

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

**Gabriel Capelo Domingues**

**Processos de magnetização em magnetos frustrados**

**São Carlos**

**2023**



**Gabriel Capelo Domingues**

## **Processos de magnetização em magnetos frustrados**

Trabalho de conclusão de curso apresentado  
ao Instituto de Física de São Carlos  
Universidade de São Paulo, como parte  
dos requisitos para obtenção do título de  
Bacharel.

Área de concentração: Física Teórica e  
Experimental

Orientador: Prof. Dr. Eric de Castro e  
Andrade

**São Carlos**

**2023**

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.

Domingues, Gabriel Capelo  
Processos de magnetização em magnetos frustrados /  
Gabriel Capelo Domingues; orientador Eric de Castro e  
Andrade -- São Carlos, 2023.  
29 p.

Trabalho de Conclusão de Curso (Física Teórica e  
Experimental) -- Instituto de Física de São Carlos,  
Universidade de São Paulo, 2023.

1. Magnetismo frustrado. 2. Platôs de magnetização. 3.  
Transições de fase magnéticas. I. Andrade, Eric de Castro  
e, orient. II. Título.

## RESUMO

Frustração geométrica é a incapacidade de satisfazer simultaneamente todas as interações locais em sistemas de momentos magnéticos localizados, podendo levar a uma grande degenerescência de estados fundamentais. Ainda que o sistema mostre ordem de longo alcance a baixas temperaturas, a frustração deixa marcas indeléveis, que aparecem em diferentes observáveis físicos. Um exemplo marcante é o processo de magnetização de um sistema antiferromagnético bidimensional com geometria triangular. Aqui, colocamos esse magneto em um campo magnético e estudamos como a magnetização uniforme evolui com o aumento do campo externo até atingir o estado dito polarizado. Observa-se nesse caso um platô de magnetização para uma faixa de valores do campo. Neste projeto investigamos o comportamento de um modelo de spins na rede triangular na presença de um campo magnético externo, incluindo flutuações térmicas e quânticas. Em particular, a primeira parte do projeto será dedicada ao estudo do limite clássico do modelo de Heisenberg antiferromagnético, onde os spins são tratados como vetores. Discutiremos a curva de magnetização para temperatura nula e demonstraremos uma degenerescência massiva no estado fundamental. Em seguida, consideraremos a introdução de flutuações térmicas, que fornecerão um exemplo de mecanismo de ordem por desordem, levantando a degenerescência. Isso será feito utilizando uma teoria de perturbação termodinâmica. Entendido o caso clássico, trataremos agora do modelo de Heisenberg em sua versão quântica para a mesma rede triangular, no regime complementar de  $T = 0$ . Isso será feito utilizando o formalismo de ondas de spin. Como demonstraremos, esse método representa uma expansão em uma série de potências de  $1/S$  em relação ao equivalente clássico, onde  $S$  é o tamanho do spin. Essas correções são o que entendemos como flutuações quânticas e mostraremos que selecionam os mesmos estados que as flutuações térmicas, dando grande robustez ao formalismo. Mostraremos a emergência do platô de magnetização e que sua extensão é função do tamanho do spin. Por surgir nesse tratamento perturbativo, esse platô é conhecido como semiclássico, em contraste ao platô observado em sistemas Hall quântico, por exemplo. Discutiremos exemplos experimentais em que o platô é observado, ilustrando a riqueza de fenômenos em magnetos frustrados, e apontando futuras direções de trabalho.

**Palavras-chave:** Magnetismo frustrado. Platôs de magnetização. Transições de fase magnéticas.

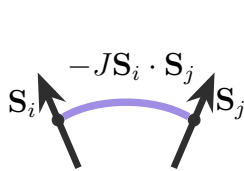
## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO . . . . .</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>LIMITE CLÁSSICO DO MODELO DE HEISENBERG . . . . .</b>	<b>9</b>
<b>2.1</b>	<b>Limite de <math>S</math> grande . . . . .</b>	<b>9</b>
2.1.1	Estado fundamental clássico . . . . .	9
2.1.2	Degenerescência massiva . . . . .	10
<b>2.2</b>	<b>Ordem por desordem . . . . .</b>	<b>11</b>
2.2.1	Teoria de perturbação no espaço real: Flutuações térmicas . . . . .	11
<b>2.3</b>	<b>Termo biquadrático . . . . .</b>	<b>14</b>
<b>2.4</b>	<b>Transições de fase . . . . .</b>	<b>16</b>
2.4.1	Transição do estado $Y$ para o $uud$ . . . . .	16
2.4.2	Transição do estado $uud$ para o $V$ . . . . .	17
2.4.3	Transição do estado $V$ para o estado polarizado . . . . .	17
<b>3</b>	<b>FORMALISMO DE ONDAS DE SPIN . . . . .</b>	<b>19</b>
<b>3.1</b>	<b>Transformações de Bogoliubov . . . . .</b>	<b>21</b>
<b>3.2</b>	<b>Comparação de energias . . . . .</b>	<b>22</b>
<b>3.3</b>	<b>Método variacional . . . . .</b>	<b>23</b>
<b>4</b>	<b>CONCLUSÃO . . . . .</b>	<b>25</b>
	<b>REFERÊNCIAS . . . . .</b>	<b>27</b>

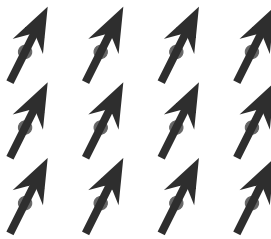


## 1 INTRODUÇÃO

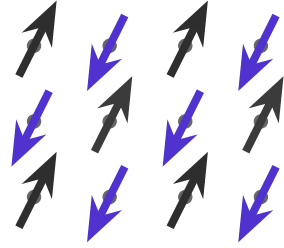
O magnetismo é um fenômeno físico que está presente desde o imã de geladeira até disco rígido, compondo um dos mais antigos tópicos de estudo da Física. O primeiro ingrediente que precisamos para explicar esse fenômeno é uma coleção de momentos magnéticos, por exemplo, resultantes de *spins* desemparelhados das camadas de valência de um conjunto de átomos. Suponha um material em uma rede periódica, como um cristal, onde nos sítios  $i$  da rede temos tais momentos magnéticos  $\mathbf{S}_i$ . O segundo ingrediente é uma interação entre eles. Adotamos um modelo dito de interação de troca, onde a energia entre pares de spins é dada por  $E_{ij} = -J\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ , sendo  $J$  uma constante positiva, denominada constante de troca magnética, Figura (1a). Notamos que a energia é minimizada quando  $\mathbf{S}_i$  é paralelo a  $\mathbf{S}_j$ . Num regime de baixas temperaturas, o sistema terá uma tendência de minimizar as energias de todas essas interações locais, o que pode ser feito quando todos os momentos apontam numa mesma direção. O sistema irá apresentar o que chamamos de ordem de longo alcance, onde dois spins, mesmo de sítios distantes, estão correlacionados, no sentido de que apontam todos numa mesma direção. Essa é a essência do ferromagnetismo, onde interações locais produzem um fenômeno cooperativo gerando uma magnetização resultante perceptível em uma escala macroscópica, Figura (1b).



(a) Interação de troca.



(b) Ordem ferromagnética.



(c) Ordem antiferromagnética.

Figura 1 – Ilustração da ordem de longo alcance a partir da interação entre spins vizinhos.

Fonte: Elaborada pelo autor.

O sistema que acabamos de descrever é um exemplo de sistema magnético de momentos localizados. Em suma, ao invés de termos transporte de elétrons nessa rede, a repulsão columbiana é suficiente para manter os elétrons presos nos sítios, e então a interação entre os momentos magnéticos se torna o foco do estudo. Descrevemos acima uma interação do tipo ferromagnética, mas podemos ter também uma interação antiferromagnética trocando  $-J \rightarrow J$  na energia  $E_{ij}$ . Se antes os spins se alinhavam para minimizar a energia, agora a condição é de apontarem em direção oposta. Neste caso, há também a possibilidade de ordem de longo alcance. Se imaginamos um sítio com spin  $\mathbf{S}$ , um vizinho teria de ter spin  $-\mathbf{S}$ . Um vizinho deste segundo precisaria ter spin  $\mathbf{S}$ , e o vizinho deste último teria spin  $-\mathbf{S}$ , assim por diante. A minimização da energia leva a uma bipartição da rede, onde



metade dos sítios tem spin  $\mathbf{S}$  e a outra metade  $-\mathbf{S}$ , o que é conhecido como estado de Néel, Figura (1c).

Convenientemente, nós conseguimos apresentar uma configuração que minimiza a energia da interação entre cada par de spins. Esse nem sempre é o caso, e para ilustrar isso, vamos considerar agora uma rede bidimensional triangular, Figura (2a). Considere novamente uma interação de troca antiferromagnética entre todos os primeiros vizinhos. Mesmo a nível de uma plaqueta triangular, notamos que não é possível minimizar a energia em todas as interações locais. Por exemplo, olhando para a Figura (2b), o spin no sítio 2 é oposto ao do sítio 1, mas o spin 3 não pode ser escolhido de forma a ser oposto a ambos 1 e 2. Em geral, vamos dizer que um sistema é frustrado se não for possível satisfazer todos os vínculos de minimizações de energias locais. Nesse caso em particular, temos uma frustração magnética de origem geométrica.

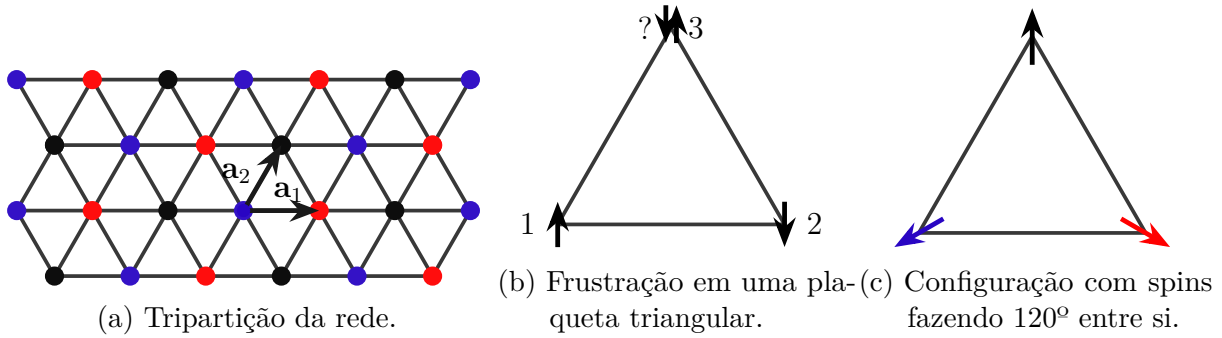


Figura 2 – Rede bidimensional triangular. Os vetores  $\mathbf{a}_1 = (1, 0)$  e  $\mathbf{a}_2 = (1/2, \sqrt{3}/2)$  estão ilustrados.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Usualmente, um efeito da frustração é causar uma degenerescência no estado fundamental, Ref. (1). As consequências física dessas degenerescências são profundas, com ramificações que são tema de pesquisa atuais, das quais podemos citar os líquidos de spins, Ref. (2). Como demonstraremos em mais detalhes, flutuações se tornam muito relevantes em alguns casos, e fazem o papel de levantar essa degenerescência.

Um fenômeno interessante inserido nesse contexto é o de platôs de magnetização. Um spin isolado  $\mathbf{S}$  na presença de um campo magnético  $\mathbf{H}$  tem uma energia dada por  $E = -\frac{g\mu_B\mu_0}{\hbar}\mathbf{H} \cdot \mathbf{S}$ , onde  $g$  é o fator giromagnético,  $\mu_B$  é magneton de Bohr e  $\hbar$  é a constante de Planck reduzida. No que se segue, definiremos  $\mathbf{h} \equiv \frac{g\mu_B\mu_0}{\hbar}\mathbf{H}$  para escrever  $E = -\mathbf{h} \cdot \mathbf{S}$ . Nos referiremos a  $\mathbf{h}$  como o campo magnético, mantendo em mente que estão aglutinadas todas as constantes. Consideremos agora o que é conhecido como modelo de Heisenberg com interação antiferromagnética entre primeiros vizinhos e na presença de um campo magnético externo, descrito pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mathbf{h} \cdot \sum_i \mathbf{S}_i. \quad (1.1)$$

Aqui os  $\mathbf{S}_i$  são operadores de spin nos sítios  $i$ . Pode-se mostrar que se  $|\mathbf{h}|$  é maior que um certo valor crítico  $h_c$  o estado fundamental do sistema é tal que todos os spins estão na direção do campo, conhecido como estado polarizado. No caso da rede triangular, para uma faixa de valores de campo menores que  $h_c$ , se olharmos para a magnetização do sistema,  $|\mathbf{m}| = |\sum_i \langle \mathbf{S}_i \rangle / N|$  (onde  $N$  é o número de sítios), observaremos um platô de magnetização em  $1/3$  da magnetização do estado polarizado. Esta é uma fase que tem análogo clássico, correspondendo a dois spin por plaqueta triangular na direção do campo, e o outro na direção oposta. Por esse motivo, esse platô é dito de natureza semiclássica, em contraste com outros platôs semelhantes onde a analogia falha, a exemplo do efeito Hall quântico, Ref.(3), ou de outro platô de magnetização, esse de  $1/9$  da magnetização do estado polarizado, observado na rede de Kagomé, Ref.(4). Este é um fenômeno que encontra realizações experimentais em alguns materiais. O nosso objetivo no que se segue é explicar o mecanismo do seu surgimento na rede triangular.

## 2 LIMITE CLÁSSICO DO MODELO DE HEISENBERG

Vamos portanto considerar o modelo de Heisenberg com interação antiferromagnética entre primeiros vizinhos na presença de uma campo magnético externo, descrito pelo hamiltoniano em Eq. (1.1). Esse é um modelo em que não temos uma solução geral, mesmo a temperatura  $T = 0$ . Considere o que seria o correspondente estado de Néel como na Figura (1c). Poderíamos representá-lo como um estado  $|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\dots\rangle$ . Uma aplicação direta do Hamiltoniano mostra que essa proposta natural nem mesmo é um autoestado. Veja que o espaço de Hilbert de um sistema de  $N$  partículas com spin  $1/2$  tem tamanho de  $2^N$  e, por isso, é um trabalho muito difícil o de encontrar o espectro de energia. Por esse motivo, recorreremos a soluções aproximadas.

Vamos fazer uma abordagem semiclássica. Partiremos do limite clássico do modelo, que explicaremos a seguir, obtendo as fases do sistema em função do campo. Em seguida, consideraremos correções às quantidades calculadas no regime puramente clássicos. Isso nos fornecerá estimativas para a resposta propriamente quântica, e por isso as entenderemos como correções quânticas, Ref.(5).

### 2.1 Limite de $S$ grande

Até o momento tínhamos tratado apenas do caso de operadores de spin  $1/2$ . Existem, no entanto, alguns mecanismos físicos que resultam em spins efetivos maiores, geralmente por acoplamento de spins. É de interesse escrever o hamiltoniano novamente,

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z - \mathbf{h} \cdot \sum \mathbf{S}_i, \quad (2.1)$$

mas nesse caso considerando o caso geral em que  $S_i^\mu$  é a componente  $\mu$  de um operador de spin  $S$ ,  $\mu = x, y, z$ . Esses operadores obedecem à álgebra  $[S_i^\mu, S_i^\nu] = i\hbar \sum_\gamma \varepsilon_{\mu\nu\gamma} S_i^\gamma$ , onde  $\varepsilon_{\mu\nu\gamma}$  é símbolo de Levi-Civita. Podemos reescalar os operadores  $S_i^\mu \rightarrow S_i^\mu/S$  para obter  $[\frac{S_i^\mu}{S}, \frac{S_i^\nu}{S}] = \frac{1}{S} i\hbar \sum_\gamma \varepsilon_{\mu\nu\gamma} (\frac{S_i^\gamma}{S})$ . Notamos por fim que, no limite  $S \rightarrow \infty$ , temos que  $[\frac{S_i^\mu}{S}, \frac{S_i^\nu}{S}] \rightarrow 0$ . Ou seja, as componentes do spin comutam entre si, de forma que podemos tratá-las como um componentes de um vetor em três dimensões. A esse limite damos o nome de limite clássico do modelo de Heisenberg.

#### 2.1.1 Estado fundamental clássico

Vamos então considerar a rede triangular, descrita pelos pontos  $\mathbf{r} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2$ ,  $n_1, n_2 \in \mathbb{Z}$ , como na Figura (2a). Em cada sítio vamos ter um vetor  $\mathbf{S}_i \in \mathbb{R}^3$  de tamanho  $|\mathbf{S}_i| = S$ . Agora, note que podemos reescrever tanto a primeira soma sobre vizinhos quanto a segunda sobre todos os sítios em somas sobre plaquetas triangulares, de forma que

$$\mathcal{H} = \sum_{\Delta} \left\{ \overbrace{\frac{J}{2} [\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_1]}^{\mathcal{H}_{\Delta}} - \frac{\mathbf{h}}{6} \cdot [\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3] \right\}, \quad (2.2)$$

onde o índice  $\Delta$  denota soma sobre plaquetas, e, digamos,  $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \mathbf{S}_3$  denotam os spins de uma plaqueta. O fator de  $1/2$  multiplicando  $J$  se dá porque cada ligação  $\langle ij \rangle$  participa de duas plaquetas. O fator de  $1/6$  para  $\mathbf{h}$  se dá porque cada sítio participa de 6 plaquetas. Denotando  $\mathbf{S}_{\Delta} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3$  e notando que  $(\mathbf{S}_{\Delta})^2 = 3S^2 + 2(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_1)$ , temos

$$\mathcal{H}_{\Delta} = \frac{J}{4}(\mathbf{S}_{\Delta})^2 - \frac{\mathbf{h}}{6} \cdot \mathbf{S}_{\Delta} - \frac{3}{4}JS^2 = \frac{J}{4} \left[ \mathbf{S}_{\Delta} - \frac{\mathbf{h}}{3J} \right]^2 - \frac{3}{4}JS^2 - \frac{h^2}{36J}, \quad (2.3)$$

onde  $h = |\mathbf{h}|$ . A minimização de  $\mathcal{H}_{\Delta}$  se dá zerando o quadrado  $(\mathbf{S}_{\Delta} - \mathbf{h}/3J)^2 = 0$ , desde que não seja proibido pela desigualdade triangular. Neste segundo caso, os spins saturam na direção do campo. As condições de minimização são, portanto,

$$\begin{cases} \mathbf{S}_{\Delta} = \mathbf{h}/3J & \text{se } h/3J < 3S, \\ \mathbf{S}_1 = \mathbf{S}_2 = \mathbf{S}_3 = S\hat{\mathbf{h}} & \text{se } h/3J \geq 3S, \end{cases} \quad (2.4)$$

para uma plaqueta com spins  $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \mathbf{S}_3$ . Essas condições são necessárias e suficientes. Dessa forma, temos uma cota inferior para a energia do estado fundamental,  $E_{\text{ef}} \geq N_{\Delta} \min(\mathcal{H}_{\Delta})$ , sendo  $N_{\Delta}$  o número de plaquetas. Agora, note que existem configurações de spins onde cada plaqueta tem exatamente uma tripla de spin que satisfaz os vínculos em Eq.(2.4). Para isso, basta tomar alguma tripla de spin que obedece às relações, digamos  $\mathbf{S}_1^{(0)}, \mathbf{S}_2^{(0)}, \mathbf{S}_3^{(0)}$ , bem como uma tripartição da rede, como na Figura (2a). Associando univocamente cada um desses vetores a uma cor (digamos  $\mathbf{S}_1^{(0)}$  à preta da figura,  $\mathbf{S}_2^{(0)}$  à azul, etc., veja a Figura (2c)), o preenchimento da rede dessa forma garante que cada plaqueta triangular tem exatamente um de cada da tripla. Concluimos, por fim, que o estado fundamental tem energia  $E_{\text{ef}} = N_{\Delta} \min(\mathcal{H}_{\Delta})$ , com configurações de spin dadas pelas relações em Eq. (2.4) para cada plaqueta.

### 2.1.2 Degenerescência massiva

Considerando primeiro o caso  $\mathbf{h} = 0$ , as configurações de spin que satisfazem a Eq.(2.4) têm a propriedade de serem coplanares com ângulo entre cada par de spin igual a  $120^\circ$  (veja Figura (2c)). Há uma degenerescência nas configurações, que corresponde a uma rotação rígida dos spins em torno de um eixo arbitrário, uma vez que preserva os ângulos relativos. Essa é uma degenerescência esperada, de acordo com a simetria da hamiltoniana. Por outro lado, consideremos o caso  $0 < h \leq h_c$ , onde  $h_c = 9JS$  é o campo crítico. Vamos decompor os spins  $\mathbf{S}$  em  $\mathbf{S}^{\parallel}$  e  $\mathbf{S}^{\perp}$  as componentes paralelas e perpendiculares a  $\mathbf{h}$ , respectivamente. A condição de minimização fica reescrita como  $S_1^{\parallel} + S_2^{\parallel} + S_3^{\parallel} = h/3J$  e  $\mathbf{S}_1^{\perp} + \mathbf{S}_2^{\perp} + \mathbf{S}_3^{\perp} = 0$ . Tomemos  $\hat{\mathbf{e}}$  um versor no plano perpendicular a  $\mathbf{h}$ , de forma a escolher  $\mathbf{S}_1^{\perp}$  na direção de  $\hat{\mathbf{e}}$ . Esta escolha está de acordo com a simetria da hamiltoniana de

rotação em torno do eixo  $\hat{\mathbf{h}}$ . No entanto, se  $\phi$  e  $\alpha$  são os ângulos que  $\mathbf{S}_2^\perp$  e  $\mathbf{S}_3^\perp$  fazem com  $\hat{\mathbf{e}}$ , respectivamente, note que, mesmo que assumíssemos que  $S_1^\perp = S_2^\perp = S_3^\perp$  (um subconjunto das soluções), ainda teríamos a condição  $1 + \cos \phi + \cos \alpha = 0$ . A equação com os dois ângulos tem, portanto, infinitas soluções, o que se traduz numa degenerescência massiva na configuração dos spins, degenerescência essa que não podemos mais dizer estar de acordo com as simetrias da hamiltoniana do modelo. Nesse caso, dizemos que a degenerescência é acidental.

## 2.2 Ordem por desordem

Dada essa degenerescência, vamos investigar a introdução de flutuações térmicas no sistema. Apesar do contínuo de estados com mesma energia, é possível que um conjunto destes tenha, por exemplo, maior entropia que outro. Com essa estratégia que detalharemos a seguir podemos levantar essa degenerescência, isto é, a introdução das flutuações atua efetivamente selecionando um subconjunto dos estados. Esse mecanismo é um exemplo do que é conhecido como *ordem por desordem*, Ref.(6–8), onde as flutuações levantam a degenerescência acidental do estado fundamental.

### 2.2.1 Teoria de perturbação no espaço real: Flutuações térmicas

Vamos olhar primeiramente para uma forma geral de teoria de perturbação termodinâmica. Considere um sistema com energia  $E$  tal que podemos escrever  $E = E_0 + V$ , onde  $E_0$  é a energia do estado fundamental e  $V$  um termo pequeno em relação a  $E_0$ . A energia livre do sistema fica dada por (veja Ref.(9))

$$F = F_0 + \langle V \rangle - \frac{\beta}{2} (\langle V^2 \rangle - \langle V \rangle^2) \quad (2.5)$$

onde  $F_0$  representa a energia livre não perturbada,  $\beta = 1/k_B T$  com  $K_B$  a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura do sistema. As quantidades  $\langle V \rangle$  e  $\langle V^2 \rangle$  representam médias, com o peso de Gibbs do sistema não interagente. Muitas vezes a primeira correção  $\langle V \rangle$  é nula, por exemplo quando estamos considerando pequenas flutuações em torno de um ponto de mínima energia. O segundo termo,  $\frac{\beta}{2} (\langle V^2 \rangle - \langle V \rangle^2) = \frac{\beta}{2} \langle (V - \langle V \rangle)^2 \rangle$ , representa flutuações, e ressaltamos o fato de que a correção à energia livre causada por ele é sempre negativa.

Para aplicar no sistema de interesse, vamos agora tomar uma configuração dentre aquelas do contínuo de estados degenerados (vamos nos restringir a configurações planares). Com isso, vamos definir  $\hat{\mathbf{z}}_i$  o versor apontando na direção do spin no sítio  $i$  para a particular configuração escolhida. Em seguida, para cada ligação  $\langle ij \rangle$  escolhemos os eixos  $\hat{\mathbf{x}}_i$  e  $\hat{\mathbf{x}}_j$  de forma que pertençam ao plano  $\hat{\mathbf{z}}_i - \hat{\mathbf{z}}_j$ , e  $\hat{\mathbf{y}}_i$  e  $\hat{\mathbf{y}}_j$  são escolhidos perpendiculares a esse mesmo plano, Figura (3). Com esses novos sistemas de referências o estado fundamental é tal que os spin em cada sítio apontam na direção  $\hat{\mathbf{z}}_i$  com  $S_i^z = S$ . Consideraremos, no

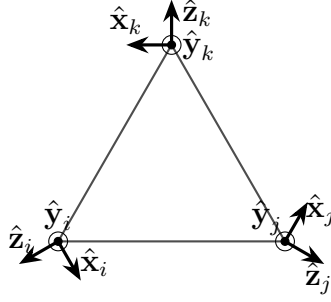


Figura 3 – Eixos locais para a configuração na Figura (2c).

Fonte: Elaborada pelo autor.

entanto, que existam no sistema componentes  $S^x$  e  $S^y$ , comparativamente pequenas em relação a  $S$ , causadas por flutuações. Definindo  $\theta_{ij} = \cos^{-1}(\hat{\mathbf{z}}_i \cdot \hat{\mathbf{z}}_j)$  e  $\theta_i$  o ângulo entre  $\hat{\mathbf{z}}_i$  e  $\mathbf{h}$ , a hamiltoniana se reescreve como

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle ij \rangle} \left[ S_i^y S_j^y + (S_i^x S_j^x + S_i^z S_j^z) \cos \theta_{ij} + (S_i^x S_j^z - S_j^z S_i^x) \sin \theta_{ij} \right] - h \sum_i \left[ S_i^z \cos \theta_i + S_i^x \sin \theta_i \right]. \quad (2.6)$$

Reescrevendo convenientemente  $S_i^z = S - (S - S_i^z)$ , a hamiltoniana fica dada por  $\mathcal{H} = E_{\text{cl}} + \mathcal{H}_0 + V$ , onde

$$E_{\text{cl}} = J \sum_{\langle ij \rangle} S^2 \cos \theta_{ij} - h \sum_i S \cos \theta_i, \quad \mathcal{H}_0 = 3JS \sum_i (S - S_i^z)$$

$$V = J \sum_{\langle ij \rangle} \left[ S_i^y S_j^y + S_i^x S_i^x \cos \theta_{ij} + (S - S_i^z)(S - S_j^z) \cos \theta_{ij} + (S_i^x S_j^z - S_j^z S_i^x) \sin \theta_{ij} \right] - h \sum_i S_i^x \sin \theta_i,$$

sendo  $E_{\text{cl}}$  é a energia clássica do estado fundamental. Para a expressão acima, utilizamos o fato de que o campo local, definido por  $\mathbf{h}_i^{\text{loc}} = \mathbf{h} - J \sum_j' \mathbf{S}_j$ , com  $\sum_j'$  denotando soma sobre vizinhos, é proporcional ao spin no sítio,  $\mathbf{h}_i^{\text{loc}} = 3J\mathbf{S}_i$  para esse modelo. Vemos que este é o caso se escrevermos  $\sum_j' \mathbf{S}_j = \frac{1}{2} \sum_{\Delta} [\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2]$ , sendo a última soma sobre plaquetas vizinhas. Usando o vínculo da Eq.(2.4), concluímos que  $\mathbf{h}_i^{\text{loc}} = \mathbf{h} - \frac{1}{2} \sum_{\Delta} [\mathbf{h}/3J - \mathbf{S}_i] = 3J\mathbf{S}_i$ .

Notamos que  $\mathcal{H}_0$  é diagonal nos sítios, enquanto que os termos que agrupamos sob o rótulo de  $V$  representam somas sobre diferentes sítios (como iremos discutir a seguir, a última soma  $\sum_i S_i^x \cos \theta_i$  pode ser descartada). Na linguagem da teoria de perturbação delineada acima, vamos tomar  $\mathcal{H}_0$  como a hamiltoniana não perturbada, e a nossa estratégia consistirá em tratar  $V$  perturbativamente com relação a  $\mathcal{H}_0$ . Aqui é preciso comentar que não existe um parâmetro pequeno que naturalmente distingue  $V$  de  $\mathcal{H}_0$ . O método é, a rigor, uma expansão em  $1/z$ , sendo  $z$  o número de vizinhos da rede, uma vez que  $\mathcal{H}_0 = \mathcal{O}(zJ)$ , enquanto que  $V = \mathcal{O}(J)$ . Por outro lado, essa estratégia de tratar o segundo termo perturbativamente é justificável do ponto de visto físico. Vemos que  $\mathcal{H}_0$  está de acordo com uma teoria de campo médio, já que a contribuição dessa correção para energia clássica é apenas local no sítio  $i$ . Já os termos em  $V$  representam interações das flutuações de diferentes sítios. Lembramos que em uma teoria de campo médio teríamos que os spins

de sítios diferentes naturalmente se comportam de forma completamente independente e descorrelacionada, isto é,  $\langle S_i^\alpha S_j^\mu \rangle = \langle S_i^\alpha \rangle \langle S_j^\mu \rangle \forall i, j \in \Lambda$  com  $\alpha, \mu = x, y, z$ . Isso nos leva a concluir que a correção principal nesse método está realmente em  $\mathcal{H}_0$ , visto que o termo  $V$  representa uma correção além do campo médio, e logo de ordem superior.

Para o próximo passo vamos ignorar o termo  $E_{cl}$ , que é constante para todo o contínuo de estados degenerados. Nesse ponto, o fato de que a perturbação é sobre um estado de mínimo implica que termos de primeira ordem nas flutuações do spin são nulos (isto é o equivalente a dizer que o ponto de mínimo de uma função real tem derivada nula, mas com a generalização natural para um espaço de parâmetro arbitrário). Vamos agora, de fato, impor que  $S^x$  e  $S^y$  são pequenas componentes causadas por flutuações térmicas. Considerando o regime  $k_B T \ll JS^2$ , as flutuações devem de fato ser pequenas em comparação com  $S$ , de forma que podemos escrever

$$S^z = \sqrt{S^2 - S^{x2} - S^{y2}} = S - \frac{S^{x2}}{2S} - \frac{S^{y2}}{2S} + O(\mathbf{S}^{\perp 4}). \quad (2.7)$$

Dessa forma a hamiltoniana fica reescrita como  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V_2 + V_3$ , onde

$$\mathcal{H}_0 = \frac{3J}{2} \sum_i [S_i^{x2} + S_i^{y2}], \quad V_2 = J \sum_{\langle ij \rangle} [S_i^y S_j^y + S_i^x S_j^x \cos \theta_{ij}], \quad (2.8)$$

e  $V_3$  é um termo que depende de  $S^x, S^y$  em terceira ordem, o qual iremos descartar. Lembrando que  $\mathcal{H}_0$  está sendo tomado como hamiltoniana não perturbada, podemos calcular o valor médio de qualquer função  $f(\mathbf{S}^\perp)$  das flutuações dos spins por

$$\langle f(\mathbf{S}^\perp) \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \int e^{-\beta \mathcal{H}_0} f(\mathbf{S}^\perp) \prod_i d\mathbf{S}_i^\perp, \quad (2.9)$$

onde  $Z_0$  é a função de partição de  $\mathcal{H}_0$ . Essas são integrais gaussianas, e portanto podemos calcular quantidades de interesse como  $\langle (S_i^\alpha)^2 \rangle = \frac{k_B T}{3J}$ ,  $\langle (S_i^\alpha)^4 \rangle = 3 \left( \frac{k_B T}{3J} \right)^2$ ,  $\langle (S_i^\alpha)^{2k+1} \rangle = 0, \forall k \in \mathbb{N}$  com  $\alpha = x, y$ . Além disso, spins de sítios distintos são descorrelacionados,  $\langle (S_i^\alpha)^m (S_j^\mu)^l \rangle = \langle (S_i^\alpha)^m \rangle \langle (S_j^\mu)^l \rangle, \alpha, \mu = x, y, i \neq j$ . Com isso, somos capazes de aplicar uma teoria de perturbação termodinâmica nos moldes de Eq.(2.5) para obter  $F = F_0 - \frac{\beta}{2} \langle V^2 \rangle$ , onde  $F_0$  é a energia livre do estado não perturbado. Estamos assumindo aqui que  $\langle V \rangle = 0$  (podemos afirmar que esse é o caso porque os desvios, que se dão na forma das componentes  $S^x$  e  $S^y$ , devem ser simétricos em relação ao 0 já que não há uma direção preferencial). Como  $V = V_2 + \mathcal{O}(\mathbf{S}^{\perp 3})$ , temos que o termo dominante da perturbação se encontra por  $\Delta F = -\frac{\beta}{2} \langle V_2^2 \rangle + \mathcal{O}(\mathbf{S}^{\perp 3})$ , e portanto temos

$$\Delta F^{(2)} = -\frac{\beta J^2}{2} \left\langle \left( \sum_{\langle ij \rangle} \left[ S_i^y S_j^y + S_i^x S_j^x \cos \theta_{ij} \right] \right)^2 \right\rangle$$

Expandindo a expressão, teremos termos do tipo  $\langle S_i^y S_j^y S_k^y S_l^y \rangle$ . Primeiramente, se  $\{i, j\} \cap \{k, l\} = \emptyset$  temos que, como as componentes de spins diferentes são descorrelacionadas, o termo é equivalente a  $\langle S_i^y S_j^y \rangle \langle S_k^y S_l^y \rangle$  o que, por sua vez é igual a  $\langle S_i^y \rangle \langle S_j^y \rangle \langle S_k^y \rangle \langle S_l^y \rangle$

(lembre-se que  $i \neq j$  e  $k \neq l$  pois estamos somando sobre primeiros vizinhos). Note que a contribuição desse termo é nula. Tomemos agora um par  $\langle ij \rangle$  fixo e suponhamos que  $k = i$ ,  $l \neq j$ . Nesse caso,  $\langle S_i^y S_j^y S_k^y S_l^y \rangle = \langle (S_i^y)^2 \rangle \langle S_j^y \rangle \langle S_l^y \rangle = 0$ , novamente. A mesma conclusão se tira em qualquer um dos casos em que a ligação  $\langle kl \rangle$  compartilha um, e somente um, vértice com a ligação  $\langle ij \rangle$ . Por fim vamos considerar o caso em que  $\langle ij \rangle = \langle kl \rangle$ . Temos então que  $\langle S_i^y S_j^y S_k^y S_l^y \rangle = \langle (S_i^y)^2 (S_j^y)^2 \rangle = \langle (S_i^y)^2 \rangle \langle (S_j^y)^2 \rangle = (k_B T / 3J)^2$ . Veja que esse cálculo pode ser estendido naturalmente para contabilizar a média de termos da forma  $\langle S_i^x S_j^x S_k^x S_l^x \cos \theta_{ij} \cos \theta_{kl} \rangle = (k_B T / 3J)^2 \cos^2 \theta_{ij}$  se  $\langle ij \rangle = \langle kl \rangle$  e 0 caso contrário. Outros termos presentes na expansão são calculados por argumentos similares, da forma  $\langle S_i^x S_j^y S_k^y S_l^y \rangle = \langle S_i^x \rangle \langle S_j^x \rangle \langle S_k^y \rangle \langle S_l^y \rangle = 0$ . Concluimos então que

$$\Delta F^{(2)} = -\frac{\beta J^2}{2} \left( \frac{k_B T}{3J} \right)^2 \sum_{\langle ij \rangle} [1 + \cos^2 \theta_{ij}]. \quad (2.10)$$

Percebendo que mesmo esta primeira correção não nula para a energia livre depende do estado fundamental em função da parametrização dos ângulos  $\theta_{ij}$ , podemos apreciar a relativa simplicidade deste método. Para uma generalização de como calcular os termos de ordem superior, veja Ref.(10). Conseguimos o nosso objetivo de calcular uma correção para a energia livre, e agora para um sistema com temperatura finita existirá uma seleção entrópica dos estados, sendo necessária portanto a minimização de  $F$ .

### 2.3 Termo biquadrático

Vamos reescrever a expressão em Eq.(2.10) como  $F = F_0 - \frac{k_B T}{18} \sum_{\langle ij \rangle} [1 + \cos^2 \theta_{ij}]$ . Lembrando que o estado fundamental tem, por definição,  $\mathbf{S}_i = S \hat{\mathbf{z}}_i, \forall i$ , temos que  $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = S^2 \cos \theta_{ij}$ . Notamos que este é o segundo termo que aparece dentro da soma em Eq.(2.10), a menos de um fator  $S^2$ , e o primeiro termo não depende da configuração de spin (é constante para todo o contínuo de estados degenerados). Esses pontos sugerem a proposta de um modelo efetivo na rede triangular:

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mathbf{h} \cdot \sum_i \mathbf{S}_i - K \sum_{\langle ij \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2, \quad (2.11)$$

onde, como antes, os spins são vetores tridimensionais nos sítios. A novidade está na última soma,  $-K \sum_{\langle ij \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2$  onde  $K \geq 0$  é uma constante. Chamamos esses termos dentro da somatória de termos *biquadráticos*. A adição desse termo pretende simular o efeito da correção à energia livre. Agora, quando minimizamos a hamiltoniana em Eq.(2.11) estamos levando em conta, pela própria construção do modelo, as flutuações térmicas no sistema.

Com isso, vamos de fato procurar as configurações que minimizam a hamiltoniana em Eq.(2.11). Como fizemos antes, aqui ainda podemos reescrever a hamiltoniana como soma somente sobre as plaquetas triangulares,

$$\mathcal{H} = \sum_{\triangle} \left\{ \frac{J}{2} [\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_1] - \frac{\mathbf{h}}{6} \cdot [\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3] - \frac{K}{2} [(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^2 + (\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3)^2 + (\mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_1)^2] \right\}.$$



Dessa forma, a existência de uma coloração da rede triangular com três cores garante que podemos minimizar individualmente cada uma das parcelas da soma acima. Agora, assumindo uma configuração planar para os spins, vamos parametrizar os spins pelos ângulos  $\theta_i$  com o campo externo, e escrevemos

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_\Delta = & \frac{JS^2}{2} [\cos(\theta_2 - \theta_1) + \cos(\theta_3 - \theta_2) + \cos(\theta_1 - \theta_3)] - \frac{h}{6} (\cos \theta_1 + \cos \theta_2 + \cos \theta_3) \\ & - \frac{KS^4}{2} [(\cos^2(\theta_2 - \theta_1) + \cos^2(\theta_3 - \theta_2) + \cos^2(\theta_1 - \theta_3))]. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Aqui  $S$  é o tamanho do spin. Agora o problema se reduz a minimização de uma função de três variáveis. Usando o software Mathematica podemos determinar os valores de  $\theta_1, \theta_2$  e  $\theta_3$  e dessa forma também a configuração dos spins. Com isso, obtemos a magnetização por sítio  $\mathbf{m} = S(\cos \theta_1 + \cos \theta_2 + \cos \theta_3)\hat{\mathbf{h}}/3$ . Na Figura (4) apresentamos as curvas de magnetização para alguns valores de  $K$ .

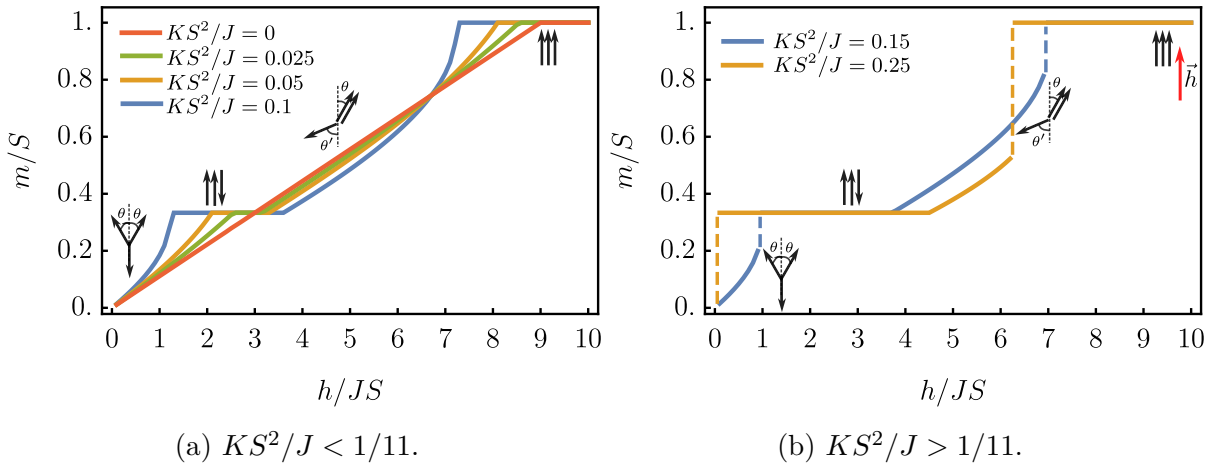


Figura 4 – Gráficos da magnetização relativa por spin  $|\mathbf{m}|/S$  em função do campo externo  $h$  para diferentes valores de  $K$ . Resultados para a minimização de Eq.(2.12) na rede triangular. Linhas tracejadas indicam saltos ou descontinuidades.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para  $K = 0$  recuperamos o resultado linear discutido anteriormente. Já para um  $K > 0$  observamos um surgimento de um platô de magnetização em  $m/S = 1/3$ , de acordo com os resultados experimentais. A fase de baixos campos magnéticos é denominada de estado  $Y$ , onde, para uma plaqueta, um spin aponta para baixo (i.e., contrário ao campo) e os outros estão dispostos simetricamente, Figura (4). Com o aumento do campo chegamos, para um dado valor crítico  $h_{\text{platô}}^{(1)}$ , na região do platô, onde tempo uma fase denominada de *up-up-down*(*uud*), com um spin para baixo e dois para cima. A fase perdura até um segundo campo crítico  $h_{\text{platô}}^{(2)}$ , quando começa uma fase denominada de fase  $V$ , com dois spins fazendo um ângulo  $\theta$  com o campo, e outro com  $\theta'$ , Figura (4). Por fim, para um campo  $h_{\text{pol}}$  os spins saturam na direção do campo, num estado dito polarizado. Essas conclusões são válidas principalmente para valores pequenos de  $K$ . Para valores mais altos

desse parâmetro o sistema apresenta algumas interessantes sutilezas que discutiremos brevemente a seguir.

## 2.4 Transições de fase

Olhando agora mais atentamente para os gráficos na Figura (4), vemos que a partir de algum valor de  $K$  algumas transições são descontínuas. Para analisar melhor vamos fazer uso da teoria de Landau para estudar essas transições de fase. Lembramos que agora a hamiltoniana que estamos tentando minimizar está fazendo o papel justamente da energia livre, de forma que a estratégia será expandir a própria função  $\mathcal{H}$  em termos do parâmetro de ordem, a ser escolhido em cada caso. Vamos primeiro estudar uma teoria geral de como a mudança de um parâmetro pode transformar uma transição antes de segunda ordem em uma de primeira ordem. Suponha que a energia livre  $f$  fica expandida em função de um parâmetro de ordem  $\phi$ , ao redor do ponto crítico, como  $f - f_0 = u_2\phi^2 + u_4\phi^4 + u_6\phi^6$ , onde  $f_0$  é o valor da energia livre na fase ordenada e estamos assumindo dois parâmetros  $\kappa, H$ , tais que  $u_i = u_i(\kappa, H)$ ,  $i = 2, 4, 6$ , são funções desses parâmetros (para os casos de interesse, a hamiltoniana tem simetria de inversão  $\phi \rightarrow -\phi$ , e por isso já estamos descartando os termos de ordem ímpar). Suponha que, para um dado  $\kappa_0$ ,  $u_2(\kappa_0, 0) < 0$ ,  $u_4(\kappa_0, H) > 0$ ,  $\forall H$ , e vamos aumentar o parâmetro  $H$ . Então, o termo de  $\phi^6$  não se faz necessário e teremos uma transição de segunda ordem, com o valor crítico do parâmetro  $H^*$  sendo dado de forma que  $u_2(\kappa_0, H)$  é positivo para  $H > H^*$ , que satisfará  $u_2(\kappa_0, H^*) = 0$ , Figura (5a). Por outro lado, se  $u_4(\kappa_0, H)$  fica negativo, o termo  $u_6\phi^6$  precisa ser positivo para manter a estabilidade. Nesse caso, teremos valores de mínimo simétricos em relação à origem, digamos  $\pm\phi^*$ . Aumentando o valor de  $H$ , vemos que quando a energia livre deste mínimo  $\phi^*$  passa por 0, Figura (5b), temos uma transição de primeira ordem para o estado ordenado(11). A discussão pode ser adaptada para um caso em que a transição para a fase ordenada se dá com a diminuição do parâmetro  $H$  (ou seja, quando o aumento do mesmo parâmetro tira o sistema da fase ordenada).

### 2.4.1 Transição do estado $Y$ para o $uud$

Vamos escrever a hamiltoniana em Eq.(2.12) com a parametrização com ângulo  $\theta$  na Figura (4). Para fazer uso da teoria de Landau tomamos  $\theta$  como parâmetro de ordem ( $\theta = 0$  na fase  $uud$  e não nulo na fase  $Y$ ). Expandindo em potências de  $\theta$  temos  $\mathcal{H} = \frac{JS^2}{2} [u_0 + u_2\theta^2 + u_4\theta^4 + u_6\theta^6]$ , com  $u_2 = -1 + \frac{H}{3} + 6\kappa$ ,  $u_4 = \frac{7}{12} - \frac{H}{36} - 6\kappa$  e  $u_6 = \frac{-93 + H + 3168\kappa}{1080}$ , onde estamos usando,  $\kappa = KS^2/J$  e  $H = h/JS$  e já descartando termos da ordem  $\mathcal{O}(\theta^8)$ . Primeiramente para  $\kappa = 0$  note que  $u_2$  troca de sinal para  $H = 3$ . Dado que  $u_4 > 0, \forall H < 3$ , segue que essa transição seria contínua. Agora considere um valor  $\kappa > 0$ , mas ainda suficientemente pequeno. Vamos mostrar que a mesma conclusão se mantém. Nos termos da discussão acima,  $u_2 < 0$  para  $H = 0$  e troca de sinal para  $H = 3(1 - 6\kappa)$ . Vemos que se  $H \leq 3(1 - 6\kappa)$  então  $u_4(\kappa, H) = 7/12 - H/36 - 6\kappa \geq 7/12 - (1 - 6\kappa)/12 - 6\kappa = (1 - 11\kappa)/2$

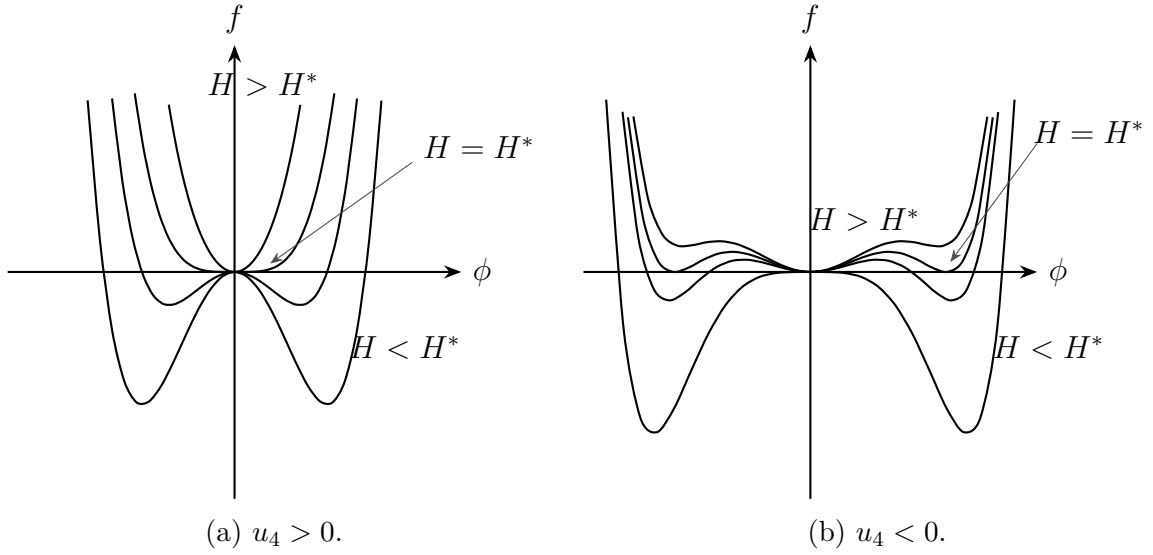


Figura 5 – Ilustração das curvas de  $f$  em função de  $\phi$  variando o parâmetro  $H$ .

Fonte: Elaborada pelo autor.

que será positivo desde que  $\kappa < 1/11$ . Dessa forma, ocorrerá a transição de segunda ordem para  $H^* = 3(1 - 6\kappa)$ , isto é,  $h_{\text{platô}}^{(1)} = 3JS(1 - 6KS^2/J)$ . Pela discussão acima, vemos que existe um valor crítico  $\kappa^* = 1/11$  tal que, para  $\kappa > \kappa^*$ , existirá algum valor do campo entre 0 e  $h_{\text{platô}}^{(1)}$  a partir do qual  $u_4 < 0$ . Nesse caso (pode-se verificar que  $u_6 > 0$ ) a transição do estado  $Y$  para  $uud$  será de primeira ordem, com um valor de campo crítico  $h_c \neq h_{\text{platô}}^{(1)}$ .

Notamos ainda que, para valores muito altos de  $\kappa$ , pode acontecer de o primeiro estado ser o  $uud$  ao invés do  $Y$ . Para determinar o  $\kappa$  crítico nesse caso, deve valer a desigualdade  $\mathcal{H}_{uud}|_{h=0} < \mathcal{H}_Y|_{h=0} \iff \kappa > 2/9$ .

#### 2.4.2 Transição do estado $uud$ para o $V$

Olhando para a Figura (4) parece ser o caso que essa transição é sempre contínua. Tomando a parametrização  $\theta$  como na Figura (4), e usando o fato de que existe o vínculo  $\sin \theta' = 2 \sin \theta$  para o estado  $V$ , expandimos a hamiltoniana em Eq.(2.12) em função do parâmetro de ordem  $\theta$  como  $\mathcal{H} = \frac{JS^2}{2} \left[ \left( -1 - \frac{H}{3} - 3\kappa \right) + \left( 1 - \frac{H}{3} + 2\kappa \right) \theta^2 + \left( \frac{23}{12} - \frac{17H}{36} + \frac{10\kappa}{3} \right) \theta^4 \right] + \mathcal{O}(\theta^6)$ . Vemos que  $u_2(\kappa, h_{\text{platô}}^{(1)}) > 0$  e há a troca de sinal para  $H^* = 3(1+2\kappa)$ . Agora note que  $H \leq H^* \Rightarrow u_4(\kappa, H) \geq 23/12 - 17(1+2\kappa)/12 + 10\kappa/3 = (1+\kappa)/2$ . Dessa forma, como temos que  $\kappa \geq 0$  sempre,  $u_4 \geq 0$ . Assim, teremos sempre uma transição de segunda ordem com valor crítico  $h_{\text{platô}}^{(2)} = 3JS(1 + 2KS^2/J)$ .

#### 2.4.3 Transição do estado $V$ para o estado polarizado

Uma análise análoga ao que fizemos na seção 2.4.2, tomando um parâmetro de ordem adequado e retraindo até a sexta potência, revelará a mesma natureza da transição.

Para  $\kappa < \kappa^*$ , a transição é contínua com  $h_{\text{pol}} = 9JS(1 - 2KS^2/J)$ . Curiosamente, o valor crítico também é  $\kappa^* = 1/11$ . Para  $\kappa > 1/11$  teremos uma transição descontínua.

Há ainda a possibilidade, para valores suficientemente grandes de  $K$ , da supressão da fase  $V$ , com um transição direta da fase  $uud$  para a fase polarizada. Isso se dá quando  $\mathcal{H}_V|_{h=h_{\text{platô}}^{(2)}} \geq \mathcal{H}_{\text{pol}}|_{h=h_{\text{platô}}^{(2)}} \iff \kappa \geq 1/2$ .

Podemos generalizar toda essa discussão para afirmar que modelos com termo de troca biquadrático terão a tendência de ter transições de fase descontínuas no regime de  $\kappa$  alto. Nesse limite, o termo biquadrático é dominante e força os spins em configurações paralelas ou antiparalelas, resultando efetivamente num modelo do tipo Ising. Devemos, no entanto, ter cuidado sobre a validade de tais resultados quando, como é o caso aqui, a introdução do termo biquadrático simula pequenas perturbações, uma vez que, por óbvio, a teoria de perturbações desenvolvida deixa de ser confiável no limite  $\kappa \gg 1 \iff T \gg 1$ .

### 3 FORMALISMO DE ONDAS DE SPIN

Estamos interessados agora em sair do limite clássico, onde tratamos os spins como vetores tridimensionais, e olhar para o modelo de Heisenberg em sua forma quântica. Vamos portanto considerar uma rede triangular de  $N$  sítios e vamos definir o hamiltoniano como em Eq.(1.1), com interação de troca antiferromagnética entre primeiros vizinhos e com acoplamento Zeeman de um campo externo  $\mathbf{h} = h\hat{\mathbf{z}}$ . Os spins  $\mathbf{S}_i$  são operadores de spin  $S$  nos sítios  $i$ .

Como discutido no capítulo anterior, nós propusemos uma mecanismo de levantamento da degenerescência accidental. Vamos mostrar logo a seguir que precisaremos usar parametrizações de configurações de spins. A proposta é, portanto, que, para cada valor de campo magnético  $h$ , a configuração que escolheremos é aquela que corresponde à fase selecionada pelas flutuações clássica no limite  $K \rightarrow 0^+$ . Em outros termos, as fases que usaremos são a fases  $Y$  para  $h \leq 0 < 3JS$ ,  $uud$  para  $h = 3JS$ ,  $V$  para  $3JS < h < 9JS$ , e polarizada para  $h \geq 9JS$ .

Dito isso, para um valor de campo  $h$ , seja  $\{\mathbf{S}_i\}_{i=1,2,\dots,N}$  conforme essa prescrição que propomos. Definamos eixos locais como feito em Eq.(2.6), onde  $\theta_i$  é ângulo entre  $\hat{\mathbf{z}}_i$  e o campo magnético  $\mathbf{h}$ . Vamos introduzir um conjunto de novos operadores  $S_i^{x'}, S_i^{y'}, S_i^{z'}$  definido em analogia com o estado fundamental clássico, da forma

$$S_i^{x'} = \cos \theta_i S_i^x - \sin \theta_i S_i^z, \quad S_i^{y'} = S_i^y, \quad S_i^{z'} = \sin \theta_i S_i^x + \cos \theta_i S_i^z. \quad (3.1)$$

Com isso, vamos definir os operadores  $\hat{n}'_i = S - S_i^{z'}$ , que representam os desvios de spins. Definimos também  $|n'_1, n'_2 \dots n'_N\rangle$  os autoestados de  $\hat{n}'_i$ , que satisfazem  $\hat{n}'_i |n'_1, n'_2 \dots n'_N\rangle = n'_i |n'_1, n'_2 \dots n'_N\rangle, \forall i$ . Aqui fica claro que a motivação da construção de eixos locais é que a configuração clássica de spin corresponde ao estado em que  $n'_i = 0, \forall i$ , ou seja, estado com  $S_i^{z'} = S$ . Introduzimos então os familiares operadores de criação e aniquilação, definidos por  $a_i^\dagger |\dots, n'_i + 1, \dots\rangle = \sqrt{n'_i + 1} |\dots, n'_i + 1, \dots\rangle$ ,  $a_i |\dots, n'_i + 1, \dots\rangle = \sqrt{n'_i} |\dots, n'_i - 1, \dots\rangle$ . Esses são operadores bosônicos, isto é, obedecem às regras de comutação  $[a_i^\dagger, a_j] = \delta_{ij}$  e  $[a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0$ . Sendo  $S_i^{\pm'} = S_i^{x'} \pm iS_i^{y'}$ , introduzimos o que é conhecido como transformações de Holstein-Primakoff, Ref.(12), dadas por

$$S_i^{z'} = S - a_i^\dagger a_i, \quad S_i^{\prime+} = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}\right)^{1/2} a_i, \quad S_i^{\prime-} = \sqrt{2S} a_i^\dagger \left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}\right)^{1/2}. \quad (3.2)$$

Fica claro então a interpretação física da nossa construção. Tomamos como “vácuo” da teoria o estado que representa o estado fundamental clássico, que nesse caso é com todos os spins  $S^z$  valendo  $S$ . Com isso o operador de criação  $a_i^\dagger$  tem o papel de criar

excitações  $S_i^z \rightarrow S_i^z - 1$ , que aqui são exatamente os desvios dos spins – os operadores  $a_i$  têm, portanto, o papel contrário. Uma vez criada essa excitação (note que podemos pensar que criamos bósons no sítio  $i$ ), os termos  $S^+$  e  $S^-$  na hamiltoniana são responsáveis por fazer um “hopping” desta na rede, isto é, os operadores atuam no sentido de transferir a excitação para os vizinhos, ocasionando um deslocamento do bóson pela rede. Chamamos de onda de spin esse transporte da excitação magnética pela rede.

Com isso posto, escrevemos portanto o hamiltoniano em função dos novos operadores bosônicos, substituindo Eq.(3.2) e as inversas de Eq.(3.1) em Eq.(1.1). Para que possamos fazer avanço, vamos expandir as expressões em potências de  $a_i^\dagger a_i / 2S$ ,  $S_i^{+'} = \sqrt{2S}a_i + \mathcal{O}(a^3)$ ,  $S_i^{-'} = \sqrt{2S}a_i^\dagger + \mathcal{O}(a^3)$ . Assim,

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & J \sum_{\langle ij \rangle} \left\{ \cos(\theta_i - \theta_j) \left[ S^2 - S(a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j) + \frac{S}{2}(a_i a_j + a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i + a_i^\dagger a_j^\dagger) \right] \right. \\ & - \frac{S}{2}(a_i a_j - a_i^\dagger a_j - a_i a_j^\dagger + a_i^\dagger a_j^\dagger) + \sin(\theta_i - \theta_j) S \sqrt{2S} \left[ a_j + a_j^\dagger - (a_i + a_i^\dagger) \right] \Big\} \quad (3.3) \\ & - h \sum_i \left\{ (S - a_i^\dagger a_i) \cos \theta_i + \sqrt{\frac{S}{2}}(a_i + a_i^\dagger) \sin \theta_i \right\} + \mathcal{O}(a^3). \end{aligned}$$

Isso nos fornece uma série de potência em  $1/S$ , de forma que podemos agrupar os termos na forma  $\mathcal{H} = \sum_{n=0}^{\infty} S^{2-\frac{n}{2}} \mathcal{H}_n$  (para ser preciso, devemos reescalar o campo magnético por  $JS$ ). Notamos que o termo da ordem de  $S^2$ ,  $S^2 \mathcal{H}_0 = J \sum_{\langle ij \rangle} S^2 \cos(\theta_i - \theta_j) - \frac{\hbar}{JS} J \sum_i S^2 \cos \theta_i$ , representa a energia clássica. Temos também termos da ordem de  $S\sqrt{S}$ , que contêm os operadores  $a$  e  $a^\dagger$  em primeira ordem. Eles representam o  $\mathcal{H}_1$ , e se anularão no cálculo de médias para expansão ao redor do estado fundamental clássico, como aqui é o caso. Temos também os termos da ordem de  $S$ , que contêm termos quadráticos de operadores  $a, a^\dagger$ , representando o  $\mathcal{H}_2$ . Esses são o que entendemos como flutuações quânticas. O próximo passo será descartar os termos da ordem de  $\mathcal{O}(a^3)$ . Essa aproximação se justifica desde que estejamos num regime dito diluído, quando  $\langle a_i^\dagger a_i / 2S \rangle \ll 1$ . Se entendermos fisicamente o significado dessa média, podemos argumentar a razoabilidade da aproximação. Relembrando o espírito do método semiclássico aqui adotado, essa média representa uma medida das flutuações quânticas, isto é, indica o quanto o estado verdadeiro (ou seja, tratando puramente quanticamente) dista do estado que corresponde ao estado fundamental clássico. Um argumento, portanto, para descartarmos *a priori* os termos de ordem superiores, é o relativo sucesso da descrição puramente clássica. Uma vez que os estados clássicos descrevem em alguma medida o fenômeno do platô, esperamos que as flutuações representem uma correção. A expectativa de sucesso aqui também está embasada, por outro lado, no sucesso do mesmo método em outros casos, como por exemplo em Ref.(13,14). Apesar disso, em última análise o mérito da aproximação tem de ser julgado *a posteriori*.

### 3.1 Transformações de Bogoliubov

O hamiltoniano em Eq.(3.3) está escrito em grande generalidade. Vamos usar agora as parametrizações particulares  $\theta_i, i = 1, 2, 3 \dots N$  dos spins para cada configuração dos estados fundamentais clássicos. Nesses casos, a rede sempre está dividida em três sub-redes de tal forma que as orientações dos spins pertencentes a uma mesma sub-rede são iguais. Por isso, todo ângulo pode ser identificado com um dentre três ângulos  $\theta_\mu, \mu = 1, 2, 3$ , um para cada sub-rede. Adicionamos o índice  $\mu$  nos operadores  $a_i$  para indicar a sua sub-rede. O nosso objetivo agora é de diagonalizar este hamiltoniano. Aqui faz-se útil tomar a transformada de Fourier,  $a_{\mathbf{k}\mu} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_{i\mu}$ ,  $a_{i\mu} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_{\mathbf{k}\mu}$ . Substituindo, poderemos agrupar os termos na forma

$$\mathcal{H} = S^2 \mathcal{H}_0 + \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mu, \nu=1}^3 \mathbb{A}_{\mathbf{k}}^{\mu\nu} a_{\mathbf{k}\mu}^\dagger a_{\mathbf{k}\nu} + \frac{1}{2} (\mathbb{B}_{\mathbf{k}}^{\mu\nu} a_{\mathbf{k}\mu}^\dagger a_{\mathbf{k}\nu}^\dagger + \text{H.c.}), \quad (3.4)$$

onde H.c. denota o hermitiano conjugado. Os coeficientes  $\mathbb{A}_{\mathbf{k}}^{\mu\nu}$  e  $\mathbb{B}_{\mathbf{k}}^{\mu\nu}$  dependem da parametrização da configuração de spins. Explicitamente, identificamos para o nosso caso

$$\mathbb{A}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} A & \gamma_{\mathbf{k}}^* D & \gamma_{\mathbf{k}} H \\ \gamma_{\mathbf{k}} D & B & \gamma_{\mathbf{k}}^* F \\ \gamma_{\mathbf{k}}^* H & \gamma_{\mathbf{k}} F & C \end{pmatrix}, \quad \mathbb{B}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma_{\mathbf{k}}^* E & \gamma_{\mathbf{k}} I \\ \gamma_{\mathbf{k}} E & 0 & \gamma_{\mathbf{k}}^* G \\ \gamma_{\mathbf{k}}^* I & \gamma_{\mathbf{k}} G & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

onde  $\gamma = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot(-\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2)}$  com  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  como dados na Figura (2a), e os coeficientes

$$\begin{aligned} A &= -3JS(\cos \theta_{1,2} + \cos \theta_{1,3}) + h \cos \theta_1, & D &= JS \frac{(\cos \theta_{1,2} + 1)}{2}, & E &= JS \frac{(\cos \theta_{1,2} - 1)}{2}, \\ B &= -3JS(\cos \theta_{1,2} + \cos \theta_{2,3}) + h \cos \theta_2, & F &= JS \frac{(\cos \theta_{2,3} + 1)}{2}, & G &= JS \frac{(\cos \theta_{2,3} - 1)}{2}, \\ C &= -3SJ(\cos \theta_{2,3} + \cos \theta_{3,1}) + h \cos \theta_3, & H &= JS \frac{(\cos \theta_{3,1} + 1)}{2}, & I &= JS \frac{(\cos \theta_{3,1} - 1)}{2}, \end{aligned}$$

sendo  $\theta_{i,j} = \theta_i - \theta_j$ . O que obtemos na Eq.(3.4) recai na classe de hamiltonianos bosônicos quadráticos, cujo a diagonalização é um problema sabidamente resolvido (Ref.(15)) pelo que é conhecido como transformações de Bogoliubov. No nosso caso, buscamos uma diagonalização já no espaço de momentos. Em particular, definindo  $\alpha_{\mathbf{k}} = (a_{\mathbf{k}1}, a_{\mathbf{k}2}, a_{\mathbf{k}3}, a_{-\mathbf{k}1}^\dagger, a_{-\mathbf{k}2}^\dagger, a_{-\mathbf{k}3}^\dagger)^T$ , busca-se uma transformação  $\beta_{\mathbf{k}} = \mathbb{T}_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}$ , com  $\beta_{\mathbf{k}} = (b_{\mathbf{k}1}, b_{\mathbf{k}2}, b_{\mathbf{k}3}, b_{-\mathbf{k}1}^\dagger, b_{-\mathbf{k}2}^\dagger, b_{-\mathbf{k}3}^\dagger)^T$  de tal forma que os novos operadores  $b_{\mathbf{k}\mu}$  são também bosônicos. Uma transformação desse tipo que ao mesmo tempo resulta só em termos da forma  $b_{\mathbf{k}\mu}^\dagger b_{\mathbf{k}\mu}$  é o que conhecemos como transformação de Bogoliubov. Aplicando neste caso, obtemos (Ref.(16))

$$\mathcal{H} = S^2 E_{\text{ef},0} + S E_{\text{ef},1} + S \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mu=1}^3 \epsilon_{\mathbf{k}\mu} b_{\mathbf{k}\mu}^\dagger b_{\mathbf{k}\mu}, \quad \text{com} \quad E_{\text{ef},1} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left( \sum_{\mu} \epsilon_{\mathbf{k}\mu} - \text{Tr} \mathbb{A}_{\mathbf{k}} \right), \quad (3.6)$$

onde Tr denota o traço e  $\epsilon_{\mathbf{k}\mu}$  são autovalores obtidos na diagonalização. Temos portanto uma correção para a energia de estado fundamental, e vamos tomar como estimativa

da energia  $E_{\text{ef}} = S^2 E_{\text{ef},0} + S E_{\text{ef},1}$ , onde o segundo termo representa o que chamamos de correção de ponto zero. Note que para obter a energia de fato do estado fundamental deveríamos somar todos os termos da série, e por isso a expressão anterior fornece apenas uma aproximação.

### 3.2 Comparação de energias

Com o resultado final da seção anterior, vamos propor o critério para seleção das fases nesse esquema semiclássico. Tomando as fases clássicas como ponto de partida, decidiremos como a fase do sistema aquela que tem a menor energia  $E_{\text{ef}} = S^2 E_{\text{ef},0} + S E_{\text{ef},1}$ .

Vamos portanto fornecer explicitamente as parametrizações das configurações de spins para cada regime de campo magnético. Por exemplo, para a fase  $Y$ , i.e.,  $0 \leq h < 3JS$ , tomamos a condição de minimização da hamiltoniana clássica em Eq.(2.4) mas agora sujeita ao vínculo  $\theta_2^Y = -\theta_3^Y$  e  $\theta_1^Y = \pi$ , que resulta em  $\theta_2^Y = -\theta_3^Y = \cos^{-1} [(3JS + h)/6JS]$ . Para a fase  $uud$ ,  $\theta_1^{uud} = \pi$ ,  $\theta_2^{uud} = \theta_3^{uud} = 0$ . Para a fase  $V$ , i.e.,  $3JS < h < 9JS$ , temos o vínculo  $\theta_2 = \theta_3$ . A condição na Eq.(2.4) na direção perpendicular ao campo resulta em  $2 \sin \theta_1 + \sin \theta_2 = 0$ . Dessa forma, temos  $\theta_1^V = -\cos^{-1} [(-27J^2S^2 + h^2)/6hJS]$  e  $\theta_2^{(V)} = \theta_3^{(V)} = \cos^{-1} [(27J^2S^2 + h^2)/12hJS]$ .

Com cada uma das parametrizações, aplicamos a diagonalização com as transformações de Bogoliubov usando o software Mathematica para os momentos  $\mathbf{k}$  na primeira zona de Brillouin. As energias para valores de campo estão apresentados na Figura (6) a seguir.

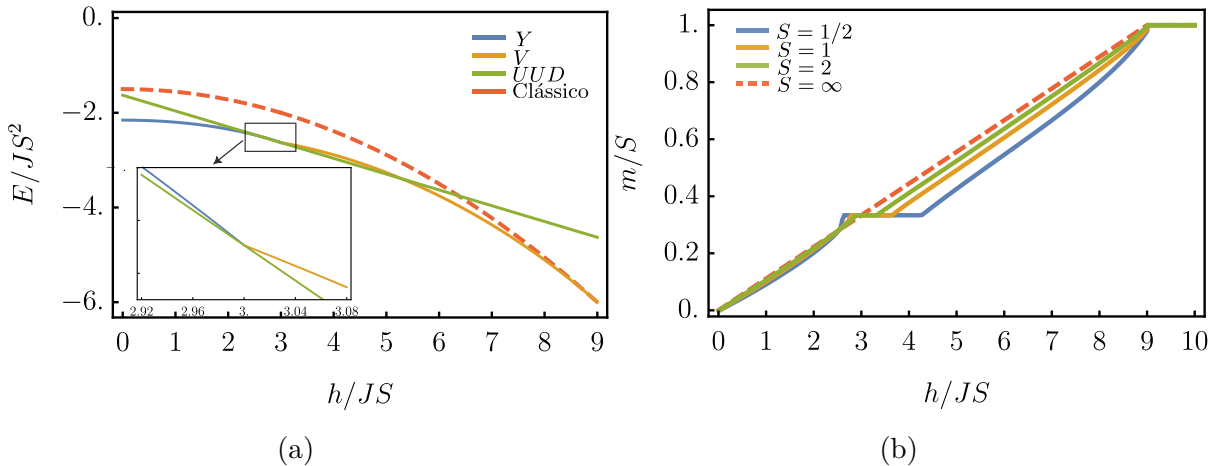


Figura 6 – (a) Energia  $E_{\text{ef}} = S^2 E_{\text{ef},0} + S E_{\text{ef},1}$ , com  $S = 1/2$  para as diferentes fases. A curva pontilhada vermelha representa a energia clássica,  $S^2 E_{\text{ef},0}$ ; (b) Magnetização em função do campo para diferentes valores de tamanho do spin obtido com o método variacional.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Um ponto que enfatizamos é que aqui só fazemos o cálculo tomando a parametrização de uma dada fase no intervalo de valores de campo em que ela é a fase selecionada pelas



flutuações. Por isso, a rigor só temos a correção de ponto zero para a energia do estado *uud* exatamente no ponto  $h = 3JS$ . Para comparar a energia, no entanto, precisamos comparar o resultado em faixas de valores de campos. Por isso, para o cálculo da energia do estado *uud*, fizemos uma extrapolação linear. A energia do estado fundamental, podemos provar, é dada por  $E^{\text{uud}}(h) = E^{\text{uud}}(3JS) - \frac{NS}{3}(h - 3JS)$ . Aqui obtemos o coeficiente angular pelo fato de que a magnetização é definida por  $m = -\frac{1}{N} \frac{\partial E_{\text{gs}}}{\partial h}$  e a magnetização clássica é igual a  $NS/3$ . Não é sempre verdade que a magnetização, para uma fase arbitrária, é igual à magnetização clássica, isso porque, da mesma forma que a energia sofre uma correção de ponto zero, o spin local sofre uma redução no seu tamanho,  $\langle S_i^{z'} \rangle = S - \langle a_i^\dagger a_i \rangle$ . Acontece de ser o caso que, para configurações colineares com o campo, como é o caso do estado *uud*, a magnetização é conservada (esse resultado vale inclusive considerando todas ordens de  $S$ , Ref.(17)).

Por fim, comparando as energias como na Figura (6), vemos que, para valores baixos de campo, a fase com menor energia é ainda a *Y*. Existirá uma faixa de campos magnéticos, digamos  $h_1 \leq h \leq h_2$  em que a fase de menor energia é a *uud*. Para valores relativamente altos de campo temos que a fase *V* é selecionada. Por último, a fase de menor energia é a completamente saturado (um resultado geral da teoria de ondas de spin é de que, dado que o estado polarizado é, de fato, um autoestado do hamiltoniano, poderá se concluir que a transição para o estado polarizado se dá com campo crítico  $h_c = 9JS$ , valor igual ao resultado clássico)

Chegamos portanto numa explicação semiclássica do mecanismo de surgimento do platô de magnetização. Naquela faixa entre  $h_1$  e  $h_2$  a fase do sistema é, de fato, a *uud*, e um gráfico de magnetização em função do campo revelaria o platô de  $1/3$ .

### 3.3 Método variacional

Apesar de produzir resultados qualitativamente bons, fazer a extrapolação linear somente para o estado *uud* e não para as outras fases produz resultados que não estão de acordo com outros mais bem estabelecidos, como por exemplo Ref.(18). Note inclusive que, como a energia em função do campo será dada pela composição das curvas de energia (energia da fase *Y* para  $h < h_1$ , energia da *uud* para  $h_1 < h < h_2$ , etc.), as transições de fase teriam descontinuidades na magnetização, uma vez que a curva de energia teria descontinuidades na derivada.

Para melhorar a acurácia da nossa descrição, seguimos aqui o método variacional como proposto em Ref.(17). Seja  $|\phi_0\rangle$  o estado fundamental proposto (i.e. o vácuo dos operadores  $b_i$ ) para o hamiltoniano quadrático tomando a parametrização do estado classicamente estável (i.e., de menor energia) no campo  $h = h_0$ . Então, a energia variacional é definida como  $E_0 = \langle \phi_0 | \mathcal{H}(h_0) | \phi_0 \rangle - (h - h_0) \langle \phi_0 | \sum_i S_i^z | \phi_0 \rangle$ . Uma nova curva de energia  $\tilde{E}$  é obtida comparando, para um dado campo  $h$ , as energias extrapoladas de todas as

estruturas e para todos os campo,  $\tilde{E}(h) = \min_{h_0, \text{fases}} \left( \langle \phi_0 | \mathcal{H}(h_0) | \phi_0 \rangle - (h - h_0) \langle \phi_0 | \sum_i S_i^z | \phi_0 \rangle \right)$ . A justificativa desse método é de mimicar os efeitos de termos de ordem superiores da série em  $1/S$  que, pode-se demonstrar, têm o papel de renormalizar a configuração clássica de spins. Como tomamos um mínimo sobre todas as fases e campos  $h_0$ , permite-se que a fase escolhida em um campo  $h$  seja uma que não é aquela estabilizada classicamente. Pode-se mostrar que campo  $h_0$  que satisfaz a minimização é tal que  $h - h_0$  é da ordem de  $1/S$ . Por isso, para uma correção total da ordem de  $1/S$  é suficiente reter só a contribuição clássica de  $\langle \phi_0 | \sum_i S_i^z | \phi_0 \rangle$ . Fizemos, portanto, a minimização numérica usando o software Mathematica e, com essa energia variacional  $\tilde{E}$ , obtemos, a partir de  $m = -\frac{1}{N} \frac{\partial \tilde{E}}{\partial h}$ , a curva de magnetização na Figura (6b).

Temos então o resultado do platô de magnetização em  $1/3$  da magnetização de polarização. Veja que a largura do plato decresce com o tamanho do spin, conforme esperado, uma vez que a flutuação é parametrizado por  $1/S$ , e recuperamos o resultado clássico no limite  $S \rightarrow \infty$ . O resultado obtido tem boa concordância com simulações numéricas, Ref. (19,20), e resultados de experimentos, Ref. (21–24).

## 4 CONCLUSÃO

Sumarizando todos os passos desenvolvidos até aqui, começamos ilustrando a relação entre frustração magnética e degenerescência. Em particular, para o caso do modelo de Heisenberg Clássico na rede triangular temos uma degenerescência accidental massiva no estado fundamental. Precisamente nesse ponto fazem-se muito relevantes as flutuações no sistema. Ilustramos o efeito de flutuações térmicas, em particular por meio de uma teoria de perturbação no espaço real. Isso fornece um exemplo do que é conhecido como ordem por desordem, onde a introdução dessas flutuações atuam como um mecanismo além do campo médio e levantam a degenerescência accidental. Este é um tipo de mecanismo bastante geral, com aplicação em vários outros sistemas frustrados.

Feita essa discussão, fizemos uso do formalismo de ondas de spin, tomando como base as fases classicamente selecionadas. Essa é uma abordagem semiclássica, comparamos as energias incluindo as correções quânticas e propomos como critério a seleção da fase de menor energia. Com isso demonstramos a existência, pela menos de forma qualitativa, do platô de magnetização em uma faixa de valores de campo. Por fim, aplicamos um método variacional que dá uma concordância quantitativa para o platô de magnetização. Como ilustrado na Figura 6b, o tamanho do platô depende do tamanho do spins  $S$ , e, no limite clássico,  $S \rightarrow \infty$ , recuperamos o comportamento linear clássico.

Esse exemplo para a rede triangular aqui descrito pode ser generalizado para fornecer um roteiro de como estudar o fenômeno de platôs de magnetização, algo que encontra aplicação em outros sistemas frustrados e tem chamado bastante atenção recentemente(25). Uma possível direção futura de pesquisa seria investigar o comportamento do modelo de Heisenberg no que é conhecido como rede de Kagomé, uma rede bidimensional formada por triângulos que compartilham vértices, sendo muito frustrada. Estudos numéricos (26–28) indicaram a existência de um platô de magnetização de  $1/3$  da magnetização do estado polarizado, e resultados experimentais para altos campos magnéticos confirmaram sua presença em alguns materiais reais(4, 29). Fica então a pergunta, podemos seguir a receita aqui proposta e explicar de forma semiclássica esse platô? Essas e outras questões tornam fascinante o estudo dos magnetos frustrados, e que buscaremos responder em um futuro próximo.



## REFERÊNCIAS

- 1 WANNIER, G. H. Antiferromagnetism. the triangular ising net. **Physical Review**, v. 79, p. 357–364, 1950. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.79.357>.
- 2 BALENTS, L. Spin liquids in frustrated magnets. **Nature**, v. 464, n. 7286, p. 199–208, 2010.
- 3 KLITZING, K. von. The quantized hall effect. **Review of Modern Physics**, v. 58, p. 519–531, July 1986. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.58.519>.
- 4 ZHENG, G. *et al.* **Unconventional Magnetic Oscillations in Kagome Mott Insulators**. 2023. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/2310.07989.pdf>. Acesso em: 06/11/2023.
- 5 ANDERSON, P. W. An approximate quantum theory of the antiferromagnetic ground state. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 86, p. 694–701, 1952. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.86.694>.
- 6 HENLEY, C. L. Ordering due to disorder in a frustrated vector antiferromagnet. **Physical review letters**, v. 62, n. 17, p. 2056, 1989.
- 7 SHENDER, E. Antiferromagnetic garnets with fluctuationally interacting sublattices. **Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics**, v. 56, n. 1, p. 178, 1982.
- 8 VILLAIN, J. *et al.* Order as an effect of disorder. **Journal de Physique**, v. 41, n. 11, p. 1263–1272, 1980.
- 9 LANDAU, L.; LIFSHITZ, E. **Statistical Physics**. Amsterdam: Elsevier Science, 2013. v. 5. ISBN 9780080570464.
- 10 MARYASIN, V. **Order by structural disorder and field effects in frustrated systems**. 2015. 115 p. Thèse (Docteur) — Université Grenoble Alpes, Saint-Martin-d'Hères, 2015. Disponível em: <https://theses.hal.science/tel-01288985>. Acesso em: 6/11/2023.
- 11 CHAIKIN, P.; LUBENSKY, T. **Principles of Condensed Matter Physics**. Cambridge: Cambridge University Press, 2000. ISBN 9780521794503.
- 12 HOLSTEIN, T.; PRIMAKOFF, H. Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet. **Physical Review**, v. 58, p. 1098–1113, 1940. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.58.1098>.
- 13 ZHITOMIRSKY, M. E.; NIKUNI, T. Magnetization curve of a square-lattice heisenberg antiferromagnet. **Physical Review B**, v. 57, p. 5013–5016, 1998. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.57.5013>.
- 14 CHERNYSHEV, A. L.; ZHITOMIRSKY, M. E. Spin waves in a triangular lattice antiferromagnet: Decays, spectrum renormalization, and singularities. **Physical Review B**, v. 79, p. 144416, Apr 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.144416>.

- 15 RIPKA, S.; BLAIZOT, J.; RIPKA, G. **Quantum Theory of Finite Systems**. Massachussets: MIT Press, 1986. ISBN 9780262022149.
- 16 CÔNSOLI, P. **Extend Kitaev Magnetism in magnetic fields**. 2020. 129 p. Dissertação (Mestrado em Física Básica) — Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2020. Disponível em: [10.11606/D.76.2020.tde-19112020-110752](https://doi.org/10.11606/D.76.2020.tde-19112020-110752).
- 17 COLETTA, T. *et al.* Semiclassical theory of the magnetization process of the triangular lattice heisenberg model. **Physical Review B**, v. 94, p. 075136, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.075136>.
- 18 CHUBUKOV, A. V.; GOLOSOV, D. I. Quantum theory of an antiferromagnet on a triangular lattice in a magnetic field. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 3, n. 1, p. 69, 1991. Disponível em: [10.1088/0953-8984/3/1/005](https://doi.org/10.1088/0953-8984/3/1/005).
- 19 YAMAMOTO, D.; MARMORINI, G.; DANSHITA, I. Quantum phase diagram of the triangular-lattice  $xxz$  model in a magnetic field. **Physical Review Letters**, v. 112, p. 127203, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.127203>.
- 20 YAMAMOTO, D.; MARMORINI, G.; DANSHITA, I. Microscopic model calculations for the magnetization process of layered triangular-lattice quantum antiferromagnets. **Physical Review Letters**, v. 114, p. 027201, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.027201>.
- 21 SHIRATA, Y. *et al.* Experimental realization of a spin-1/2 triangular-lattice heisenberg antiferromagnet. **Physical Review Letters**, v. 108, p. 057205, 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.057205>.
- 22 SVISTOV, L. E. *et al.* Quasi-two-dimensional antiferromagnet on a triangular lattice  $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ . **Physical Review B**, v. 67, p. 094434, 2003. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.67.094434>.
- 23 SMIRNOV, A. I. *et al.* Triangular lattice antiferromagnet  $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$  in high magnetic fields. **Physical Review B**, v. 75, p. 134412, 2007. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.134412>.
- 24 XIE, T. *et al.* Complete field-induced spectral response of the spin-1/2 triangular-lattice antiferromagnet  $\text{CsYbSe}_2$ . **NPJ Quantum Materials**, v. 8, n. 1, p. 48, 2023. DOI:10.1038/s41535-023-00580-9.
- 25 SHANGGUAN, Y. *et al.* A one-third magnetization plateau phase as evidence for the kitaev interaction in a honeycomb-lattice antiferromagnet. **Nature Physics**, v. 19, n. 12, p. 1–7, 2023. DOI:10.1038/s411567-023-02212-2.
- 26 PICOT, T. *et al.* Spin- $s$  kagome quantum antiferromagnets in a field with tensor networks. **Physical Review B**, v. 93, p. 060407, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.060407>.
- 27 MORITA, K. Stability of the  $\frac{1}{3}$  magnetization plateau of the  $J_1 - J_2$  kagome heisenberg model. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 108, p. 184405, 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.108.184405>.

28 CAPPONI, S. *et al.* Numerical study of magnetization plateaus in the spin- $\frac{1}{2}$  kagome heisenberg antiferromagnet. **Physical Review B**, v. 88, p. 144416, 2013. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.144416>.

29 SUETSUGU, S. *et al.* **Emergent spin-gapped magnetization plateaus in a spin-1/2 perfect kagome antiferromagnet**. 2023. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/2310.10069.pdf>. Acesso em: 6/11/2023.