + 2B_1(0)|} (U_0 - V_0 - W_0) \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} \right. \\
& \left. + \frac{(h - h')}{|A_1(0) + 2B_1(0)|} (U_0 + V_0 - W_0) \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} \right] \\
& + \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} (U_0 + V_0 + W_0) \left[\frac{(h + h')}{|A_2(0) + 2B_2(0)|} (U_0 + V_0 + W_0) \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} \right. \\
& \left. + \frac{(h - h')}{|A_2(0) + 2B_2(0)|} (-U_0 + V_0 - W_0) \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} \right],
\end{aligned}
\tag{A.34}$$

e

$$\begin{aligned}
S_{jB} = & \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} \left\{ \sum_{0 < k < \pi} \left(\frac{A_1(k) - 2B_1(k)}{A_1(k) + 2B_1(k)} \right)^{1/4} \times \right. \\
& (U_k + V_k - W_k) \cos(k(j + \frac{1}{2})) (\alpha_k^{(+)} + (\alpha_k^{(+)})^\dagger) \\
& + \sum_{0 < k < \pi} \left(\frac{A_2(k) - 2B_2(k)}{A_2(k) + 2B_2(k)} \right)^{1/4} (-U_k + V_k - W_k) \cos(k(j + \frac{1}{2})) (\beta_k^{(+)} + (\beta_k^{(+)})^\dagger) \\
& + \sum_{0 < k < \pi} \left(\frac{A_1(k) - 2B_1(k)}{A_1(k) + 2B_1(k)} \right)^{1/4} (U_k + V_k - W_k) i \sin(k(j + \frac{1}{2})) (\alpha_k^{(-)} - (\alpha_k^{(-)})^\dagger) \\
& \left. \sum_{0 < k < \pi} \left(\frac{A_2(k) - 2B_2(k)}{A_2(k) + 2B_2(k)} \right)^{1/4} (-U_k + V_k - W_k) i \sin(k(j + \frac{1}{2})) (\beta_k^{(-)} - (\beta_k^{(-)})^\dagger) \right\} \\
& + \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} \left(\frac{A_1(0) - 2B_1(0)}{A_1(0) + 2B_1(0)} \right)^{1/4} (U_0 + V_0 - W_0) (\alpha_0 + \alpha_0^\dagger) \\
& + \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} \left(\frac{A_2(0) - 2B_2(0)}{A_2(0) + 2B_2(0)} \right)^{1/4} (-U_0 + V_0 - W_0) (\beta_0 + \beta_0^\dagger) \\
& + \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} (-1)^j (\beta_{-\pi} + \beta_{-\pi}^\dagger) \\
& + \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} (-U_0 + V_0 - W_0) \left[\frac{(h + h')}{|A_2(0) + 2B_2(0)|} (U_0 + V_0 + W_0) \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} \right. \\
& \left. + \frac{(h - h')}{|A_2(0) + 2B_2(0)|} (-U_0 + V_0 - W_0) \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} \right] \\
& + \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} (U_0 + V_0 - W_0) \left[\frac{(h + h')}{|A_1(0) + 2B_1(0)|} (U_0 - V_0 - W_0) \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} \right. \\
& \left. + \frac{(h - h')}{|A_1(0) + 2B_1(0)|} (U_0 + V_0 - W_0) \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} \right].
\end{aligned}
\tag{A.35}$$

Utilizando as Eqs. (A.34) e (A.35) e as médias térmicas de um operador:

$$\langle \alpha_k \rangle = \langle \beta_k \rangle = 0, \quad (\text{A.36})$$

$$\langle \alpha_k^\dagger \rangle = \langle \beta_k^\dagger \rangle = 0 \quad (\text{A.37})$$

e de dois operadores:

$$\langle \alpha_k \alpha_p \rangle = \langle \beta_k \beta_p \rangle = 0, \quad (\text{A.38})$$

$$\langle \alpha_k^\dagger \alpha_p \rangle = \frac{\delta_{kp}}{e^{\beta\omega_k^{(1)}} - 1}, \quad \langle \beta_k^\dagger \beta_p \rangle = \frac{\delta_{kp}}{e^{\beta\omega_k^{(2)}} - 1}, \quad (\text{A.39})$$

$$\langle \alpha_k^\dagger \alpha_p^\dagger \rangle = \langle \beta_k^\dagger \beta_p^\dagger \rangle = 0, \quad (\text{A.40})$$

$$\langle \alpha_k \alpha_p^\dagger \rangle = \frac{e^{\beta\omega_k^{(1)}} \delta_{kp}}{e^{\beta\omega_k^{(1)}} - 1}, \quad \langle \beta_k \beta_p^\dagger \rangle = \frac{e^{\beta\omega_k^{(2)}} \delta_{kp}}{e^{\beta\omega_k^{(2)}} - 1}, \quad (\text{A.41})$$

podemos obter os valores locais médios do spin e as funções de correlação. O resultado obtido para os valores locais médios de spin é:

$$\begin{aligned} \langle S_{iA} \rangle = & \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} (U_0 - V_0 - W_0) \left[\frac{(h + h')}{|A_1(0) + 2B_1(0)|} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} (U_0 - V_0 - W_0) \right. \\ & + \left. \frac{(h - h')}{|A_1(0) + 2B_1(0)|} \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} (U_0 + V_0 - W_0) \right] \\ & + \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} (U_0 + V_0 + W_0) \left[\frac{(h + h')}{|A_2(0) + 2B_2(0)|} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} (U_0 + V_0 + W_0) \right. \\ & + \left. \frac{(h - h')}{|A_2(0) + 2B_2(0)|} \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} (-U_0 + V_0 + W_0) \right], \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

$$\begin{aligned}
\langle S_{iB} \rangle = & \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} (-U_0 + V_0 - W_0) \left[\frac{(h + h')}{|A_1(0) + 2B_1(0)|} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} (U_0 + V_0 + W_0) \right. \\
& + \left. \frac{(h - h')}{|A_1(0) + 2B_1(0)|} \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} (-U_0 + V_0 - W_0) \right] \\
& + \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} (U_0 + V_0 - W_0) \left[\frac{(h + h')}{|A_2(0) + 2B_2(0)|} \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/4} (U_0 - V_0 - W_0) \right. \\
& + \left. \frac{(h - h')}{|A_2(0) + 2B_2(0)|} \left(\frac{g}{2\mu_B} \right)^{1/4} (U_0 + V_0 - W_0) \right].
\end{aligned} \tag{A.43}$$

Os valores dos spins locais podem ser obtidos através dos valores dos potenciais químicos μ_A e μ_B , que, por sua vez, são obtidos através da condição biesférica, Eq. (A.3). Para tal fim, obtemos a seguinte formulação para as funções de correlação a partir das médias térmicas para os operadores de criação e destruição:

$$\begin{aligned}
\langle S_{iA} S_{jA} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jA} \rangle = & \\
\frac{1}{N} \sum_{k \neq -\pi} \frac{g}{2\omega_A} \sqrt{\frac{A_1(k) - 2B_1(k)}{A_1(k) + 2B_1(k)}} (U_k - V_k - W_k)^2 \coth \left(\frac{\beta\omega_k^{(1)}}{2} \right) \cos(k(j - i)) & \\
+ \frac{1}{N} \sum_{k \neq -\pi} \frac{g}{2\omega_B} \sqrt{\frac{A_2(k) - 2B_2(k)}{A_2(k) + 2B_2(k)}} (U_k + V_k + W_k)^2 \coth \left(\frac{\beta\omega_k^{(2)}}{2} \right) \cos(k(j - i)) & \\
+ \frac{2}{N} \frac{g}{2\omega_A} \coth \left(\frac{\beta\omega_A}{2} \right) (-1)^{i+j}, &
\end{aligned} \tag{A.44}$$

$$\begin{aligned}
\langle S_{iB} S_{jB} \rangle - \langle S_{iB} \rangle \langle S_{jB} \rangle = & \\
\frac{1}{N} \sum_{k \neq -\pi} \frac{g}{2\omega_A} \sqrt{\frac{A_1(k) - 2B_1(k)}{A_1(k) + 2B_1(k)}} (U_k + V_k - W_k)^2 \coth \left(\frac{\beta\omega_k^{(1)}}{2} \right) \cos(k(j-i)) & \\
+ \frac{1}{N} \sum_{k \neq -\pi} \frac{g}{2\omega_B} \sqrt{\frac{A_2(k) - 2B_2(k)}{A_2(k) + 2B_2(k)}} (-U_k + V_k - W_k)^2 \coth \left(\frac{\beta\omega_k^{(2)}}{2} \right) \cos(k(j-i)) & \\
+ \frac{2}{N} \frac{g}{2\omega_B} \coth \left(\frac{\beta\omega_B}{2} \right) (-1)^{i+j}, &
\end{aligned}
\tag{A.45}$$

e

$$\begin{aligned}
\langle S_{iA} S_{jB} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jB} \rangle = & \\
\frac{1}{N} \sum_{k \neq -\pi} \frac{g}{2\omega_A} \sqrt{\frac{A_1(k) - 2B_1(k)}{A_1(k) + 2B_1(k)}} \coth \left(\frac{\beta\omega_k^{(1)}}{2} \right) [(U_k - W_k)^2 - V_k^2] \cos(k(j-i+1/2)) & \\
- \frac{1}{N} \sum_{k \neq -\pi} \frac{g}{2\omega_B} \sqrt{\frac{A_2(k) - 2B_2(k)}{A_2(k) + 2B_2(k)}} \coth \left(\frac{\beta\omega_k^{(2)}}{2} \right) [(U_k + W_k)^2 - V_k^2] \cos(k(j-i+1/2)). &
\end{aligned}
\tag{A.46}$$

Observando as funções de correlação acima vemos que existe a possibilidade (como no caso da cadeia linear antiferromagnética de spin $S = 1/2$ discutida no capítulo 4) de uma correlação negativa entre os spins dos sítios A e B . Esta correlação negativa confirma a possibilidade de uma região de caráter antiferromagnético. Estas propostas podem ser obtidas através da solução numérica da condição biesférica $\sum_i \langle S_{iA}^2 \rangle = (N/2)q_A^2$, $\sum_i \langle S_{iB}^2 \rangle = (N/2)q_B^2$. Desta forma, temos o seguinte sistema

de equações não-lineares:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \sum_{k \neq -\pi} \frac{g}{2\omega_A} \sqrt{\frac{A_1(k) - 2B_1(k)}{A_1(k) + 2B_1(k)}} (U_k - V_k - W_k)^2 \coth\left(\frac{\beta\omega_k^{(1)}}{2}\right) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k \neq -\pi} \frac{g}{2\omega_B} \sqrt{\frac{A_2(k) - 2B_2(k)}{A_2(k) + 2B_2(k)}} (U_k + V_k + W_k)^2 \coth\left(\frac{\beta\omega_k^{(2)}}{2}\right) + \frac{g}{2\omega_A} \coth\left(\frac{\beta\omega_A}{2}\right) = \\
& \frac{N}{2}(q_A)^2
\end{aligned} \tag{A.47}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \sum_{k \neq -\pi} \frac{g}{2\omega_A} \sqrt{\frac{A_1(k) - 2B_1(k)}{A_1(k) + 2B_1(k)}} (U_k + V_k - W_k)^2 \coth\left(\frac{\beta\omega_k^{(1)}}{2}\right) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k \neq -\pi} \frac{g}{2\omega_B} \sqrt{\frac{A_2(k) - 2B_2(k)}{A_2(k) + 2B_2(k)}} (-U_k + V_k - W_k)^2 \coth\left(\frac{\beta\omega_k^{(2)}}{2}\right) + \frac{g}{2\omega_A} \coth\left(\frac{\beta\omega_B}{2}\right) = \\
& \frac{N}{2}(q_B)^2.
\end{aligned} \tag{A.48}$$

Observando os resultados Eq. (A.42)-(A.46), vemos que no caso de uma cadeia de spin alternados q_A e q_B pode ocorrer um diagrama de fases mais rico, onde existe a possibilidade de uma região antiferromagnética, com $\langle S_{iA} \rangle > 0$ e $\langle S_{iB} \rangle < 0$ para $q_A = q_B$, ou ferrimagnética quando $q_A \neq q_B$. De fato, nas ausências de campos magnéticos *staggered* e uniforme, $h' = h = 0$, tais possibilidades se concretizariam se $A_1(0) = -2B_1(0)$ e/ou $A_2(0) = -2B_2(0)$ nas Eqs. (A.42) e (A.43). No entanto, o entendimento do modelo é prejudicado pela complexidade matemática apresentada, tanto do ponto de vista analítico (integração sobre os momentos k), quanto do ponto de vista numérico (resolução de sistema de equações não-lineares). Para um limite específico, contudo, é possível entender um pouco da física do modelo.

Considere a situação especial em que os dois potenciais químicos são iguais, $\mu_A = \mu_B > J$. A partir das Eqs. (A.30) e (A.32) temos que $R_2(k) = 0$, $R_1(0) < 1$ e

portanto $V_k = 0$. Substituindo $V_k = 0$ nas Eqs. (A.47) e (A.48), obtemos que $(q_A)^2 = (q_B)^2$ e portanto o sistema de equações não-lineares se reduz a uma única equação:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{k \neq -\pi} \frac{g}{2\omega_A} \sqrt{\frac{A_1(k) - 2B_1(k)}{A_1(k) + 2B_1(k)}} (U_k - W_k)^2 \coth \left(\frac{\beta\omega_k^{(1)}}{2} \right) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{k \neq -\pi} \frac{g}{2\omega_B} \sqrt{\frac{A_2(k) - 2B_2(k)}{A_2(k) + 2B_2(k)}} (U_k + W_k)^2 \coth \left(\frac{\beta\omega_k^{(2)}}{2} \right) + \frac{g}{2\omega_A} \coth \left(\frac{\beta\omega_A}{2} \right) = \\ & \frac{N}{2} (q_A)^2 \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

Desta forma as funções de correlação, a magnetização e os spins locais assumem uma forma semelhante às equações equivalentes da cadeia antiferromagnética AB com um potencial químico [Eqs. (4.32)-(4.34) e (4.47)-(4.49)]. Os resultados são:

$$\langle S_{iA} \rangle = 2 \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/2} \frac{(U_0 - W_0)^2}{|A_1(0) + 2B_1(0)|} h + 2 \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/2} \frac{(U_0 + W_0)^2}{|A_2(0) + 2B_2(0)|} h' \quad (\text{A.50})$$

$$\langle S_{iB} \rangle = 2 \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/2} \frac{(U_0 - W_0)^2}{|A_1(0) + 2B_1(0)|} h - 2 \left(\frac{g}{2\mu_A} \right)^{1/2} \frac{(U_0 + W_0)^2}{|A_2(0) + 2B_2(0)|} h' \quad (\text{A.51})$$

$$\langle S_{iA} S_{jA} \rangle - \langle S_{iA} \rangle \langle S_{jA} \rangle = \langle S_{iB} S_{jB} \rangle - \langle S_{iB} \rangle \langle S_{jB} \rangle. \quad (\text{A.52})$$

Em tal situação específica, à semelhança do capítulo 4, a ordem de longo alcance antiferromagnética ($q_A = q_B$, $\mu_A = \mu_B$) ocorre a $g = T = h = 0$ induzida pela presença do campo *staggered*. Entretanto, devido às dificuldades matemáticas, fica ainda em aberto a questão de se determinar, por exemplo, se as Eqs. (A.50) e (A.51) são exatamente equivalentes às Eqs. (4.32) e (4.33) para o modelo esférico AB de spin 1/2 [note que o sinal de menos da Eq. (A.51) é devido ao fato de que, ao

contrário do capítulo 4, neste apêndice, favorecemos magneticamente os spins nos sítios B : compare os hamiltonianos, Eqs. (4.1) e (A.1)].

Apêndice B

Transformações de Bogoliubov

B.1 Modelos tipo A

B.1.1 Modelo A1

Considere o seguinte operador:

$$(1 + \tau)b^\dagger b + \frac{\tau}{2}(b^2 + (b^\dagger)^2), \quad (\text{B.1})$$

onde $\tau > 0$, e o operador b obedece relações de comutação canônicas:

$$[b, b^\dagger] = 1. \quad (\text{B.2})$$

Considere, agora, a seguinte transformação:

$$b = Uc - Vc^\dagger, \quad (\text{B.3})$$

$$b^\dagger = -Vc + Uc^\dagger. \quad (\text{B.4})$$

Para que o operador c também obedeça regras de comutação canônicas, Eq. (B.2), basta impor a seguinte restrição a U e V :

$$U^2 - V^2 = 1. \quad (\text{B.5})$$

Por outro lado, para que o operador, Eq. (B.1), se torne diagonal no operador c , basta impor a seguinte restrição a U e V :

$$\tau(U^2 + V^2) = (1 + \tau)2UV. \quad (\text{B.6})$$

As restrições, Eqs. (B.5) e (B.6), formam um sistema de equações que podem ser resolvidas introduzindo as variáveis:

$$U = a + b, \quad (\text{B.7})$$

$$V = a - b. \quad (\text{B.8})$$

Substituindo as variáveis a e b nas Eqs. (B.5) e (B.6), obtemos as equações:

$$4ab = 1, \quad (\text{B.9})$$

$$\tau(a^2 + b^2) = (1 + \tau)(a^2 - b^2), \quad (\text{B.10})$$

cuja solução é:

$$a = \frac{1}{2}(1 + 2\tau)^{1/4}, \quad (\text{B.11})$$

$$b = \frac{1}{2}(1 + 2\tau)^{-1/4}. \quad (\text{B.12})$$

Finalmente, podemos escrever o operador b em função do operador c :

$$b = \frac{1}{2}(1 + 2\tau)^{1/4} \left[\left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 + 2\tau}}\right)c - \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + 2\tau}}\right)c^\dagger \right], \quad (\text{B.13})$$

e o operador c em função de b :

$$c = \frac{1}{2}(1 + 2\tau)^{1/4} \left[\left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 + 2\tau}}\right)b + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + 2\tau}}\right)b^\dagger \right]. \quad (\text{B.14})$$

Em particular note que as seguintes relações são obedecidas:

$$b + b^\dagger = (1 + 2\tau)^{-1/4}(c + c^\dagger), \quad b - b^\dagger = (1 + 2\tau)^{1/4}(c - c^\dagger). \quad (\text{B.15})$$

B.1.2 Modelo A2

Considere o seguinte operador:

$$(1 + \tau)b^\dagger b - \frac{\tau}{2}(b^2 + (b^\dagger)^2), \quad (\text{B.16})$$

onde $\tau > 0$, e o operador b obedece relações de comutação canônicas:

$$[b, b^\dagger] = 1. \quad (\text{B.17})$$

Considere, agora, a seguinte transformação:

$$b = Uc + Vc^\dagger, \quad (\text{B.18})$$

$$b^\dagger = Uc^\dagger + Vc. \quad (\text{B.19})$$

Para que o operador c também obedeça regras de comutação canônicas, Eq.(B.17), basta impor a seguinte restrição a U e V :

$$U^2 - V^2 = 1. \quad (\text{B.20})$$

Por outro lado, para que o operador, Eq. (B.16), se torne diagonal no operador c , basta impor a seguinte restrição a U e V :

$$\tau(U^2 + V^2) = (1 + \tau)2UV. \quad (\text{B.21})$$

As restrições, Eqs. (B.20) e (B.21), formam um sistema de equações que podem ser resolvidas introduzindo as variáveis:

$$U = a + b, \quad (\text{B.22})$$

$$V = a - b. \quad (\text{B.23})$$

Substituindo as variáveis a e b nas Eqs. (B.20) e (B.21), obtemos as equações:

$$4ab = 1, \quad (\text{B.24})$$

$$\tau(a^2 + b^2) = (1 + \tau)(a^2 - b^2), \quad (\text{B.25})$$

cuja solução é:

$$a = \frac{1}{2}(1 + 2\tau)^{1/4}, \quad (\text{B.26})$$

$$b = \frac{1}{2}(1 + 2\tau)^{-1/4}. \quad (\text{B.27})$$

Finalmente, podemos escrever o operador b em função do operador c :

$$b = \frac{1}{2}(1 + 2\tau)^{1/4} \left[\left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 + 2\tau}}\right)c + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + 2\tau}}\right)c^\dagger \right], \quad (\text{B.28})$$

e o operador c em função de b :

$$c = \frac{1}{2}(1 + 2\tau)^{1/4} \left[\left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 + 2\tau}}\right)b - \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + 2\tau}}\right)b^\dagger \right]. \quad (\text{B.29})$$

Em particular note que as seguintes relações são obedecidas:

$$b + b^\dagger = (1 + 2\tau)^{1/4}(c + c^\dagger), \quad b - b^\dagger = (1 + 2\tau)^{-1/4}(c - c^\dagger). \quad (\text{B.30})$$

B.2 Modelo tipo B

Considere o seguinte operador:

$$h = \alpha c^\dagger c + \beta d^\dagger d + \epsilon(c^\dagger d + d^\dagger c) + \gamma(c^2 + (c^\dagger)^2 - d^2 - (d^\dagger)^2), \quad (\text{B.31})$$

onde $[c, c^\dagger] = [d, d^\dagger] = 1$ e $[\dots, \dots]$ indica comutador de dois operadores, ou seja, os operadores c e d são bósons. Defina a seguinte transformação:

$$\begin{cases} c = Up + Vq - Wp^\dagger, \\ d = -Vp + Uq + Wq^\dagger. \end{cases} \quad \begin{cases} c^\dagger = -Wp + Up^\dagger + Vq^\dagger, \\ d^\dagger = Wq - Vp^\dagger + Uq^\dagger. \end{cases} \quad (\text{B.32})$$

A transformação acima é canônica somente se a condição:

$$U^2 + V^2 - W^2 = 1 \quad (\text{B.33})$$

for obedecida, e para este caso os operadores p e q são bósons. Substituindo a transformação Eq. (B.32) em cada um dos termos do operador Eq. (B.31), obtemos:

$$\begin{aligned} c^\dagger c &= W^2 + (U^2 + W^2)p^\dagger + V^2q^\dagger q \\ &+ UV(p^\dagger q + h.c.) - UW(p^2 + h.c.) - VW(pq + h.c.) \end{aligned} \quad (\text{B.34})$$

$$\begin{aligned} d^\dagger d &= W^2 + V^2p^\dagger p + (U^2 + W^2)q^\dagger q \\ &- UV(p^\dagger q + h.c.) - VW(pq + h.c.) + WU(q^2 + h.c.) \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

$$\begin{aligned} c^\dagger d + h.c. &= -2UVp^\dagger p + 2UVq^\dagger q + WV(p^2 + q^2 + h.c.) \\ &+ (U^2 - V^2 - W^2)(p^\dagger q + h.c.) \end{aligned} \quad (\text{B.36})$$

$$\begin{aligned} c^2 + h.c. &= -2UW - 4UWp^\dagger p + (U^2 + W^2)(p^2 + h.c.) + V^2(q^2 + h.c.) \\ &+ 2UV(pq + h.c.) - 2VW(p^\dagger q + h.c.) \end{aligned} \quad (\text{B.37})$$

$$\begin{aligned} d^2 + h.c. &= 2UW + 4UWq^\dagger q + (U^2 + W^2)(q^2 + h.c.) + V^2(p^2 + h.c.) \\ &- 2UV(pq + h.c.) - 2VW(p^\dagger q + h.c.) \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

$$\begin{aligned} c^\dagger d + h.c. &= (U^2 - V^2 - W^2)(p^\dagger q + h.c.) - 2UVp^\dagger p \\ &+ 2UVq^\dagger q + UW(p^2 + h.c.) + VW(q^2 + h.c.). \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

Substituindo os resultados Eqs. (B.34)-(B.38) obtemos a seguinte forma reduzida do operador Eq. (B.31):

$$h = A_1p^\dagger p + B_1(p^2 + h.c.) + A_2(q^\dagger q) + B_2(q^2 + h.c.), \quad (\text{B.40})$$

onde

$$A_1 = \alpha(U^2 + W^2) + \beta V^2 - 2\epsilon UV - 4\gamma UW \quad (\text{B.41})$$

$$A_2 = \alpha V^2 + \beta(U^2 + W^2) + 2\epsilon UV - 4\gamma UW \quad (\text{B.42})$$

$$B_1 = -\alpha UW + \epsilon WV + \gamma(U^2 - V^2 + W^2) \quad (\text{B.43})$$

$$B_2 = \beta UW + \epsilon WV - \gamma(U^2 - V^2 + W^2), \quad (\text{B.44})$$

e as condições:

$$(\alpha - \beta)UV + \epsilon(U^2 - V^2 - W^2) = 0, \quad (\text{B.45})$$

$$-(\alpha + \beta)VW + 4\gamma UV = 0, \quad (\text{B.46})$$

são necessárias para que o operador Eq. (B.40) não tenha termos cruzados entre os operadores p e q .

As condições Eqs. (B.33), (B.45) e (B.46) formam um sistema de equações para as variáveis U , V e W que possui a seguinte solução:

$$U = \frac{1}{\sqrt{1 - R_1^2}} \sqrt{(1/2) \left(1 + (1 + R_2^2(1 - R_1^2))^{-1/2} \right)}, \quad |R_1| < 1 \quad (\text{B.47})$$

$$V = -\text{sgn}(R_2) \sqrt{(1/2) \left(1 + (1 - R_2^2(1 - R_1^2))^{-1/2} \right)}, \quad |R_1| < 1 \quad (\text{B.48})$$

$$W = \frac{R_1}{\sqrt{1 - R_1^2}} \sqrt{(1/2) \left(1 + (1 + R_2^2(1 - R_1^2))^{-1/2} \right)}, \quad |R_1| < 1, \quad (\text{B.49})$$

onde $R_1 = 4\gamma/(\alpha + \beta)$, $R_2 = 2\epsilon/(\alpha - \beta)$, $\text{sgn}(x) = x/|x|$,

$$U = \frac{\text{sgn}(R_2)}{\sqrt{R_1^2 - 1}} \sqrt{(1/2) \left((1 + R_2^2(1 - R_1^2))^{-1/2} - 1 \right)}, \quad |R_1| > 1 \quad (\text{B.50})$$

$$V = -\sqrt{(1/2) \left((1 + R_2^2(1 - R_1^2) + 1)^{-1/2} \right)}, \quad |R_1| < 1 \quad (\text{B.51})$$

$$W = \frac{\text{sgn}(R_2)R_1}{\sqrt{R_1^2 - 1}} \sqrt{(1/2) \left((1 + R_2^2(1 - R_1^2))^{-1/2} - 1 \right)}, \quad |R_1| > 1, \quad (\text{B.52})$$

e

$$U = R_2/2, \quad V = 1, \quad w = (R_1 R_2)/2, \quad |R_1| = 1. \quad (\text{B.53})$$

Usando as Eqs. (B.47)-(B.53) podemos simplificar as expressões das Eqs. (B.41)-(B.44) como:

$$A_1 = \frac{1}{2}(\alpha + \beta) + \left[-\frac{1}{2}(1 + R_2^2) + (1 + R_2^2(1 - R_1^2))U^2 \right] (\alpha - \beta) \quad (\text{B.54})$$

$$A_2 = \frac{1}{2}(\alpha + \beta) + \left[\frac{1}{2}(1 + R_2^2) - (1 + R_2^2(1 - R_1^2))U^2 \right] (\alpha - \beta) \quad (\text{B.55})$$

$$B_1 = -\frac{1}{4}(\alpha + \beta)R_1 + \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2}R_2^2 - (1 + R_2^2(1 - R_1^2))U^2 \right] (\alpha - \beta)R_1 \quad (\text{B.56})$$

$$B_2 = \frac{1}{4}(\alpha + \beta)R_1 + \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2}R_2^2 - (1 + R_2^2(1 - R_1^2))U^2 \right] (\alpha - \beta)R_1, \quad (\text{B.57})$$

Note em particular que fazendo $\gamma \rightarrow -\gamma$, temos que $A_1 \rightarrow A_1$, $B_1 \rightarrow -B_1$, $A_2 \rightarrow A_2$ e $B_2 \rightarrow -B_2$.

Considere agora o seguinte modelo de operador auxiliar:

$$At^\dagger t + B(t^2 + h.c.), \quad (\text{B.58})$$

que pode ser diagonalizado pela seguinte transformação canônica:

$$s = Lt + Mt^\dagger, \quad t = Lt - Mt^\dagger, \quad (\text{B.59})$$

onde

$$L = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{A - 2B}{A + 2B} \right)^{1/4} + \left(\frac{A - 2B}{A + 2B} \right)^{-1/4} \right], \quad (\text{B.60})$$

$$M = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{A - 2B}{A + 2B} \right)^{1/4} - \left(\frac{A - 2B}{A + 2B} \right)^{-1/4} \right]. \quad (\text{B.61})$$

$$(\text{B.62})$$

Com as tranformações acima, Eqs. (B.59)-(B.61), o operador definido pela Eq. (B.58) assume a seguinte forma diagonal:

$$-\frac{1}{2}A + \sqrt{A^2 - 4B^2}(s^\dagger s + 1/2). \quad (\text{B.63})$$

Com o uso do operador auxiliar, Eqs. (B.58) e (B.63), e das transformações Eqs. (B.59)-(B.61) no operador, Eq. (B.40), obtemos a forma diagonal deste operador:

$$h = \sqrt{A_1^2 - 4B_1^2}((s_1)^\dagger s_1 + 1/2) + \sqrt{A_2^2 - 4B_2^2}((s_2)^\dagger s_2 + 1/2) - \frac{1}{2}(A_1 + A_2), \quad (\text{B.64})$$

onde

$$\begin{aligned}
 s_1 = & \frac{1}{2} \left(\frac{A_1 - 2B_1}{A_1 + 2B_1} \right)^{1/4} \left\{ \left[U \left(1 + \sqrt{\frac{A_1 + 2B_1}{A_1 - 2B_1}} \right) - W \left(1 - \sqrt{\frac{A_1 + 2B_1}{A_1 - 2B_1}} \right) \right] c \right. \\
 & + \left[W \left(1 + \sqrt{\frac{A_1 + 2B_1}{A_1 - 2B_1}} \right) - U \left(1 - \sqrt{\frac{A_1 + 2B_1}{A_1 - 2B_1}} \right) \right] c^\dagger \\
 & \left. - V \left(1 + \sqrt{\frac{A_1 + 2B_1}{A_1 - 2B_1}} \right) d + V \left(1 - \sqrt{\frac{A_1 + 2B_1}{A_1 - 2B_1}} \right) d^\dagger \right\},
 \end{aligned}
 \tag{B.65}$$

e

$$\begin{aligned}
 s_2 = & \frac{1}{2} \left(\frac{A_2 - 2B_2}{A_2 + 2B_2} \right)^{1/4} \left\{ V \left(1 + \sqrt{\frac{A_2 + 2B_2}{A_2 - 2B_2}} \right) c - V \left(1 - \sqrt{\frac{A_2 + 2B_2}{A_2 - 2B_2}} \right) c^\dagger \right. \\
 & + \left[U \left(1 + \sqrt{\frac{A_2 + 2B_2}{A_2 - 2B_2}} \right) + W \left(1 - \sqrt{\frac{A_2 + 2B_2}{A_2 - 2B_2}} \right) \right] d \\
 & \left. \left[-W \left(1 + \sqrt{\frac{A_2 + 2B_2}{A_2 - 2B_2}} \right) - U \left(1 - \sqrt{\frac{A_2 + 2B_2}{A_2 - 2B_2}} \right) \right] d^\dagger \right\}.
 \end{aligned}
 \tag{B.66}$$

Em particular note que as seguintes relações são obedecidas:

$$\begin{aligned} c + c^\dagger &= (U - W) \left(\frac{A_1 - 2B_1}{A_1 + 2B_1} \right)^{1/4} (r_1 + (r_1)^\dagger) \\ &+ V \left(\frac{A_2 - 2B_2}{A_2 + 2B_2} \right)^{1/4} (r_2 + (r_2)^\dagger), \end{aligned} \quad (\text{B.67})$$

$$\begin{aligned} d + d^\dagger &= -V \left(\frac{A_1 - 2B_1}{A_1 + 2B_1} \right)^{1/4} (r_1 + (r_1)^\dagger) \\ &+ (U + W) \left(\frac{A_2 - 2B_2}{A_2 + 2B_2} \right)^{1/4} (r_2 + (r_2)^\dagger), \end{aligned} \quad (\text{B.68})$$

$$\begin{aligned} c - c^\dagger &= (U + W) \left(\frac{A_1 + 2B_1}{A_1 - 2B_1} \right)^{1/4} (r_1 - (r_1)^\dagger) \\ &+ V \left(\frac{A_2 + 2B_2}{A_2 - 2B_2} \right)^{1/4} (r_2 - (r_2)^\dagger), \end{aligned} \quad (\text{B.69})$$

$$\begin{aligned} d - d^\dagger &= -V \left(\frac{A_1 + 2B_1}{A_1 - 2B_1} \right)^{1/4} (r_1 - (r_1)^\dagger) \\ &+ (U - W) \left(\frac{A_2 + 2B_2}{A_2 - 2B_2} \right)^{1/4} (r_2 - (r_2)^\dagger). \end{aligned} \quad (\text{B.70})$$

Referências Bibliográficas

- [1] T. H. Berlin e M. Kac, Phys. Rev. **86**, 821 (1952).
- [2] H. E. Stanley, Phys. Rev. **176**, 718 (1968); H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, (Oxford University Press, New York, 1971), pg. 128, e referências citadas.
- [3] B. S. Gourary e R. W. Hart, Phys. Rev. **95**, 676 (1954); W. K. Theumann, Phys. Rev. **51**, 3484 (1969); H. J. F. Knops, Phys. Rev. B **8**, 4209 (1973); W. K. Theumann, Phys. Rev. B **15**, 3534 (1977).
- [4] L. Kalok e L. C. de Menezes, Z. Phys. B **20**, 223 (1975); L. Kalok e G. Obermair, J. Phys. C: Solid State Phys. **9**, 819 (1975).
- [5] R. M. Hornereich, M. Luban, and S. Shtrikman, Phys. A **86**, 465 (1977); L. Kalok e G. Obermair; J. Phys. C: Solid State Phys. **9**, 819 (1975).
- [6] G. S. Joyce, em *Phase Trasitions and Critical Phenomena*, editado por C. Domb e M. S. Green, (Academic, New York, 1972), Vol. 2, pg. 375, e referências citadas.
- [7] C. J. Thompson, *Classical Equilibrium Statistical Mechanics*, (Clarendon Press, Oxford, 1988), pg. 159, e referências citadas.

- [8] A. C. R. Teixeira and D. A. Stariolo, Phys. Rev. E **70**, 016113 (2004).
- [9] M. L. Lyra, M. D. Coutinho-Filho e A. M. Nemirovsky, Phys. Rev. B **48**, 3755 (1993).
- [10] A. M. Khorunzhy, B. A. Khoruzhenko, L. A. Pastur e M. V. Scherbina, em *Phase Transitions and Critical Phenomena*, editado por C. Domb e J. Lebowitz, (Academic New York, 1992), Vol. 15, pg. 73, e referências citadas.
- [11] J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless, e R. C. Jones, Phys. Rev. Lett. **36**, 1217 (1976); A. Theumann, J. Phys. A: Math. Gen. **20**, 25 (1987); A. Jagannathan, S. Eva e J. Rudnick, J. Phys. A: Math. Gen. **24**, 2193 (1991).
- [12] M. Schwartz, Phys. Lett. A **76**, 408 (1980); J. F. Perez, W. F. Wrezinski e J. L. Hemmen, J. Stat. Phys. **35**, 89 (1984); W. K. Theumann and J. F. Fontanari, J. Stat. Phys. **45**, 99 (1986); *ibid.*, Physica A **149**, 341 (1988); W. F. Wrezinski e S. R. A. Salinas, *Disorder and Competition in Soluble Lattice Models*, (World Scientific, Singapore, 1993), pg. 35, e referências citadas; T. Vojta e M. Schreiber, Phys. Rev. B **50**, 1272 (1994).
- [13] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics* (Elsevier, Oxford, 2004), p. 389, e referências citadas.
- [14] P. Shukla and S. Singh, Phys. Lett. **81**, 477 (1981); T. K. Kopeć and K. D. Usadel, Phys. Rev. Lett. **78**, 1988 (1987); T. M. Nieuwenhuizen and F. Ritorti, Physica A **250**, 8 (1998); A. Crisanti and L. Leuzzi, Phys. Rev. Lett. **93**, 217203 (2004).
- [15] T. M. Nieuwenhuizen, Phys. Rev. Lett. **74**, 4293 (1995).

- [16] R. S. Gracià and T. M. Nieuwenhuizen, Phys. Rev. E **69**, 056119 (2004).
- [17] T. Vojta, Phys. Rev. B **53**, 710 (1996).
- [18] H. Chamati, E. S. Pisanova, N. S. Tonchev, Phys. Rev. B **57**, 5798 (1998); J. G. Brankov, D. M. Danchev, N. S. Tonchev, *Theory of Critical Phenomena in Finite-Size Systems*, (World Scientific, Singapore, 2000), pg. 78, e referências citadas. Observamos que os modelos esféricos considerados nestas referências consideram as variáveis de spin ± 1 . Desse modo, a correspondência com os resultados apresentados nesta Tese é realizada reescrevendo a Eq. (2.2) como $\sum_i \langle S_i^2 \rangle = N$.
- [19] T. Vojta, Phys. Rev. B **53**, 8211 (1996).
- [20] Veja, *e.g.*, J. Silvestre and R. Hoffman, Inorg. Chem. **24**, 4108, (1985); M. Drillon *et al.*, J. Magn. Magn. Mater. **128**, 83 (1993); J. Karpinski *et al.*, Phys. Rev. Lett. **80**, 3626 (1998); P. Horsch, M. Sofin, M. Mayr, and M. Jansen, Phys. Rev. Lett. **94**, 076403 (2005); H. Kikuchi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**, 227201 (2005).
- [21] Y. V. Korshak, T. V. Medvedeva, A. A. Ovchinnikov and V. N. Spector, Nature **326**, 370 (1987); A. A. Ovchinnikov and V. N. Spector, Synth. Met. **27**, B615 (1988).
- [22] Para revisão, veja, H. Nishide, Adv. Mater. **7**, 937 (1995); Joel S. Miller and A. J. Epstein, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. **33**, 385 (1994).
- [23] C. I. Ivanov, G. Olbrich, H. Barentzen, and O. E. Polansky, Phys. Rev. B **36**, 8712 (1987).

- [24] A. M. S. Mâcedo, M. C. dos Santos, M. D. Coutinho-Filho, and C. A. Mâcedo, Phys. Rev. Lett. **74**, 1851 (1995); G. S. Tian and T. H. Lin, Phys. Rev. B **53**, 8196 (1996); G. Sierra, M. A. Martín-Delgado, S. P. White, D. J. Scalapino, and J. Dukelsky, Phys. Rev. B **59**, 7973 (1999); R. R. Montenegro-Filho and M. D. Coutinho-Filho, Physica A **357**, 173 (2005).
- [25] F. C. Alcaraz and A. L. Malvezzi, J. Phys. A: Math. Gen. **30**, 767 (1997); E. P. Raposo and M. D. Coutinho-Filho, Phys. Rev. Lett. **78**, 4853 (1997); *ibid.*, Phys. Rev. B **59**, 14384 (1999); T. Nakanishi and S. Yamamoto, Phys. Rev. B **65**, 214418 (2002).
- [26] C. Vitoriano, M. D. Coutinho-Filho, and E. P. Raposo, J. Phys. A : Math. Gen. **35**, 9049 (2002); C. Vitoriano, F. B. de Brito, E. P. Raposo, and M. D. Coutinho-Filho, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **374**, 185 (2002).
- [27] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [28] H. W. Lewis e G. H. Wannier, Phys. Rev. **88**, 682 (1952).
- [29] J. L. Lebowitz e J. K. Percus, Phys. Rev. **144**, 251 (1966); G. S. Joyce, Phys. Rev. **146**, 349 (1966); G. Stell, Phys. Rev. **184**, 135 (1969).
- [30] T. H. Berlin e J. S. Thomsen, J. Chem. Phys. **20**, 1368 (1952); M. Lax, J. Chem. Phys. **20**, 1351 (1952).
- [31] T. H. Berlin e E. W. Montroll, J. Chem. Phys. **20**, 75 (1952).
- [32] T. H. Berlin, L. Witten e H. A. Gersch, Phys. Rev. **92**, 189 (1953); W. Pressman e J. B. Keller, Phys. Rev. **120**, 22 (1960); H. A. Gersch e T. H. Berlin, Phys. Rev. **127**, 2276 (1962).

- [33] J. S. Langer, Phys. Rev. **137**, A1531 (1965); C. J. Thompson, J. Math. Phys. **7**, 531 (1966); E. H. Lieb e C. J. Thompson, J. Math. Phys. **10**, 1403 (1969); G. V. Bettoney e R. M. Mazo, J. Math. Phys. **11**, 1147 (1970).
- [34] S. Singh and R. K. Pathria, Phys. Rev. B **31**, 4483 (1985).
- [35] M. A. Continentino, *Quantum Scaling in Many-Body Systems* (World Scientific Publishing Co., Singapore, 2001), e referências citadas.
- [36] J. A. Hertz, Phys. Rev. B **14**, 1165 (1976).
- [37] S. Sachdev and T. Senthil, Ann. Phys. (N.Y.) **251**, 76 (1996).
- [38] G. Obermair, em *Dynamical Aspects of Critical Phenomena*, editado por J. I. Budnick and M. P. Kawatra (Gordon and Breach, New York, 1972), pag. 137.
- [39] Ian Affleck, J. Phys.: Condens. Matter **1**, 3047 (1989).
- [40] F. D. M. Haldane, Phys. Lett. A **93**, 464 (1983); *ibid.* Phys. Rev. Lett. **50**, 1153 (1985).
- [41] R. B. Griffiths, Phys. Rev. **133**, A768 (1964); J. C. Bonner and M. E. Fisher, Phys. Rev. **135**, A640 (1964).
- [42] E. Lieb, in *The Many Body Problem: An Encyclopedia of Exactly Solved Models*, editado por D. C. Mattis (World Scientific Publishing Company, Singapore, 1994), pg. 671, cap. 6, e referências citadas.
- [43] E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Systems* (Addison-Wesley Publishing Company, Redwood City, California, 1991), pag. 55, cap. 4, e referências citadas.

- [44] J. D. Johnson, J. Appl. Phys. **52**, 1991 (1981).
- [45] M. Takahashi, *Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models* (Cambridge University Press, 1999), e referências citadas.
- [46] M. H. Oliveira, M. D. Coutinho-Filho, and E. P. Raposo, Phys. Rev. B **72**, 214420 (2005).
- [47] E. H. Lieb, Phys. Rev. Lett. **62**, 1201 (1989).
- [48] M. E. Fisher, Am. J. Phys. **32**, 343 (1964).
- [49] M. Takahashi and M. Yamada J. Phys. Soc. Japan **54**, 2808 (1985).