

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS**

Tiago Dias Ramos dos Santos

ONDAS DE SPIN GENERALIZADAS EM SU(N)

**São Carlos
2025**

TIAGO DIAS RAMOS DOS SANTOS

ONDAS DE SPIN GENERALIZADAS EM SU(N)

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao
Programa de Graduação em Física do Instituto
de Física de São Carlos da Universidade de São
Paulo, para obtenção do título de Bacharel em
Física

Orientador: Prof. Dr. Victor Luiz Quito - IFSC

São Carlos

2025

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Resumo

O tratamento de hamiltonianos de spin é feito, de maneira usual, por meio da implementação de bósons com simetria $SU(2)$ para mediar as flutuações. Para casos de spins maiores que $1/2$, mas que ainda não constem no limite de S grande, tal método falha em analisar os possíveis ordenamentos do estado fundamental que estejam além da ordem dipolar. O trabalho repassa os fundamentos do tratamento usual com $SU(2)$ e propõe uma alternativa para sua generalização para um caso de maior simetria, a dizer, $SU(N)$. Para ilustrar sua efetividade, essa generalização foi aplicada ao modelo bilinear biquadrático, hamiltoniano que apresenta simetria $SU(3)$ num ponto específico, foco deste trabalho, do qual foi analisado o espectro de mágmons gerados e o calor específico dele resultante, recuperando os resultados já conhecidos desse sistema para as situações em que se reduz ao caso usual. A generalização considera, naturalmente, mais espécies de mágmons no sistema, mas é possível de ser utilizada no tratamento mesmo de hamiltonianos que sejam simétricos apenas por $SU(2)$.

Palavras chave: Magnetismo, Ondas de spin, $SU(2)$, $SU(3)$, $SU(N)$.

1 Introdução

O tratamento mais comumente utilizado para lidar com sistemas quânticos que possuem ordenamento magnético em seu estado fundamental e baixas flutuações é a chamada teoria de onda de spin (SWT), denominada uma teoria semi-clássica por sua validade, especialmente para os casos de spin S muito grandes. Flutuações do campo clássico, usado nesse limite de S para representar os spins, são completamente descritas pelo grupo de rotações locais $SO(3)$, que é isomorfo a $SU(2)/\mathbb{Z}_2$, como amplamente estudado em (IACHELLO, 2006), (SHAPIRO, 2017) e (FERREIRA, 2000), e são, portanto, as únicas flutuações que constam no tratamento por SWT, ordenamentos dipolares.

A teoria de ondas de spin usual apresenta dificuldades na descrição de outros possíveis ordenamentos do estado fundamental, como sabemos ser possível para casos de ordem multipolar mais elevada, relevantes em casos como (WIERSCHEM *et al.*, 2012), (LUO; DATTA; YAO, 2016) e (LÄUCHLI; SCHMID; TREBST, 2006). Tais estados não possuem um análogo clássico à temperatura zero, o que evidencia a necessidade de uma outra descrição para o seu tratamento, de modo que seja possível expandir ou generalizar a teoria de ondas de spin usual e manter os resultados já apresentados. Mesmo para os casos em que o ordenamento dipolar é dominante, flutuações de um spin S em torno do campo médio são descritas, localmente, pelo grupo de transformações unitárias $SU(2S + 1)$ ao invés do grupo $SU(2)$, como explorado em (MUNIZ; KATO; BATISTA, 2014) e, em certa medida, por (CRISPIM, 2024).

Um dos modos de estudar estas flutuações, independentemente do grupo de simetria do sistema, é a descrição de seu hamiltoniano em termos de quasipartículas capazes de mediar tais efeitos, diagonalizando-o tal como em (COLPA, 1978). No estudo de sistemas de spin e, portanto, magnetos, estas quasipartículas recebem o nome de mágmons e são o cerne do estudo dos comportamentos do sistema. Ao analisar suas populações, ou mesmo interações para casos mais complexos, estudam-se as propriedades do hamiltoniano e do material que ele venha a descrever.

Nesse trabalho pretende-se fazer uma retomada do modelo com ordenamento magnético no estado fundamental mais simples, o hamiltoniano de troca de Heisenberg, amplamente estudado em referências de mecânica estatística, tal como (SALINAS, 2008) e (AUERBACH, 2012), e seguir para a sua expansão mais simples, o modelo bilinear-biquadrático, e comparar os resultados obtidos da teoria usual, SWT, com a sua expansão a ser aqui apresentada, e demonstrar suas equivalências e diferenças.

2 Métodos e resultados

De modo a recordar os resultados tradicionais da física estatística, como encontrados em (SALINAS, 2008), e preparar a base necessária para a continuidade do estudo, trataremos aqui os casos resolvidos com a implementação do SU(2) por meio de mágmons, quasipartículas criadas sob o estado ordenado dipolar. Nas seções posteriores, o caso SU(N) será trabalhado, seguindo de perto as formulações prescritas em (MUNIZ; KATO; BATISTA, 2014).

Por fim, ilustraremos a aplicação do método num sistema conhecido, o modelo bilinear biquadrático, que apresenta explícita simetria SU(3) para pontos específicos.

2.1 O caso SU(2)

2.1.1 Ferromagneto de Heisenberg

Um dos modelos mais simples capazes de descrever magnetos naturais é o hamiltoniano de Heisenberg, que, ao considerar interações intrinsecamente relacionadas à simetrização das funções de onda que descrevem os elétrons do material, discussão feita em (SALINAS, 2008), descreve o sistema por um modelo efetivo ao acoplar os dipolos por uma constante de troca J e ao representá-los por \mathbf{S}_i . Considerando o caso sem campo magnético externo, temos:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (2.1)$$

onde a notação $\langle i,j \rangle$ indica uma soma entre primeiros vizinhos de uma rede qualquer, mas no decurso do texto trataremos apenas de redes quadradas ou suas generalizações hipercúbicas.

Sejam as definições dos operadores S_i^+ e S_i^- , bem como a do produto $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$:

$$\begin{aligned} S^+ &= S^x + iS^y, & S^- &= S^x - iS^y, & [S^x, S^y] &= iS^z \\ S^x &= \frac{1}{2} (S^+ + S^-), & S^y &= \frac{-i}{2} (S^+ - S^-), & [S^+, S^-] &= 2S^z, \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) = S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+). \quad (2.3)$$

A transformação de Holstein-Primakoff, originalmente aplicada em (HOLSTEIN; PRIMAKOFF, 1940), se dá para os operadores de spin S_i^+ e S_i^- , como feito em (SALINAS, 2008) e (AUERBACH, 2012), ao representá-los em termos de bôsons e selecionar uma certa organização para com a qual estes bôsons são flutuações.

$$S_i^+ = (2S)^{\frac{1}{2}} \left[1 - \frac{b_i^\dagger b_i}{2S} \right]^{\frac{1}{2}} b_i, \quad S_i^- = (2S)^{\frac{1}{2}} b_i^\dagger \left[1 - \frac{b_i^\dagger b_i}{2S} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (2.4)$$

onde b_i 's satisfazem as relações de comutação dos bôsons ($[b_i, b_j^\dagger] = \delta_{i,j}$; $[b_i^{(\dagger)}, b_j^{(\dagger)}] = 0$), tais que os operadores b e b^\dagger criam e aniquilam bôsons, respectivamente. Agora podemos calcular os produtos de S_i^+ e S_i^- e extrair um resultado para S_i^z em termos desses operadores:

$$S_i^+ S_i^- = (2S) \left[\left(1 - \frac{b_i^\dagger b_i}{2S} \right) + b_i^\dagger b_i \left(1 - \frac{b_i^\dagger b_i}{2S} \right) \right], \quad S_i^- S_i^+ = (2S) \left[b_i^\dagger b_i - \frac{1}{2} (b_i^\dagger b_i^\dagger b_i b_i) \right], \quad (2.5)$$

$$S_i^z = \frac{1}{2} [S_i^+, S_i^-] = S - b_i^\dagger b_i.$$

A expansão de primeira ordem dos operadores S_i^+ e S_i^- , ignorando termos que possuam mais de dois operadores bosônicos, fica:

$$S_i^+ = (2S)^{\frac{1}{2}} b_i, \quad S_i^- = (2S)^{\frac{1}{2}} b_i^\dagger. \quad (2.6)$$

Em posse de todas as definições necessárias para tornar o hamiltoniano original segundo quantizado, observamos que a soma em $\langle i, j \rangle$ indica uma soma sobre os primeiros vizinhos da rede de spins. Podemos substituir os índices i e j por \mathbf{r} e $\mathbf{r} + \boldsymbol{\delta}$, respectivamente, onde \mathbf{r} representa uma posição na rede e $\boldsymbol{\delta}$ é um deslocamento definido nessa rede de modo a alcançar um primeiro vizinho. Estamos considerando um modelo de rede cúbica com condições de contorno periódicas, de modo que, a fim de evitar um fator de dupla contagem, os $\boldsymbol{\delta}$'s serão tomados como estritamente positivos. Do hamiltoniano inicial, lê-se que:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \\ &= -J \sum_{\mathbf{r}, \boldsymbol{\delta}} S_{\mathbf{r}}^z S_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}}^z + \frac{1}{2} (S_{\mathbf{r}}^+ S_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}}^- + S_{\mathbf{r}}^- S_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}}^+). \end{aligned} \quad (2.7)$$

O hamiltoniano em segunda quantização, descartando termos de ordem maior que quadrática nos operadores bosônicos (mais que dois operadores b_i), se torna:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\mathbf{r}, \boldsymbol{\delta}} S^2 - S (b_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}} + b_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}}^\dagger b_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}}) + S (b_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}}^\dagger b_{\mathbf{r}} + b_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}}), \quad (2.8)$$

onde foi usado o fato de que $b_{\mathbf{r}} b_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}}^\dagger$ comuta com $b_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}}^\dagger b_{\mathbf{r}}$, por se tratarem de sítios diferentes.

Expandimos em ondas planas os operadores b e b^\dagger ao aplicar uma transformada de Fourier:

$$b_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} b_{\mathbf{k}}, \quad b_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} b_{\mathbf{r}}. \quad (2.9)$$

Após a transformação, os quatro termos: $b_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}}$; $b_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}}^\dagger b_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}}$; $b_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}}^\dagger b_{\mathbf{r}}$; $b_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}}$, resultam em:

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}}, \quad b_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}}^\dagger b_{\mathbf{r}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}}, \\ b_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}}^\dagger b_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}}, \quad b_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\delta}}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Como $\mathbf{k} - \mathbf{k}' = 0$, pois $\sum_{\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} = N \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$, o hamiltoniano então se torna:

$$\mathcal{H} = -J \frac{\mathcal{Z}}{2} N S^2 - J \left\{ -\mathcal{Z} S \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + S \sum_{\mathbf{k}, \boldsymbol{\delta}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} (e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}} + e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}}) \right\}. \quad (2.11)$$

Podemos agrupar a soma das exponenciais em um termo $g_{\mathbf{k}} = \sum_{\delta=1}^d 2 \cos(k_{\delta})$, onde "d" é a dimensionalidade do sistema e $\boldsymbol{\delta}$ já foi decomposto nas direções da rede. Foi também introduzido aqui o número de coordenação \mathcal{Z} , que indica o número de primeiros vizinhos de um sítio qualquer e, para redes hipercúbicas, $\mathcal{Z} = 2d$, de modo que o fator meio surge para evitar problemas de dupla contagem. O hamiltoniano final é:

$$\mathcal{H} = -J \frac{\mathcal{Z}}{2} NS^2 + \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} (J \mathcal{Z} S - JS g_{\mathbf{k}}). \quad (2.12)$$

Aqui, o primeiro termo está relacionado a energia fundamental do sistema clássico, o segundo termo representa a contribuição dos mágons, indicando as possíveis flutuações de energia em forma de ondas de spin, devido ao mecanismo de troca.

2.1.2 Antiferromagneto de Heisenberg

Nesse caso, espera-se um estado fundamental no qual os spins se encontram, ao menos no caso clássico, anti-alinhados, o que implica uma constante de troca total $J > 0$. Para construir esse sistema do modo mais simples, assume-se que a rede pode ser interpretada como bipartite, ou seja, pode ser dividida em duas redes “idênticas”, mas virtualmente separadas, de modo que esta segunda rede sofra uma rotação no eixo x, tal que: $\tilde{\mathbf{S}}_i = S_i^x \hat{x} - S_i^y \hat{y} - S_i^z \hat{z}$. Dessa forma, podemos escrever o hamiltoniano antiferromagnético como:

$$\mathcal{H} = |J| \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \tilde{\mathbf{S}}_j, \quad (2.13)$$

onde:

$$\mathbf{S}_i \cdot \tilde{\mathbf{S}}_j = -S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^+ + S_i^- S_j^-). \quad (2.14)$$

Usando as mesmas transformações de Holstein-Primakoff, como definidas em (2.5), e mantendo termos até ordem quadrática nos operadores bosônicos, temos:

$$\mathcal{H} = |J| \sum_{\mathbf{r}, \delta} -S^2 + S (b_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}} + b_{\mathbf{r}+\delta}^\dagger b_{\mathbf{r}+\delta}) + S (b_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}+\delta}^\dagger + b_{\mathbf{r}} b_{\mathbf{r}+\delta}). \quad (2.15)$$

Aplicando a transformada de Fourier e colecionando os termos novos ($b^\dagger b^\dagger$ e bb), obtemos:

$$b_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}+\delta}^\dagger = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'}^\dagger e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}' \cdot \delta}, \quad b_{\mathbf{r}} b_{\mathbf{r}+\delta} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}'} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \delta}. \quad (2.16)$$

Há algumas observações a serem feitas acerca desses termos antes de os inserirmos de volta. A condição sobre os \mathbf{k} 's agora é que $\mathbf{k} + \mathbf{k}' = 0$, de modo que nossa identidade agora se torna $\sum_{\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')} = N \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'}$. Observa-se também que os termos, agora $b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger$ e $b_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}$, ambos comutam entre seus fatores, logo são simétricos em \mathbf{k} , permitindo escrever:

$$\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \delta} (b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger e^{i\mathbf{k} \cdot \delta} + b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \delta} (b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger (e^{i\mathbf{k} \cdot \delta} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta})). \quad (2.17)$$

O mesmo vale para o hermitiano conjugado. Recuperamos assim a definição de $g_{\mathbf{k}}$ e podemos reescrever o hamiltoniano em \mathbf{k} como:

$$\mathcal{H} = -J \frac{\mathcal{Z}}{2} NS^2 + \sum_{\mathbf{k}} \left(J \mathcal{Z} S (b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}) + JS \frac{g_{\mathbf{k}}}{2} (b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger + b_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}) \right). \quad (2.18)$$

Para tratar essa expressão introduzimos a transformação de Bogoliubov, definindo um novo conjunto de operadores bosônicos (a e a^\dagger), bem como a sua inversa:

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}} &= v_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger - u_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}, & a_{-\mathbf{k}}^\dagger &= v_{-\mathbf{k}}^* b_{-\mathbf{k}} - u_{-\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{k}}^\dagger, \\ b_{\mathbf{k}} &= v_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger, & b_{-\mathbf{k}}^\dagger &= v_{-\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + u_{-\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Para manter a relação de comutação $[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}}^\dagger] = 1$, conclui-se que $|v_{\mathbf{k}}|^2 - |u_{\mathbf{k}}|^2 = 1$, correspondendo à identidade hiperbólica, de modo que podemos parametrizar v e u por:

$$v_{\mathbf{k}} = e^{i\theta_v} \cosh(\Theta_{\mathbf{k}}), \quad u_{\mathbf{k}} = e^{i\theta_u} \sinh(\Theta_{\mathbf{k}}). \quad (2.20)$$

Os produtos entre v e u que surgem no hamiltoniano recaem em um de três casos:

$$\begin{aligned} |v_{\mathbf{k}}|^2 &= v_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \cosh(2\Theta_{\mathbf{k}}) + \frac{1}{2}, \\ v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} &= v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* = v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \sinh(2\Theta_{\mathbf{k}}), \\ |u_{\mathbf{k}}|^2 &= v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* = u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \cosh(2\Theta_{\mathbf{k}}) - \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

A princípio, todos os resultados deveriam ser multiplicados por uma fase, salvo os módulos quadrados, correspondentes ao respectivo produto de v e u . Contudo, por se tratar de um parâmetro introduzido para a maior generalidade das definições de v e u , podemos escolher θ_v e θ_u de modo que seja mais conveniente para o problema; logo, os tomaremos todos iguais a zero. Nesse mesmo sentido, consideramos aqui que $\Theta_{\mathbf{k}}$ é invariante por inversão do momento \mathbf{k} .

Podemos tratar o hamiltoniano na expressão (2.18) de modo geral ao realizar algumas substituições simples. Chamando o termo constante fora do somatório de A , o termo a multiplicar o operador $b^\dagger b$ de $B_{\mathbf{k}}$ e o termo a multiplicar os termos extras de $\frac{C_{\mathbf{k}}}{2}$, obtemos:

$$\mathcal{H} = A + \sum_{\mathbf{k}} \left(B_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \frac{C_{\mathbf{k}}}{2} (b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger + b_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}) \right). \quad (2.22)$$

Aplicando as transformações definidas em (2.19) e usando as identidades (2.21) temos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= A - \sum_{\mathbf{k}} \frac{B_{\mathbf{k}}}{2} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[(B_{\mathbf{k}} \cosh(2\Theta_{\mathbf{k}}) + C_{\mathbf{k}} \sinh(2\Theta_{\mathbf{k}})) (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger) \right. \\ &\quad \left. + (B_{\mathbf{k}} \sinh(2\Theta_{\mathbf{k}}) + C_{\mathbf{k}} \cosh(2\Theta_{\mathbf{k}})) (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}) \right], \end{aligned} \quad (2.23)$$

onde usamos a propriedade de contagem enunciada em (2.17) para associar alguns termos, além do resultado da comutação de $[a, a^\dagger]$ para conseguir o fator $B_{\mathbf{k}}$ isolado do resto.

Como o objetivo é conseguir um hamiltoniano diagonal, queremos eliminar os termos aa e $a^\dagger a^\dagger$, o que faremos ao usar o último parâmetro livre que conseguimos com as transformações de Bogoliubov, o $\Theta_{\mathbf{k}}$. Ao impor que os termos extras são nulos, obtém-se a seguinte igualdade:

$$B_{\mathbf{k}} \sinh(2\Theta_{\mathbf{k}}) + C_{\mathbf{k}} \cosh(2\Theta_{\mathbf{k}}) = 0 \quad \rightarrow \quad \tanh(2\Theta_{\mathbf{k}}) = -\frac{C_{\mathbf{k}}}{B_{\mathbf{k}}}. \quad (2.24)$$

Quadrando esse resultado e utilizando a identidade hiperbólica $\cosh^2(x) - \sinh^2(x) = 1$ consegue-se um resultado para o $\cosh(2\Theta_{\mathbf{k}})$ em função das quantidades $B_{\mathbf{k}}$ e $C_{\mathbf{k}}$, tal que:

$$\frac{\cosh^2(2\Theta_{\mathbf{k}}) - 1}{\cosh^2(2\Theta_{\mathbf{k}})} = \frac{C_{\mathbf{k}}^2}{B_{\mathbf{k}}^2} \rightarrow \cosh(2\Theta_{\mathbf{k}}) = \pm \left[1 - \left(\frac{C_{\mathbf{k}}}{B_{\mathbf{k}}} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (2.25)$$

Substituindo esse resultado de volta no hamiltoniano e lembrando que, pela expressão da $\tanh(2\Theta_{\mathbf{k}})$ o seno também foi definido, temos o seguinte para os termos que multiplicam os fatores diagonais:

$$B_{\mathbf{k}} \left[1 - \left(\frac{C_{\mathbf{k}}}{B_{\mathbf{k}}} \right)^2 \right]^{-1/2} - \frac{C_{\mathbf{k}}^2}{B_{\mathbf{k}}} \left[1 - \left(\frac{C_{\mathbf{k}}}{B_{\mathbf{k}}} \right)^2 \right]^{-1/2} = \sqrt{B_{\mathbf{k}}^2 - C_{\mathbf{k}}^2}. \quad (2.26)$$

O hamiltoniano final assume a forma:

$$\mathcal{H} = A - \sum_{\mathbf{k}} \frac{B_{\mathbf{k}}}{2} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{B_{\mathbf{k}}^2 - C_{\mathbf{k}}^2} \left(a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger \right). \quad (2.27)$$

A dependência em \mathbf{k} dos espectros para expansões em torno de \mathbf{k} pequeno é tratada no procedimento para calcular o calor específico, feito em seções mais adiante, tanto para o caso ferro como o antiferro. Em primeira ordem de expansão, as dispersões dos casos SU(2) são, como em (SALINAS, 2008), para o caso ferro e anti-ferromagnético, $\propto \mathbf{k}^2$ e $\propto \mathbf{k}$, respectivamente. Na seção de aplicação do método de ondas de spin generalizadas (GSWT) será mostrado que esse resultado é recuperado.

2.2 O caso SU(N)

O conjunto de matrizes unitárias $N \times N$ de determinante igual a um, tendo por produto a multiplicação de matrizes, é dito o grupo SU(N). A ideia desta seção é enunciar as vantagens de trabalhar com um grupo de simetria maior, em especial SU(3) no presente trabalho, no tratamento de ondas de spin, como estabelecido em (MUNIZ; KATO; BATISTA, 2014).

Consideramos um Hamiltoniano definido numa rede, tal que esta possa ser dividida num conjunto de sítios com um número finito de graus de liberdade. Assumimos então que a dimensão do espaço de Hilbert local é N ($N = 2S + 1$; S correspondendo ao spin total do sítio) e introduzimos os geradores SU(N) agindo nesse espaço. Com esse propósito, inserimos N bôsons de Schwinger que satisfazem, quando na representação fundamental, localmente a restrição:

$$\sum_{m=0}^{N-1} b_{\mathbf{r},m}^\dagger b_{\mathbf{r},m} = 1. \quad (2.28)$$

Essa é uma maneira simples de representar os geradores de SU(N), formas bilineares do tipo

$$O^{m,m'} = b_{\mathbf{r},m}^\dagger b_{\mathbf{r},m'}, \quad (2.29)$$

que satisfazem as relações de comutação de SU(N):

$$\begin{aligned} [O^{m,m'}, O^{n,n'}] &= [b_{\mathbf{r},m}^\dagger b_{\mathbf{r},m'}, b_{\mathbf{r},n}^\dagger b_{\mathbf{r},n'}] \\ &= b_{\mathbf{r},m}^\dagger (\delta_{m',n} + b_{\mathbf{r},n}^\dagger b_{\mathbf{r},m'}) b_{\mathbf{r},n'} - b_{\mathbf{r},n}^\dagger (\delta_{n',m} + b_{\mathbf{r},m}^\dagger b_{\mathbf{r},n'}) b_{\mathbf{r},m'} \\ &= \delta_{m',n} O^{m,m'} - \delta_{n',m} O^{n,m'}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Toda flutuação local nos spins pode ser expressa por uma expansão até ordem quadrática nos bôsons do hamiltoniano, desde que a quantidade no vínculo (2.28) seja mantida, o que significa estar na representação fundamental de SU(N), onde os $N^2 - 1$ geradores da álgebra do grupo, mais a identidade, formam uma base

completa de matrizes $N \times N$ agindo no espaço do hamiltoniano. Portanto, operadores locais X_r podem ser descritos em termos de combinações lineares de $O^{m,m'}$, de modo que:

$$X_r = \sum_{m,m'} \chi_r^{m,m'} O_r^{m,m'} = b_r^\dagger \chi_r b_r, \quad (2.31)$$

onde $b_r^\dagger \equiv (b_{r,0}^\dagger, b_{r,1}^\dagger, \dots, b_{r,N-1}^\dagger)$.

A teoria de ondas de spin se baseia, como enunciada na seção anterior, na transformação de Holstein-Primakoff (HP), que injeta bôsons para representar os geradores de SU(2) no sistema, transforma seus operadores e seleciona um alinhamento de modo a minimizar a energia do estado completo. Expandir a transformação de SU(2) para SU(N) é feito ao injetar N bôsons de Schwinger (SBs), obedecendo à restrição em Eq.(2.28), e selecionando uma espécie de bôson que cria o estado local com a menor energia de campo médio, ou seja, o valor médio do Hamiltoniano é o produto direto dos estados de cada sítio:

$$|\psi_{MF}\rangle = \prod_r \tilde{b}_{r,0}^\dagger |\emptyset\rangle. \quad (2.32)$$

Ao selecionar o bôson com $m = 0$, que é condensado, podemos fazer a quantização local do SU(N) alinhado a esta direção, tal como era feito na transformação de Holstein-Primakoff (HP) para SU(2), onde o til sobre os operadores representa a possibilidade de que a definição desses bôsons de Schwinger possa ser uma combinação linear dos N que foram introduzidos, de modo que o vínculo torna-se:

$$\tilde{b}_{r,0}^\dagger = \tilde{b}_{r,0} = \sqrt{1 - \sum_{m=1}^{N-1} \tilde{b}_{r,m}^\dagger \tilde{b}_{r,m}}. \quad (2.33)$$

A representação de HP para os geradores de SU(N) é dada por $O^{m,m'} = \tilde{b}_{r,m}^\dagger \tilde{b}_{r,m'}$, onde $\tilde{b}_{r,0}^\dagger$ e $\tilde{b}_{r,0}$ devem ser substituídos pela equação acima. Para o caso em que $\sum_{m=1}^{N-1} \langle \tilde{b}_{r,m}^\dagger \tilde{b}_{r,m} \rangle \ll 1$, que caracteriza a condensação, podemos fazer a aproximação $\tilde{b}_{r,0}^\dagger = \tilde{b}_{r,0} \approx \left(1 - \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{N-1} \tilde{b}_{r,m}^\dagger \tilde{b}_{r,m}\right)$. Aplicando isso à transformação do nosso operador local, mantendo termos até ordem quadrática nos bôsons, obtemos:

$$\begin{aligned} X_r &= \tilde{b}_{r,0}^\dagger \tilde{\chi}_r^{0,0} \tilde{b}_{r,0} + \sum_{m=1}^{N-1} \tilde{b}_{r,m}^\dagger \tilde{\chi}_r^{m,0} \tilde{b}_{r,0} + \sum_{m'=1}^{N-1} \tilde{b}_{r,0}^\dagger \tilde{\chi}_r^{0,m'} \tilde{b}_{r,m'} + \sum_{m,m'=1}^{N-1} \tilde{b}_{r,m}^\dagger \tilde{\chi}_r^{m,m'} \tilde{b}_{r,m'} \\ &= \tilde{\chi}_r^{0,0} - \tilde{\chi}_r^{0,0} \sum_{m=1}^{N-1} \tilde{b}_{r,m}^\dagger \tilde{b}_{r,m} + \sum_{m=1}^{N-1} \left(\tilde{b}_{r,m}^\dagger \tilde{\chi}_r^{m,0} + \tilde{\chi}_r^{0,m} \tilde{b}_{r,m} \right) + \sum_{m,m'=1}^{N-1} \tilde{b}_{r,m}^\dagger \tilde{\chi}_r^{m,m'} \tilde{b}_{r,m'}, \end{aligned} \quad (2.34)$$

onde $\tilde{\chi}_r = U \chi_r U^\dagger$ e os $N - 1$ bôsons de Schwinger (SBs) se tornaram os bôsons de SU(N) de Holstien-Primakoff (HP), que seguem satisfazendo as relações de comutação já estabelecidas.

O produto genérico de dois operadores $X_r X_{r'}$ somados em primeiros vizinhos ($\langle r, r' \rangle$) é um resultado útil para se ter em mãos no tratamento de qualquer sistema que abrigue esse tipo de interação quando tratado com as ferramentas aqui apresentadas. Observando o resultado acima, temos quatro termos. Podemos fazer uma contagem rápida e concluir que nenhum termo desse produto pode satisfazer a condição de ser de ordem quadrática nos bôsons a menos que os índices dos elementos de matriz possuam, pelo menos, dois zeros. Podemos então separar $X_r X_{r'}$ em quatro resultados. O produto do primeiro termo por si mesmo, o do primeiro termo com o segundo e o último, tanto o de r como o de r' , o do terceiro termo consigo mesmo e do terceiro com o primeiro, ou seja:

$$\begin{aligned}
A &= \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \tilde{\chi}_{\mathbf{r}}^{0,0} \tilde{\chi}_{\mathbf{r}'}^{0,0} = \frac{\mathcal{Z}}{2} N_s \tilde{\chi}_{\mathbf{r}}^{0,0} \tilde{\chi}_{\mathbf{r}'}^{0,0}, \\
B &= \mathcal{Z} \sum_{\mathbf{r}} \left(\tilde{\chi}_{\mathbf{r}'}^{0,0} \sum_{m,m'=1}^{N-1} \tilde{\chi}_{\mathbf{r}}^{m,m'} \tilde{b}_{\mathbf{r},m}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{r},m'} - \tilde{\chi}_{\mathbf{r}'}^{0,0} \tilde{\chi}_{\mathbf{r}}^{0,0} \sum_{m=1}^{N-1} \tilde{b}_{\mathbf{r},m}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{r},m} \right), \\
C &= \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left(\sum_{m,m'=1}^{N-1} \tilde{\chi}_{\mathbf{r}}^{m,0} \tilde{\chi}_{\mathbf{r}'}^{m',0} \tilde{b}_{\mathbf{r},m}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{r}',m'}^\dagger + \tilde{\chi}_{\mathbf{r}}^{m,0} \tilde{\chi}_{\mathbf{r}'}^{0,m'} \tilde{b}_{\mathbf{r},m}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{r},m'} + h.c \right), \\
D &= \mathcal{Z} \sum_{\mathbf{r}} \left(\sum_{m=1}^{N-1} \left(\tilde{\chi}_{\mathbf{r}'}^{0,0} \tilde{\chi}_{\mathbf{r}}^{m,0} \tilde{b}_{\mathbf{r},m}^\dagger + \tilde{\chi}_{\mathbf{r}'}^{0,0} \tilde{\chi}_{\mathbf{r}}^{0,m} \tilde{b}_{\mathbf{r},m} \right) \right).
\end{aligned} \tag{2.35}$$

Aqui \mathcal{Z} indica o número de coordenação da rede. Em B e D foi usado que os índices dos somatórios podem ser trocados à vontade e que todos os operadores bosônicos estavam em função de \mathbf{r} ou \mathbf{r}' separadamente. Note que, a princípio, não há nenhum motivo algebricamente óbvio que leve a concluir que D é nulo. O produto dos operadores $X_{\mathbf{r}} X_{\mathbf{r}'}$ fica definido como a soma dos termos de A a D . Temos em mãos uma teoria de ondas de spin generalizada (GSWT).

As técnicas até aqui descritas são completamente gerais, cabe agora impletá-las num hamiltoniano específico. A vantagem principal desse método está em tratar problemas de spins maiores que $1/2$, pois sua descrição deverá envolver, no estado fundamental, uma simetria do tipo $SU(2S + 1)$. Trabalharemos em detalhes o primeiro caso não trivial, o $SU(3)$, que captura a essência das diferenças, para ilustrar seu funcionamento e comparar os resultados.

2.3 O modelo bilinear-biquadrático

Aqui tratamos do caso de Hamiltoniano mais simples que apresenta diferenças, que não são meras constantes, do caso tratado originalmente em (SALINAS, 2008) e(AUERBACH, 2012) usando HP. O caso do ferro e do antiferro é calculado, tanto o espectro das flutuações como seu efeito sobre o calor específico, e comparamos isso com o resultado obtido pelo método $SU(2)$.

2.3.1 Modelos de spin com acoplamentos bilineares biquadráticos

Vamos analisar o caso mais simples onde se pode encontrar ordens superiores à dipolar no estado fundamental, o modelo bilinear-biquadrático de spin numa rede quadrada e suas generalizações em dimensões maiores. Para tratar esse exemplo em sua total generalidade, de acordo com as ferramentas que foram apresentadas até aqui, tomaremos o modelo com um spin S genérico numa rede hipercúbica de $d > 1$ em sua representação fundamental, a dizer, estamos criando N SBs que satisfazem (2.28), tal que $N = 2S + 1$. O hamiltoniano com os operadores de spin assume a forma:

$$\mathcal{H} = J_L \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}'} + J_Q \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} (\mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}'})^2. \tag{2.36}$$

Aqui, assim como anteriormente, $\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle$ indica que a soma ocorre sobre os primeiros vizinhos. Introduzimos o ângulo α para parametrizar nossas constantes, de modo que:

$$J_L = J \cos(\alpha), \quad J_Q = \frac{J}{S^2} \sin(\alpha). \tag{2.37}$$

O fator S^{-2} é introduzido em J_Q para tornar os termos comparáveis no limite de S grande. Estamos tomando $\hbar = 1$ no decurso das contas. Para tratar tanto o caso ferromagnético como o antiferro, introduz-se o vetor \mathbf{a} ($\mathbf{a} = (1, 1, 1)$ no ferro e $\mathbf{e} = (1, -1, -1)$ no antiferro). O hamiltoniano então pode ser escrito como:

$$\mathcal{H} = J_L \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle, \nu} a_\nu S_{\mathbf{r}}^\nu S_{\mathbf{r}'}^\nu + J_Q \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle, \nu, \mu} a_\nu a_\mu S_{\mathbf{r}}^\nu S_{\mathbf{r}}^\mu S_{\mathbf{r}'}^\nu S_{\mathbf{r}'}^\mu, \quad (2.38)$$

onde os índices ν e μ correm $\{x, y, z\}$.

O hamiltoniano em termos dos N SBs, tomando como base os geradores dos autoestados de $S_{\mathbf{r}}^z$ que já criam o estado de menor energia de campo médio, de tal forma que a transformação unitária definida no método, por generalidade, se reduz à identidade, é, usando a Eq. (2.34):

$$\mathcal{H} = J_L \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle, \nu} a_\nu \mathbf{b}_{\mathbf{r}}^\dagger S^\nu \mathbf{b}_{\mathbf{r}} \mathbf{b}_{\mathbf{r}'}^\dagger S^\nu \mathbf{b}_{\mathbf{r}'} + J_Q \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle, \nu, \mu} a_\nu a_\mu \mathbf{b}_{\mathbf{r}}^\dagger S^{\nu\mu} \mathbf{b}_{\mathbf{r}} \mathbf{b}_{\mathbf{r}'}^\dagger S^{\nu\mu} \mathbf{b}_{\mathbf{r}'} \quad (2.39)$$

Onde as matrizes são dadas por:

$$\begin{aligned} S_{m, m'}^x &= \delta_{m, m'-1} \frac{\sqrt{(m+1)(2S-m)}}{2} + \delta_{m-1, m'} \frac{\sqrt{(m+1)(2S-m)}}{2} \\ S_{m, m'}^y &= \delta_{m, m'-1} \frac{-i\sqrt{(m+1)(2S-m)}}{2} + \delta_{m-1, m'} \frac{i\sqrt{(m+1)(2S-m)}}{2} \\ S_{m, m'}^z &= \delta_{m, m'} (S-m) \quad S_{m, m'}^{\nu\mu} = \sum_{m''} S_{m, m''}^\nu S_{m'', m'}^\mu \end{aligned} \quad (2.40)$$

Aplicamos a transformação definida em Eq. (2.33) e usando o resultado (2.35), ignorando termos com mais que dois operadores bosônicos, obtemos:

$$\mathcal{H} = dNt_{0,0}^{0,0} + \mathcal{H}_{GSW}, \quad (2.41)$$

tal que,

$$\mathcal{H}_{GSW} = \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle, m, m'} \left[t_{0, m'}^{m, 0} b_{\mathbf{r}, m}^\dagger b_{\mathbf{r}', m} + t_{m', 0}^{m, 0} b_{\mathbf{r}, m}^\dagger b_{\mathbf{r}', m}^\dagger + h.c \right] + 2d \sum_{\mathbf{r}, m, m'} \left[t_{0, 0}^{m, m'} - t_{0, 0}^{0, 0} \delta_{m, m'} \right] b_{\mathbf{r}, m}^\dagger b_{\mathbf{r}, m'}, \quad (2.42)$$

onde:

$$t_{m_2, m_3}^{m_0, m_1} = J_L \left(\sum_\nu a_\nu S_{m_0, m_1}^\nu S_{m_2, m_3}^\nu \right) + J_Q \left(\sum_{\nu, \mu} a_\nu a_\mu S_{m_0, m_1}^{\nu\mu} S_{m_2, m_3}^{\nu\mu} \right). \quad (2.43)$$

O resultado na Eq. (2.41) é a forma mais compacta da expansão do hamiltoniano (2.39). Recordando o resultado obtido na Eq.(2.35), quando fizemos o produto dos operadores $X_{\mathbf{r}} X_{\mathbf{r}'}$, os termos que não violavam nossa condição de mais que dois bôsons eram aqueles que possuíam o produto de elementos de matriz com ao menos dois índices iguais a zero, os quais todos se encontram em (2.41), exceto por aqueles que continham apenas um bôson, ou três índices zero em seus elementos de matrizes. Esses termos se cancelam um a um ao avaliar os termos das matrizes, como não poderia ser diferente, afinal, estamos expandindo em torno do estado $|\psi\rangle$ que minimiza a energia do nosso sistema, como definido na Eq.(2.32).

Colocando os bôsons no espaço de momento (tal como feito no caso SU(2)), em completa similaridade com o (SALINAS, 2008) e (AUERBACH, 2012), obtemos, para \mathcal{H}_{GSW} :

$$\mathcal{H}_{GSW} = \sum_{\mathbf{k}, m, m'} \left[t_{0, m'}^{m, 0} \gamma_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}, m}^\dagger b_{\mathbf{k}, m} + t_{m', 0}^{m, 0} \gamma_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}, m}^\dagger b_{\mathbf{k}, m}^\dagger + h.c \right] + 2d \sum_{\mathbf{k}, m, m'} \left[t_{0, 0}^{m, m'} - t_{0, 0}^{0, 0} \delta_{m, m'} \right] b_{\mathbf{k}, m}^\dagger b_{\mathbf{k}, m'} \\ \gamma_{\mathbf{k}}^+ = \sum_{q=1}^d e^{ik_q} \quad (2.44)$$

Devido à estrutura específica deste hamiltoniano, não há um elemento de matriz com m ou m' maior que dois, salvo pelo último termo, que é multiplicado por $2d$. Isso é esperado tanto pela estrutura $SU(3)$, sob a qual o hamiltoniano recai em condições específicas, como pela análise mediante a introdução dos operadores S^+ e S^- do $SU(2)$.

2.3.1.1 O caso ferromagnético

Ao substituir nosso parâmetro definidor do caso ferro, $\mathbf{a} = (1, 1, 1)$ em \mathcal{H}_{GSW} , eliminamos, pela simetria dos termos $t_{m_2, m_3}^{m_0, m_1}$, os operadores bosônicos do tipo bb e $b^\dagger b^\dagger$, além de garantir que não existem termos no sistema tais que $m \neq m'$.

O resultado é um hamiltoniano digonal com relações de dispersão específicas para cada m da forma:

$$\mathcal{H}_{GSW}^{FM} = \sum_{m=1}^{2S} \xi_{\mathbf{k}, m}^f b_{\mathbf{k}, m}^\dagger b_{\mathbf{k}, m}, \quad (2.45)$$

onde, para $m \leq 2$ (consequência da forma do hamiltoniano), $\xi_{\mathbf{k}, m}^f$ é:

$$\xi_{\mathbf{k}, 1}^f = -JS \left[\cos(\alpha) + 2 \left(1 - \frac{1}{S} \right) \sin(\alpha) \right] (2d - \gamma_{\mathbf{k}}), \quad \gamma_{\mathbf{k}} = \sum_{q=1}^d 2 \cos(k_q) \\ \xi_{\mathbf{k}, 2}^f = -4dJS \left[\cos(\alpha) + \left(2 - 4S + \frac{1}{S^2} \right) \sin(\alpha) \right] - 2J \left(1 - \frac{1}{2S} \right) \sin(\alpha) (2d - \gamma_{\mathbf{k}}), \quad (2.46)$$

Para os outros termos ($3 \leq m \leq 2S$), a dispersão é nada mais que um termo contínuo em \mathbf{k} :

$$\xi_{\mathbf{k}, m}^f = -2mdJS \left[\cos(\alpha) + \left(2 - \frac{(m+1)}{S} + \frac{(m-1)}{2S^2} \right) \sin(\alpha) \right] \quad (2.47)$$

O hamiltoniano é estável desde que se imponha que $\xi_{\mathbf{k}, m}^f > 0$ para qualquer \mathbf{k} . Disso extraímos as seguintes condições:

$$S \cos(\alpha) + 2(S-1) \sin(\alpha) < 0 \\ S \cos(\alpha) + \left(2S - 3 + \frac{1}{2S} \right) \sin(\alpha) + \left(1 - \frac{1}{2S} \right) |\sin(\alpha)| < 0 \\ S \cos(\alpha) + \left(2S - m - 1 + \frac{m-1}{2S} \right) \sin(\alpha) < 0 \quad (2.48)$$

As relações de dispersão para o caso $S = 1$ estão representadas na Figura 1, onde se destacam três regimes para o sistema. O primeiro caso, para $\alpha = \pi$, recupera o hamiltoniano de Heisenberg e devolve uma curva, em vermelho, equivalente ao resultado que seria gerado no tratamento desse sistema pelo método SWT. A segunda imagem apresenta as dispersões num dos casos-limite da definição de estabilidade, de modo que encontramos

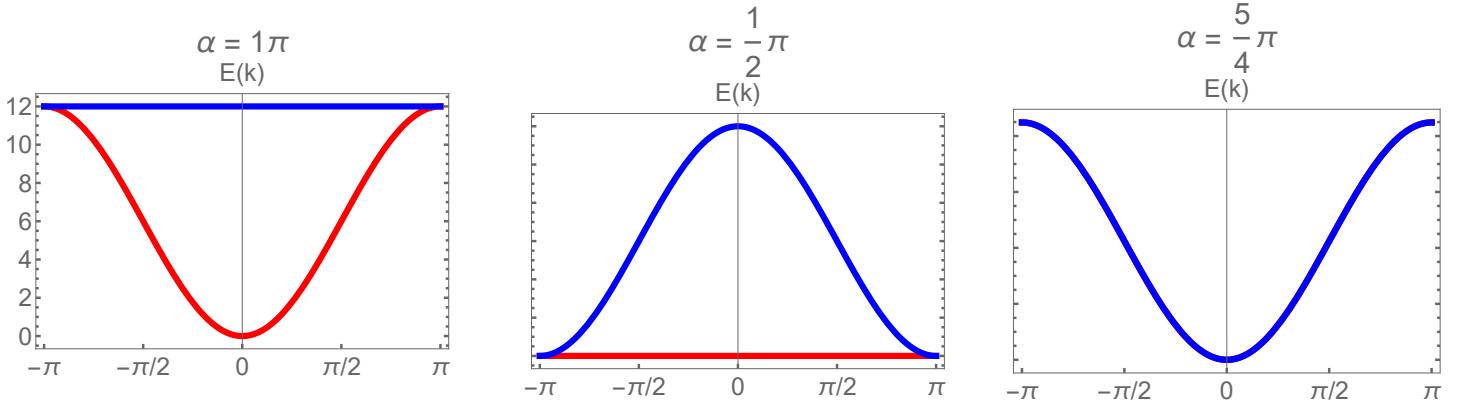


Figura 1 – Relações de dispersão FM para $S = 1$ ao longo do vetor $\mathbf{k} = (1, 1, 1)$. Em vermelho: $m = 1$; Em azul: $m = 2$
(a): $\alpha = \pi$, caso sem o termo biquadrático; (b): $\alpha = \pi/2$, limite instável; (c): $\alpha = 5\pi/4$, caso degenerado com simetria SU(3)

uma dispersão contínua com energia zero. A terceira é a dispersão do caso especial no qual $J_L = J_Q$, um ponto de simetria SU(3) no qual tanto os bôsons $m = 1$ e $m = 2$ convergem.

2.3.1.2 O caso antiferromagnético

Ao aplicar a condição definidora do antiferro, $\mathbf{a} = (1, -1, -1)$, à Eq.(2.41), obtemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{GSW}^{AFM} &= \sum_{\mathbf{k}, m} U_m b_{\mathbf{k}, m}^\dagger b_{\mathbf{k}, m} + V_{\mathbf{k}, m} \left(b_{\mathbf{k}, m}^\dagger b_{-\mathbf{k}, m}^\dagger + b_{\mathbf{k}, m} b_{-\mathbf{k}, m} \right), \\ U_m &= 2mdJS \left[\cos(\alpha) - \left(2 - \frac{(m+1)}{S} + \frac{(m+1)}{2S^2} \right) \sin(\alpha) \right], \\ V_{\mathbf{k}, 1} &= JS \left[\cos(\alpha) - \left(2 - \frac{2}{S} + \frac{1}{S^2} \right) \right] \frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{2}, \quad V_{\mathbf{k}, 2} = 2J \left(1 - \frac{1}{2S} \right) \sin(\alpha) \frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{2}, \end{aligned} \quad (2.49)$$

onde novamente os termos lineares dos bôsons foram eliminados por simetria, motivo o mesmo que força, através da forma de $t_{m_2, m_3}^{m_0, m_1}$, que não haja nenhum elemento tal que $m \neq m'$. Observa-se que os fatores $D_{\mathbf{k}, m}$ só existem para um e dois, tal como as dispersões no caso ferromagnético só possuem dependência em \mathbf{k} nas mesmas “espécies” de bôsons. $\gamma_{\mathbf{k}}$ segue a mesma definição que na Eq. (2.46).

A partir daqui, o hamiltoniano pode ser tratado em completa analogia ao que foi feito no caso antiferromagnético SU(2), como ilustrado em (AUERBACH, 2012). Aplicamos uma transformação de Bogoliubov e diagonalizamos o sistema, de modo que $U_m \equiv B_k$ e $V_{\mathbf{k}, m} = C_k$ na resolução da seção SU(2) e $\tilde{b}_{\mathbf{k}, m}$ são os novos bôsons definidos na transformação.

Nosso hamiltoniano se torna:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{GSW}^{AFM} &= \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi_{\mathbf{k}, 1}^{af} \tilde{b}_{\mathbf{k}, 1}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}, 1} + \xi_{\mathbf{k}, 2}^{af} \tilde{b}_{\mathbf{k}, 2}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}, 2} \right) + \sum_{m=3}^{2S} U_m \tilde{b}_{\mathbf{k}, m}^\dagger \tilde{b}_{\mathbf{k}, m}, \\ \xi_{\mathbf{k}, 1}^{af} &= J \left[S \cos(\alpha) - \left(2S - 2 + \frac{1}{S} \right) \sin(\alpha) \right] \sqrt{4d^2 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}, \\ \xi_{\mathbf{k}, 2}^{af} &= \sqrt{(U_2)^2 - 4J^2 \left(1 - \frac{1}{2S} \right)^2 \sin^2(\alpha) (\gamma_{\mathbf{k}})^2}. \end{aligned} \quad (2.50)$$

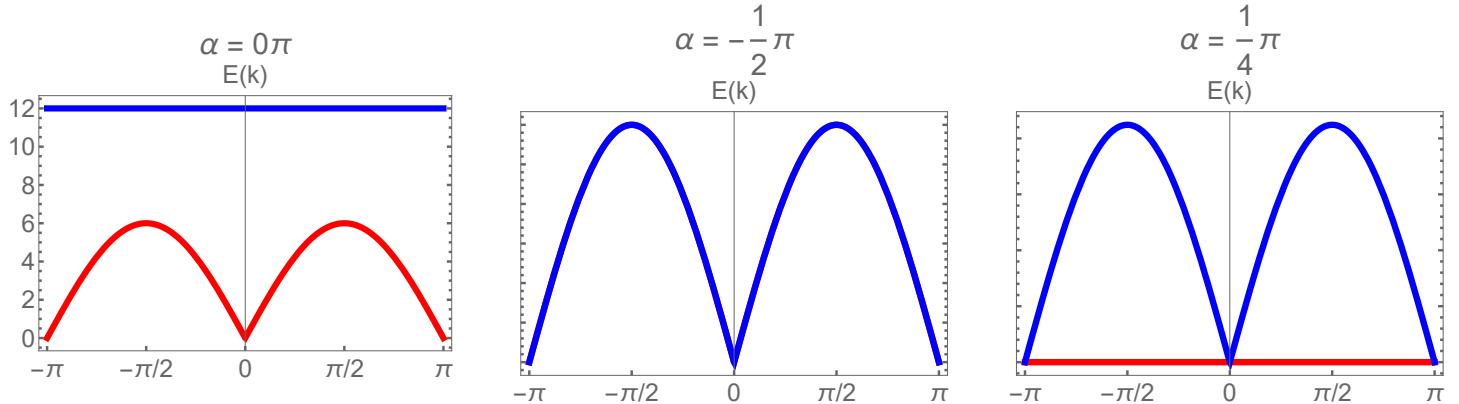


Figura 2 – Relações de dispersão AFM para $S = 1$ ao longo do vetor $\mathbf{k} = (1, 1, 1)$. Em vermelho, $m = 1$; em azul, $m = 2$. (a) $\alpha = 0$, caso sem o termo biquadrático. (b) $\alpha = -\pi/2$, limite instável inferior. (c) $\alpha = \pi/4$, limite instável superior.

Tal como no caso ferromagnético, a estabilidade dos estados jaz na imposição de que suas energias não se tornem negativas para qualquer \mathbf{k} , o que indicaria que a escolha do estado fundamental clássico sob o qual os bósons são definidos se torna instável, potencialmente levando a uma transição de fase. Disso, obtém-se as seguintes relações:

$$\begin{aligned} S \cos(\alpha) - \left(2S - 2 + \frac{1}{S}\right) \sin(\alpha) &> 0 \\ S \cos(\alpha) - \left(2S - 3 + \frac{3}{2S}\right) \sin(\alpha) - \left(1 - \frac{1}{2S}\right) |\sin(\alpha)| &> 0 \\ S \cos(\alpha) - \left(2S - m - 1 + \frac{(m+1)}{2S}\right) \sin(\alpha) &> 0 \end{aligned} \quad (2.51)$$

As relações de dispersão para o caso $S = 1$ são retratadas nos gráficos da Figura 2. O caso um ($\alpha = 0$) exibe o típico resultado antiferromagnético, equivalente ao resultado SWT, salvo pela faixa constante. O segundo ($\alpha = -\pi/2$) é um caso limite com simetria SU(3). O último caso ($\alpha = \pi/4$) exibe um comportamento do sistema no limiar das condições de estabilidade, com um ramo com energia zero.

2.3.2 Propriedades termodinâmicas

Em posse das relações de dispersão do hamiltoniano bilinear biquadrático, tanto no caso do ferro como no do antiferro, somos capazes de calcular sua função de partição e , daí, extraír algumas das propriedades do sistema. É importante lembrar que todo o tratamento aqui feito é para um sistema a baixas temperaturas, isto é, $T \rightarrow 0$. Ao fazer isso, estamos isolando nossa leitura apenas às perturbações de mais baixa energia em torno do estado minimizado no qual as expansões foram feitas.

Expandindo $\gamma_{\mathbf{k}}$, das relações de dispersão, até primeira ordem em \mathbf{k} , obtemos:

$$\gamma_{\mathbf{k}} \approx 2 \left(\sum_{q=1}^d 1 - \frac{k_q^2}{2} \right) = \left(2d - \sum_{q=1}^d k_q^2 \right) \rightarrow \gamma_{\mathbf{k}}^2 \approx 4d^2 - 4d \sum_{q=1}^d k_q^2 + \mathcal{O}(k_q^4). \quad (2.52)$$

Ao colocar essa definição nas dispersões de $m = 1$ e $m = 2$ para o caso ferro obtém-se:

$$\begin{aligned}\xi_{\mathbf{k},1}^f &= -JS \left(\cos(\alpha) + 2 \left(1 - \frac{1}{S} \right) \sin(\alpha) \right) \left(\sum_{q=1}^d k_q^2 \right), \\ \xi_{\mathbf{k},2}^f &= -4dJS \left[\cos(\alpha) + \left(2 - \frac{4}{S} + \frac{1}{S^2} \right) \sin(\alpha) \right] - 2J \left(1 - \frac{1}{S} \right) \sin(\alpha) \left(\sum_{q=1}^d k_q^2 \right),\end{aligned}\quad (2.53)$$

enquanto para o caso antiferro:

$$\begin{aligned}\xi_{\mathbf{k},1}^{af} &= J \left[S \cos(\alpha) - \left(2S - S + \frac{1}{S} \right) \sin(\alpha) \right] \sqrt{4d \sum_{q=1}^d k_q^2 - \mathcal{O}(k_q^4)} \quad , \\ \xi_{\mathbf{k},2}^{af} &= \sqrt{(U_2)^2 - 4J^2 \left(1 - \frac{1}{2S^2} \right)^2 \sin^2(\alpha) \left(4d^2 - 4d \sum_{q=1}^d k_q^2 + \mathcal{O}(k_q^4) \right)} \quad .\end{aligned}\quad (2.54)$$

Os casos para $m \geq 3$ seguem sem alteração para as dispersões desse hamiltoniano. A função de partição é, por se tratarem de bôsons, tal como definida em (SALINAS, 2008):

$$\mathcal{Z} = \prod_{\mathbf{k}} \prod_{m=1}^{N-1} (1 - \exp(-\beta \xi_{\mathbf{k},m}))^{-1} \quad (2.55)$$

A função de partição, \mathcal{Z} , é uma descrição estatística do sistema que considera todas as possibilidades de ocupação dos níveis de energia permitidos de modo que o seu total seja bem definido, podendo, portanto, ser relacionada com a energia interna por partícula, u , que, por definição da termodinâmica, induz uma grandeza característica do sistema, o calor específico a volume constante, C_V . Suas definições são:

$$u = -\frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \beta} (\ln(\mathcal{Z})), \quad C_V = \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_V. \quad (2.56)$$

$$\begin{aligned}u &= \sum_{m=1}^{N-1} \frac{1}{N} \int \frac{L^d}{(2\pi)^d} \frac{\xi_{\mathbf{k},m} dk^d}{(\exp(\beta \xi_{\mathbf{k},m}) - 1)}, \\ C_V &= \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_V = \sum_{m=1}^{N-1} \frac{1}{N} \frac{k_B \beta^2 L^d}{(2\pi)^d} \int \frac{(\xi_{\mathbf{k},m})^2 e^{\beta \xi_{\mathbf{k},m}} dk^d}{(\exp(\beta \xi_{\mathbf{k},m}) - 1)^2}.\end{aligned}\quad (2.57)$$

Onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B sendo a constante de Boltzmann e T a temperatura. Como estamos tratando o caso de temperaturas pequenas, a contribuição principal se deve ao ramo, em ambos os casos, de $m = 1$. O caso ferro em três dimensões é, portanto:

$$\xi_{\mathbf{k},1}^f = -JS \left(\cos(\alpha) + 2 \left(1 - \frac{1}{S} \right) \sin(\alpha) \right) \left(\sum_{q=1}^d k_q^2 \right) = A \left(\sum_{q=1}^d k_q^2 \right), \quad (2.58)$$

$$C_V \approx \frac{1}{N} \int \frac{L^3 4\pi}{(2\pi)^3} \frac{(Ak^2)^2 e^{\beta Ak^2} k_B \beta^2 k^2 dk}{(\exp(\beta Ak^2) - 1)^2} = \frac{L^3 k_B}{2N (2\pi)^2} \frac{1}{(\beta A)^{3/2}} \int_0^\infty \frac{x^{5/2} e^x dx}{(e^x - 1)^2},$$

onde foi usada a substituição $x = \beta Ak^2$ depois de colocar a integral em coordenadas esféricas.

O caso antiferro procede de modo similar, ignorando os termos de $\mathcal{O}(k_q^4)$, e considerando que maior contribuição é dada pela dispersão dos bôsons com $m = 1$:

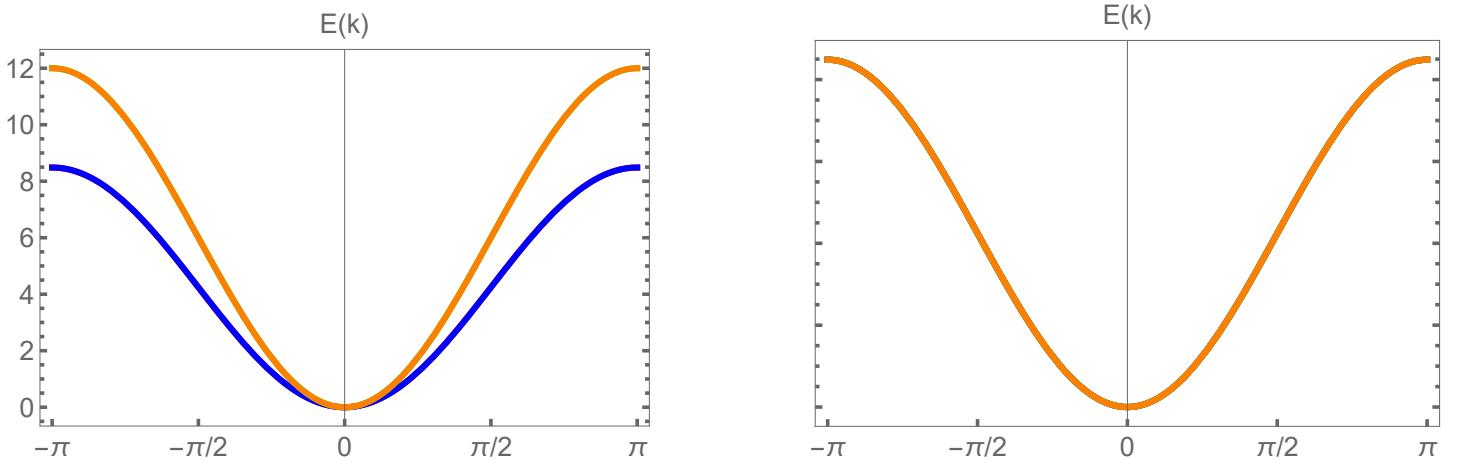


Figura 3 – Comparação do espectro ferromagnético do modelo bilinear biquadrático (em azul) com o do hamiltoniano $SU(N)$ (em laranja). O constante de troca $J = -1$ foi aplicado ao hamiltoniano $SU(N)$. Gráficos tomados ao longo do vetor $\mathbf{k} = (1, 1, 1)$. (a) Não normalizado; (b) Com o hamiltoniano $SU(N)$ multiplicado por $1/\sqrt{2}$.

$$\xi_{\mathbf{k},1}^{af} = J \left[S \cos(\alpha) - \left(2S - S + \frac{1}{S} \right) \sin(\alpha) \right] \sqrt{4d \sum_{q=1}^d k_q^2} - \mathcal{O}(k_q^4) \approx A \left(\sqrt{\sum_{q=1}^d k_q^2} \right), \quad (2.59)$$

$$C_V \approx \frac{1}{N} \int \frac{L^3 4\pi}{(2\pi)^3} \frac{(Ak)^2 e^{\beta Ak} k_B \beta^2 k^2 dk}{(\exp(\beta Ak) - 1)^2} = \frac{L^3 k_B}{N (2\pi)^2} \frac{1}{(\beta A)^3} \int_0^\infty \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2},$$

onde foi usada a substituição $x = \beta Ak$ após implementar as coordenadas esféricas.

Com isso, mostramos que, para o caso de baixas temperaturas, $T \rightarrow 0$, o tratamento de ondas de spin em $SU(N)$ recupera os resultados usuais do calor específico para o ferro, $C_V \propto T^{3/2}$, e o antiferro, $C_V \propto T^3$ ao eliminar o efeito dos bósons com gap. Os ramos extras presentes na teoria podem levar, no entanto, a alguns efeitos. Para o caso em que o hamiltoniano apresenta simetria $SU(N)$, os ramos podem ser degenerados, no calor específico, que é aditivo nos ramos, isso levaria a uma constante multiplicativa no resultado final, mas não alteraria a lei de potência.

2.4 O caso degenerado e os geradores $SU(N)$

É possível escrever um hamiltoniano com simetria $SU(N)$ da forma:

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle, m, m'} O_{\mathbf{r}}^{m, m'} O_{\mathbf{r}'}^{m', m} = \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle, m, m'} (b_{\mathbf{r}, m}^\dagger b_{\mathbf{r}, m'}) (b_{\mathbf{r}', m'}^\dagger b_{\mathbf{r}', m}), \quad (2.60)$$

cujos termos podem ser analisados em três casos distintos. $m = m' = 0$; $m = 0$ com $m' \neq 0$ e $m \neq 0$ com $m' = 0$. Para os propósitos dessa expansão, seja:

$$\Delta = \sum_{m=1}^{2S} b_{\mathbf{r}, m}^\dagger b_{\mathbf{r}, m}, \quad (2.61)$$

onde, para os propósitos dessa conta, se o termo é em função de \mathbf{r} , \mathbf{r}' , m ou m' é indiferente. Obtemos então:

$$\begin{aligned}
m = m' = 0 &\rightarrow \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left(\sqrt{1 - \Delta} \sqrt{1 - \Delta} \right)_{\mathbf{r}} \left(\sqrt{1 - \Delta} \sqrt{1 - \Delta} \right)_{\mathbf{r}'} \\
m' = 0, m \neq 0 &\rightarrow \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle m' \neq 0} b_{\mathbf{r}, m}^\dagger \left(\sqrt{1 - \Delta} \right)_{\mathbf{r}} \left(\sqrt{1 - \Delta} \right)_{\mathbf{r}'} b_{\mathbf{r}', m} \\
m = 0, m' \neq 0 &\rightarrow \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle m' \neq 0} \left(\sqrt{1 - \Delta} \right)_{\mathbf{r}} b_{\mathbf{r}, m'} b_{\mathbf{r}', m'}^\dagger \left(\sqrt{1 - \Delta} \right)_{\mathbf{r}'}
\end{aligned} \tag{2.62}$$

Expandindo as raízes até primeira ordem e mantendo apenas termos com até dois operadores bosônicos, obtemos o seguinte:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left(1 - \sum_{m=1}^{N-1} b_{\mathbf{r}, m}^\dagger b_{\mathbf{r}, m} - \sum_{m'=1}^{N-1} b_{\mathbf{r}', m'}^\dagger b_{\mathbf{r}', m'} + \sum_{m=1}^{N-1} b_{\mathbf{r}, m}^\dagger b_{\mathbf{r}', m} + \sum_{m'=1}^{N-1} b_{\mathbf{r}', m'}^\dagger b_{\mathbf{r}, m'} \right), \\
&= \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left(1 + \sum_{m=1}^{N-1} \left(b_{\mathbf{r}, m}^\dagger b_{\mathbf{r}', m} + b_{\mathbf{r}', m}^\dagger b_{\mathbf{r}, m} \right) - 2 \sum_{m'=1}^{N-1} b_{\mathbf{r}, m}^\dagger b_{\mathbf{r}, m'} \right).
\end{aligned} \tag{2.63}$$

Colocando esse hamiltoniano no espaço dos momentos como definido pela Eq.(2.9), temos:

$$\mathcal{H} = \frac{\mathcal{Z}}{2} N + \sum_{\mathbf{k}, m} b_{\mathbf{k}, m}^\dagger b_{\mathbf{k}, m} \left(-\mathcal{Z} + \sum_{q=1}^d 2 \cos(k_q) \right) \tag{2.64}$$

Comparando a dispersão desse hamiltoniano com o caso degenerado do modelo bilinear-biquadrático, no ponto de simetria $SU(3)$, concluímos que são idênticos, salvo por um fator de normalização, como mostrado na figura 3.

Embora a comparação aqui feita seja somente em relação ao $SU(3)$, vale notar que a dispersão gerada pelo hamiltoniano aqui descrito é idêntica independentemente do N em questão e, portanto, do S do sistema, pois todas as espécies de bósons assumirão o mesmo comportamento.

3 Conclusões e considerações finais

Na análise do hamiltoniano bilinear-biquadrático encontramos resultados equivalentes, seja pelo tratamento com a teoria usual, SWT, ou pela aplicação da ferramenta generalizada, GSWT, para o limite de temperatura zero, no qual os bósons sem gap possuem a maior contribuição, obtendo-se as leis de potências esperadas para o calor específico, tanto para o caso ferromagnético como para o antiferromagnético. As divergências, contudo, são evidentes ao se observar os espectros dos mágmons de cada um. As dispersões do caso de $m = 1$ (estado mais populado a baixas energias) se reduzem à mesma coisa nos casos em que retornamos ao âmbito usual da SWT, ou seja, ao eliminar o termo biquadrático ou ao tender para o limite de spin S grande. Para os demais casos, a GSWT apresenta uma sensibilidade ao valor do spin S , o que não está presente na contraparte SWT, além de possuir outras “espécies” de mágmons em sua dispersão que não constam na teoria usual.

Torna-se claro que, para o estudo de casos com spins maiores que $1/2$, pode-se tratar esses sistemas magnéticos em termos de mágmons que obedecem à simetria $SU(N)$, onde $N = 2S + 1$. Essa abordagem acomoda não somente os hamiltonianos que possuem essa simetria específica, como também abarca os casos que são, em geral, simétricos apenas com relação ao $SU(2)$, tal qual o modelo bilinear-biquadrático de spin 1. O tratamento do problema com $SU(N)$ possui a vantagem de naturalmente interpolar para os pontos de simetria mais alta, que existem em pontos específicos desse hamiltoniano, de modo eficiente.

A abordagem aqui descrita permite tratar casos de ordenamentos além dos dipolares (quadrupolares, octopolares e assim por diante), perspectiva a qual se pode ter para trabalhos futuros, explorando sistemas tais como (LÄUCHLI; SCHMID; TREBST, 2006), (WIERSCHEM *et al.*, 2012) e (LUO; DATTA; YAO, 2016).

Referências

- AUERBACH, A. **Interacting Electrons and Quantum Magnetism**. Springer New York, 2012. (Graduate Texts in Contemporary Physics). ISBN 9781461208693. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=d-sHCAAAQBAJ>>.
- COLPA, J. Diagonalization of the quadratic boson hamiltonian. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 93, n. 3, p. 327–353, 1978. ISSN 0378-4371. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0378437178901607>>.
- CRISPIM, A. E. **Propriedades de transporte em sistemas com ordenamento magnético e interação spin-órbita**. 2024. Dissertação (Dissertação (Mestrado em Física)) — Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, SP, 2024. 1 recurso online (98 p.). Disponível em: <<https://hdl.handle.net/20.500.12733/27924>>.
- FERREIRA, L. A. Lecture notes on lie algebras and lie groups. **IFT/UNESP**, 2000.
- HOLSTEIN, T.; PRIMAKOFF, H. Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 58, p. 1098–1113, Dec 1940. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.58.1098>>.
- IACHELLO, F. **Lie algebras and applications**. [S.l.]: Springer, 2006. v. 708.
- LÄUCHLI, A.; SCHMID, G.; TREBST, S. Spin nematics correlations in bilinear-biquadratic $s = 1$ spin chains. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 74, p. 144426, Oct 2006. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.144426>>.
- LUO, C.; DATTA, T.; YAO, D.-X. Spin and quadrupolar orders in the spin-1 bilinear-biquadratic model for iron-based superconductors. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 93, p. 235148, Jun 2016. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.93.235148>>.
- MUNIZ, R. A.; KATO, Y.; BATISTA, C. D. Programs of the generalized spin-wave theory: Application to the bilinear-biquadratic model. **Progress of Theoretical Physics**, v. 112, n. 2, p. 123–145, ago. 2014. DOI: 10.1093/ptep/ptu083. Disponível em: <<https://doi.org/10.1093/ptep/ptu083>>.
- SALINAS, S. **Introdução à Física Estatística**. São Paulo: EDUSP, 2008. ISBN 9788531403866. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=cAlP3sc0K44C>>.
- SHAPIRO, J. A. Group theory in physics. **Lecture Notes, Rutgers University, New Brunswick, NJ**, 2017.
- WIERSCHEM, K. *et al.* Magnetic and nematic orderings in spin-1 antiferromagnets with single-ion anisotropy. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 86, p. 201108, Nov 2012. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.86.201108>>.