

**TESE DE DOUTORADO**

TRANSIÇÕES DE FASE QUÂNTICAS EM  
SISTEMAS CORRELACIONADOS

Daniel Lorenzo Reyes López

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas  
Rio de Janeiro, Agosto 2008

Tese de Doutorado submetida ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas  
sob orientação do Professor **Dr. Mucio Amado Continentino**  
e co-orientação do Professor **Dr. Amós Troper**  
para a obtenção do título de Doutor em Física por  
**Daniel Reyes López.**

2008

*A mi hermano Henry que se fué*  
*A Aurora que surgió*  
*A Ursel siempre*

*A Silvio, Pablo, Gabo, Sábato, Vargas Llosa, Benedetti,  
Morrison, Daniel F y Marco Aurelio Denegri. Por estar  
tan cerca de mi vida sin Uds. saberlo.*

# Agradecimentos

Agradeço ao meu pai, minha mãe e meus irmãos pelo carinho e pelo apoio em minha educação.

A meu orientador, professor Mucio Continentino, não só pela orientação, mas também por ter-me brindado sua amizade sincera.

À professora Elisa Baggio-Saitovitch, por ter-me brindado sua ajuda sempre que precisei.

Ao professor Amós Troper pela sua orientação inicial em minha formação de físico teórico.

A meu amigo Ruben pelas sugestões ao ler a tese.

A meus amigos Julio, Miguel, Willian, e Elmer, eles sabem porquê.

A meus amigos Victor, Virginia, Eduardo, Jose Luís e Vicente pelos gratos momentos vividos.

A meus amigos brasileiros Francisco, Isabel, Eberth, Fernanda, Rosângela, Andréa e Wanelly pelos gratos momentos vividos e pela paciência com o “portunhol”.

À galera do futebol das quartas (quintas) e sábados. Que me viram fazer gols impossíveis e falhar gols imperdíveis.

A meus amigos *sanmarquinos* Marisel, César, Vanesa, Luís, Richard, Carlos Landauro e aos professores Bustamante, Peña, Medrano, pelos momentos compartilhados na *Decana de América*.

A meus amigos de toda a vida Julian, Carlos, Miguel e Charon.

Aos funcionários da biblioteca do CBPF, à secretaria da Pós-Graduação Miriam, e aos funcionários do órgão de Física experimental e baixas energias do CBPF.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

Agradeço finalmente a todas pessoas que faltaram aqui que também achem que mereçam algum agradecimento.

# Resumo

Neste trabalho estudamos as transições de fase quânticas em sistemas correlacionados utilizando uma representação de spin em operadores de enlace numa aproximação Gaussiana. Em primeiro lugar, estudamos o modelo colar de Kondo com um parâmetro de anisotropia tipo Ising  $\varsigma$ , e um campo magnético  $H$  aplicado na direção- $z$ . Este modelo, no limite de banda semi-cheia, é relevante para descrever uma classe de sistemas férmions pesados, os chamados isolantes de Kondo.

Primeiramente, analisamos o efeito do parâmetro  $\varsigma$  no modelo colar de Kondo a temperatura finita e nula para dimensões arbitrárias,  $d$ . A temperatura nula e na fase paramagnética, determinamos o expoente do gap de spin  $\nu z \approx 0.5$ , em três dimensões para  $0 \leq \varsigma \leq 1$ . Este resultado é consistente com o valor  $z = 1$  para o expoente dinâmico devido ao caráter Gaussiano da aproximação usada nos operadores de enlace, que por sua vez implica que  $\nu = 1/2$ . A baixas temperaturas, na fase antiferromagnética, a linha de Néel é calculada para  $\varsigma \ll 1$ . Para  $d > 2$  esta linha é renormalizada pela anisotropia e varia com a distância ao ponto crítico quântico  $|g|$  como,  $T_N \propto |g|^\psi$  com o expoente de deslocamento  $\psi = 1/(d - 1)$ . No entanto, em duas dimensões, a ordem de longo alcance só ocorre a  $T = 0$  para  $\varsigma \ll 1$ . Na fase paramagnética, encontramos uma dependência com a temperatura do calor específico para  $J/t = (J/t)c$ ,  $T \rightarrow 0$ . Este se comporta como  $C_V \propto T^d$  para  $\varsigma \ll 1$  e  $\varsigma \approx 1$ , em concordância com a teoria de escala para  $z = 1$ .

Estudamos os efeitos de um campo magnético na direção- $z$  aplicado no modelo colar de Kondo. Este campo é aplicado na fase desordenada tipo líquido de spin e gera uma ordem antiferromagnética acima de um campo crítico  $H_{c1}$ . Esta fase ordenada sobrevive até um segundo campo crítico  $H_{c2}$ , chamado de campo de saturação. Para valores de campo superiores a  $H_{c2}$ , o estado fundamental apresenta uma fase paramagnética saturada, com todos os spins apontando na direção do campo.

Estudamos também o crossover dimensional no modelo colar de Kondo a temperatura nula e finita. Relações explícitas descrevendo as propriedades quase-bidimensionais são obtidas resolvendo-se assintoticamente as equações resultantes. O crossover de duas dimensões ( $2d$ ) para três dimensões ( $3d$ ) é investigado, ligando-se o hopping eletrônico ( $t_{\perp}$ ) entre planos diferentes. Além do mais, o caso quase-tridimensional ( $q3d$ ) e quase-unidimensional ( $q1d$ ) são estudados. O diagrama de fases em função da temperatura  $T$ , e  $t_{\perp}/t_{\parallel}$ , onde  $t_{\parallel}$  é o hopping nos planos, é calculado. Um comportamento reentrante na linha crítica dependente da temperatura é encontrado próximo de duas dimensões. Ao redor do ponto crítico quântico tridimensional a linha crítica é descrita como a raiz quadrada de  $|g|$ .

Finalmente, estudamos a transição de fase quântica em antiferromagnetos anisotrópicos quando o campo é reduzido a valores menores que um campo crítico  $H_{c2}$  e o sistema entra numa fase antiferromagnética- $XY$ . A temperatura nula e campos magnéticos fortes o estado fundamental é paramagnético saturado com todos os spins alinhados na direção do campo. Usando uma representação em operadores de enlace consideramos o modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin-1 com uma anisotropia local, tipo “single-ion”, em redes hiper-cúbicas na presença de campos magnéticos fortes. Mostramos que a transição em  $H_{c2}$  pode ser interpretada como uma condensação Bose-Einstein de magnons. Os resultados teóricos são usados para analisar os dados de magnetização versus campo no composto  $NiCl_2 - 4SC(NH_2)_2$  (DTN) a temperaturas muito baixas. Este sistema é ideal para se estudar condensação Bose-Einstein de magnons desde que  $H_{c2}$  seja suficientemente baixo e possa ser alcançado com campos magnéticos estáticos ao contrário de campos pulsados. O scaling da magnetização em função do campo e temperatura próximo de  $H_{c2}$  mostra excelente concordância com as previsões teóricas. Isso permite obter os expoentes críticos quânticos e confirmar a natureza tipo condensação Bose-Einstein da transição em  $H_{c2}$ .

# Abstract

In this work we have studied quantum phase transitions in strongly correlated systems using a bond-operator method within a Gaussian approximation. Specifically, we have studied the Kondo necklace model with an Ising-like anisotropy characterized by a parameter  $\varsigma$ , and a magnetic field applied  $H$  in the  $z$ -direction. This model, at half-filling, is relevant to describe a class of heavy fermions, the so-called Kondo insulators.

Firstly, the Ising-like anisotropy parameter  $\varsigma$  in the Kondo necklace model is analyzed at zero and finite temperatures for arbitrary  $d$  dimensions. At zero temperature and in the paramagnetic phase, we have determined the spin gap exponent  $\nu z \approx 0.5$ , in three dimensions. This is independent of the anisotropy between  $0 \leq \varsigma \leq 1$  and is consistent with the dynamic exponent assuming the value  $z = 1$ , taking into account the Gaussian character of the approximation used in the bond-operator treatment. At low but finite temperatures, in the antiferromagnetic phase, the line of Néel transitions is calculated for  $\varsigma \ll 1$ . For  $d > 2$  it is only re-normalized by the anisotropy parameter and varies with the distance to the quantum critical point  $|g|$  as  $T_N \propto |g|^\psi$  where, the shift exponent  $\psi = 1/(d-1)$ . Nevertheless, in two dimensions, a long range magnetic order occurs only at  $T = 0$  for any  $\varsigma \ll 1$ . In the paramagnetic phase, we find a power law temperature dependence on the specific heat at the quantum critical trajectory  $J/t = (J/t)c$ ,  $T \rightarrow 0$ . It behaves as  $C_V \propto T^d$  for  $\varsigma \ll 1$  and  $\varsigma \approx 1$ , in concordance with the scaling theory for  $z = 1$ .

We also have studied the magnetic field effects in the Kondo necklace model. This field is applied in the spin liquid state and induces an antiferromagnetic phase above a critical field  $H_{c1}$ . This ordered phase survives until a second critical field  $H_{c2}$ , called of saturation field. For fields larger than  $H_{c2}$ , the ground state is a saturated paramagnetic phase, with all the spins pointing in the field direction.



Subsequently, dimensional crossover in the Kondo necklace model is analyzed at zero and finite temperatures. Explicit relations describing quasi-two-dimensional properties are obtained by asymptotically solving the resulting equations. The crossover from two dimensions ( $2d$ ) to three dimensions ( $3d$ ) is investigated, turning on the electronic hopping ( $t_{\perp}$ ) of conduction electrons between different planes. In addition, the cases of quasi-three-dimensional ( $q3d$ ) and quasi-one-dimensional ( $q1d$ ) system, were also investigated. The phase diagram as a function of temperature  $T$  and  $t_{\perp}/t_{\parallel}$ , where  $t_{\parallel}$  is the hopping within the planes, is calculated. Unusual reentrant behavior in the temperature-dependent antiferromagnetic critical line is found close to two dimensions. Near the isotropic three-dimensional quantum critical point, the critical line is described by a standard power law with a square root dependence on the distance to the quantum critical point.

Finally, we have studied the quantum phase transition in anisotropic antiferromagnets as the field is reduced below the saturation field  $H_{c2}$  and the system enters an  $XY$ -antiferromagnetic phase. At zero temperature and strong applied magnetic fields, the ground state of an anisotropic antiferromagnet is a saturated paramagnet with fully aligned spins. Using a bond operator representation we consider a model spin-1 Heisenberg antiferromagnetic with single-ion anisotropy in hyper-cubic lattices under strong magnetic fields. We have showed that the transition at  $H_{c2}$  can be interpreted as a Bose-Einstein condensation of magnons. These theoretical results were used to analyze the magnetization versus field data in the organic compound  $NiCl_2 - 4SC(NH_2)_2$  (DTN) at very low temperatures. This is an ideal system to study Bose-Einstein condensation since  $H_{c2}$  is sufficiently low to be reached with static magnetic fields as opposed to pulsed fields. The scaling of the magnetization as a function of field and temperature close to  $H_{c2}$  has shown excellent agreement with the theoretical predictions and allowed us to obtain the quantum critical exponents and confirm the Bose-Einstein condensation nature of the transition at  $H_{c2}$ .

# Conteúdo

<b>Dedicatória</b>	<b>iii</b>
<b>Agradecimentos</b>	<b>iv</b>
<b>Resumo</b>	<b>vi</b>
<b>Abstract</b>	<b>viii</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Conceitos básicos em transições de fase . . . . .	5
1.2 Efeitos quânticos na vizinhança do ponto crítico . . . . .	8
1.3 Teoria de escala nas transições de fase quânticas . . . . .	11
<b>2 Férmions pesados</b>	<b>15</b>
2.1 Introdução . . . . .	15
2.2 Férmions pesados . . . . .	16
2.3 Física dos Férmions pesados . . . . .	17
2.4 Estados fundamentais dos Férmions pesados . . . . .	20
<b>3 Operadores de spin de Sachdev</b>	<b>25</b>
3.1 Introdução . . . . .	25
3.2 Os operadores de enlace para spin-1/2 . . . . .	26

3.2.1	Relações de comutação entre os operadores de enlace para spin-1/2 . . . . .	31
3.3	Operadores de enlace para spin-1/2 na presença de um campo magnético	33
3.4	Operadores de enlace para spin-1 . . . . .	35
<b>4</b>	<b>Efeitos de anisotropia e campo magnético em redes de Kondo</b>	<b>37</b>
4.1	Introdução . . . . .	37
4.2	Isolantes de Kondo . . . . .	38
4.2.1	O modelo de Anderson . . . . .	39
4.2.2	O modelo da rede de Kondo . . . . .	40
4.3	O modelo colar de Kondo . . . . .	42
4.4	Comportamento termodinâmico crítico quântico do modelo colar de Kondo anisotrópico . . . . .	47
4.4.1	A Hamiltoniana . . . . .	47
4.4.2	Fase Paramagnética . . . . .	51
4.4.3	Resultados numéricos a $T = 0$ . . . . .	52
4.4.4	Resultados analíticos na trajetória crítica quântica . . . . .	58
4.4.5	Fase Antiferromagnética . . . . .	60
4.4.6	Linha crítica de Néel . . . . .	62
4.5	Comportamento crítico quântico magnético induzido por campo magnético no modelo colar de Kondo . . . . .	64
4.5.1	A Hamiltoniana . . . . .	64
4.5.2	Estado líquido de spin ( $H < H_{c1}$ ) . . . . .	67
4.5.3	Fase antiferromagnética ( $H_{c1} < H < H_{c2}$ ) . . . . .	70
4.5.4	Fase saturada ( $H > H_{c2}$ ) . . . . .	71
<b>5</b>	<b>Crossover dimensional em redes de Kondo anisotrópicas</b>	<b>73</b>
5.1	Introdução . . . . .	73

5.2	Aproximação Gaussiana . . . . .	75
5.3	Fase ordenada antiferromagnética . . . . .	76
5.4	Linha crítica de Néel . . . . .	78
5.4.1	Resultados numéricos a $T = 0$ . . . . .	79
5.5	Resultados analíticos a temperatura finita . . . . .	81
5.5.1	Caso $\xi \ll 1$ . . . . .	82
5.5.2	Caso $\xi \approx 1$ . . . . .	86
5.5.3	Caso $\xi \gg 1$ . . . . .	87
<b>6</b>	<b>Condensação Bose-Einstein de magnons</b>	<b>89</b>
6.1	Introdução . . . . .	89
6.2	Condensação Bose-Einstein de magnons induzida por campo magnético	92
6.2.1	O composto orgânico $NiCl_2-4SC(NH_2)_2$ (DTN) . . . . .	94
6.2.2	Níveis de energia do composto DTN . . . . .	98
6.3	Condensação Bose-Einstein de magnons próximo do campo magnético de saturação . . . . .	101
6.3.1	A Hamiltoniana . . . . .	103
6.3.2	Operadores de enlace para spin-1, próximo de $H_{c2}$ . . . . .	104
6.3.3	Aproximação Gaussiana . . . . .	106
6.3.4	Propriedades físicas na trajetória crítica quântica ( $H = H_{c2}$ , $T \rightarrow$ 0) . . . . .	108
6.3.5	Linha crítica de Néel . . . . .	111
6.3.6	Análise de escala da magnetização . . . . .	113
<b>7</b>	<b>Conclusões e Perspectivas</b>	<b>116</b>

# Lista de Figuras

1.1	Diagrama de fases temperatura $T$ versus um parâmetro externo não térmico $r$ , para um sistema bidimensional. . . . .	10
1.2	Diagrama de fases temperatura $T$ versus um parâmetro externo não térmico $r$ , para um sistema tridimensional. . . . .	11
2.1	Diagrama de fases do composto $YbRh_2Si_2$ . . . . .	20
2.2	Diagrama de fases do composto $CePd_2Si_2$ . . . . .	22
2.3	Diagrama de fases do composto $CeCu_{6-x}Au_x$ . . . . .	23
4.1	Cadeia colar de Kondo para quatro sítios. . . . .	43
4.2	Diagrama de fases do modelo colar de Kondo em três dimensões pelo método de grupo de renormalização de campo médio. . . . .	45
4.3	Diagrama de fases do modelo colar de Kondo em três dimensões comparado com resultados experimentais para compostos que contém $Ce$ . . . . .	46
4.4	Gap de spin $\Delta/J$ versus o parâmetro de controle $(J/t)^{-1}$ para diferentes valores do parâmetro de anisotropia $\zeta$ em uma dimensão e temperatura nula. . . . .	54
4.5	Gap de spin $\Delta/J$ versus o parâmetro de controle $(J/t)^{-1}$ para diferentes valores do parâmetro de anisotropia $\zeta$ em duas dimensões e temperatura nula. . . . .	55

4.6	Gap de spin $\Delta/J$ versus o parâmetro de controle $(J/t)^{-1}$ para diferentes valores do parâmetro de anisotropia $\varsigma$ em três dimensões e temperatura nula. . . . .	56
4.7	Resistividade longitudinal versus a temperatura para campos magnéticos fixos. . . . .	65
5.1	Diagrama de fases a temperatura nula, $(J/t_{\parallel})_c$ versus o parâmetro de anisotropia $1 - \xi$ mostrando a linha de transição entre as fases paramagnética e antiferromagnética. . . . .	80
5.2	Diagrama de fases entre a temperatura como $\alpha_c^{-1} = 4k_B T_N / \omega_0$ e $J/t_{\parallel}$ para valores do parâmetro de anisotropia, $\xi \ll 1$ . . . . .	83
5.3	Diagrama de fases temperatura crítica de Néel como $\alpha_c^{-1} = 4k_B T_N / \omega_0$ versus $J/t_{\parallel}$ e o parâmetro de anisotropia $1 - \xi$ , quando $\xi \ll 1$ . . . . .	84
5.4	Diagrama de fases entre a temperatura como $\alpha_c^{-1} 4k_B T_N / \omega_0$ versus $J/t_{\parallel}$ para o parâmetro de anisotropia $\xi \approx 1$ . . . . .	88
6.1	Diagrama de fases esquemático, temperatura como $T_c(K)$ versus campo magnético como $\mu H(T)$ , para um sistema que apresenta condensação Bose-Einstein de magnons induzida por campo magnético. . . . .	93
6.2	Célula unitária do composto orgânico tetragonal, DTN. . . . .	95
6.3	Diagrama de fases temperatura $T_N$ (K) versus campo magnético $H$ (T) para o composto orgânico DTN, em três dimensões. . . . .	96
6.4	Diagrama de fases temperatura versus campo magnético, do composto DTN, obtida mediante medidas de efeito magnetocalórico. . . . .	97
6.5	Figura da magnetização como $M(Am^2/mol)$ versus campo magnético como $B$ (T) do composto orgânico DTN para temperaturas $T = 0.016, 0.60$ e $0.94$ K. . . . .	98
6.6	Diagrama dos níveis de energia do composto DTN. . . . .	99

6.7	Diagrama de fases esquemático de um antiferromagneto anisotrópico com um campo magnético externo na direção $z$ . . . . .	110
6.8	Análise de escala log-log dos dados experimentais de magnetização para o composto orgânico DTN obtido para campos magnéticos até 17 T e temperaturas $T = 0.60, 0.64, 0.72$ e $0.94$ K. . . . .	114

# Lista de Tabelas

3.1	Estados singleto e tripleto para um par de partículas situadas em um sítio de uma rede, cada partícula com spin-1/2. . . . .	27
-----	--	----



# Capítulo 1

## Introdução

O fato de que as transições de fase a temperatura nula tenham sido o objetivo do primeiro “Focus” da prestigiosa revista *Nature Physics* [1] deste ano não faz mais que reafirmar o grau de importância que vêm tendo atualmente na comunidade científica. Mas o que são as transições de fase a temperatura nula? Para responder devemos primeiramente definir o que é uma transição de fase. Em nosso dia a dia observamos exemplos como o resfriamento da água até congelar, ou o aquecimento da mesma até evaporar. Um outro exemplo é a transição de fase que sofre um metal para um estado supercondutor quando sua temperatura é diminuída. O universo como o conhecemos tem vindo, segundo a teoria do *Big-Bang*, de diversas transições de fase com o resfriamento do plasma que o formava. Estas transições ocorrem a temperatura finita, e qualquer ordem macroscópica é destruída pelas chamadas *flutuações térmicas*. Nos últimos anos, um tipo diferente de transição de fase tem atraído a atenção dos físicos. Estas são as transições de fase que ocorrem a temperatura nula, sendo que o ponto crítico separando as fases é chamado de Ponto Crítico Quântico (QCP, do inglês “Quantum Critical Point”), e a ordem é destruída somente pelas *flutuações quânticas*, as quais são regidas pelo *princípio de incerteza de Heisenberg*. Estas transições a temperatura nula, que chamaremos daqui em diante de Transições de Fase Quânticas [2] (QPT, do inglês “Quantum Phase Transition”), têm se tor-

nado um tópico de grande interesse na física da matéria condensada, provocando um estudo constante nas últimas décadas, tanto experimental como teórico. Exemplos de transições de fase quânticas acontecem, entre outros, em férmions pesados [3], supercondutores de alta temperatura crítica [4, 5, 6, 7], condensados Bose-Einstein de gases diluídos [8] e condensados Bose-Einstein de excitações elementares [9, 10]. Ao contrário das transições térmicas, estas ocorrem como consequência da competição entre as diferentes interações do sistema [11, 12, 13] sendo seu estudo, na atualidade, de extrema importância para a compreensão das propriedades *anômalas* de sistemas correlacionados a baixas temperaturas [13]. Elas distinguem-se, ainda, pelo caráter quântico das flutuações críticas, pelo papel fundamental que o *tempo* desempenha nestas transições [11, 14] e pelo fato de que a temperatura nula, estática e dinâmica estão inextricavelmente acopladas [11, 13].

Entre os sistemas que apresentam transições de fase quânticas, nos quais estamos interessados nesta tese, encontram-se os compostos chamados férmions pesados, e os sistemas de spins quânticos com possível condensação Bose-Einstein de suas excitações coletivas [15]. Nestes sistemas, pode-se observar, em geral, o aparecimento de propriedades emergentes, associadas a uma quebra espontânea de simetria, surgindo como um fenômeno crítico ao variar a intensidade das interações. O primeiro grupo é formado por sistemas nos quais as correlações eletrônicas desempenham um papel crucial e as propriedades físicas e o comportamento universal podem ser atribuídos à proximidade destes materiais de uma transição de fase quântica [13]. O segundo grupo é formado por sistemas nos quais um parâmetro externo, como o campo magnético, pode induzir ordem de longo alcance e possível condensação Bose-Einstein das quase-partículas magnéticas que surgem no estado ordenado [15].

Visando fazer um estudo teórico das transições de fase quânticas envolvidas nos sistemas descritos acima, utilizamos aqui uma aproximação Gaussiana, i.e, os expoentes críticos ao redor da transição dependem da dimensão, com uma nova repre-

sentação de operadores de spin [16] extensivamente usada em problemas da matéria condensada. O método possui a vantagem de fazer de forma mais direta a ligação com os graus de liberdade da rede. Após apresentar a Hamiltoniana do sistema físico a ser estudado, na *forma efetiva*, diagonalizamos esta através do método das funções de Green [17, 18], obtendo-se basicamente a energia interna do sistema, assim como, as excitações elementares extraídas dos pólos das funções de Green.

A seguir detalhamos a estrutura desta tese.

- Neste primeiro capítulo fazemos uma breve revisão das transições de fase quânticas e da teoria de escala para este tipo de transições.
- No capítulo 2, apresentamos uma breve revisão das características experimentais, assim como a física das interações que ocorrem nos férmions pesados na região crítica quântica. Basicamente, nesta região, as interações entre as excitações fundamentais das quase-partículas e as flutuações de spin explicam o desaparecimento do magnetismo quando se varia a intensidade das interações.
- No capítulo 3, desenvolvemos o formalismo que usamos para representar os operadores de spin, os chamados operadores de enlace (bond-operators) de Sachdev, com a finalidade de aplicá-los no estudo de sistemas que apresentam uma transição de fase quântica. Esse estudo é importante desde que, como veremos nos capítulos seguintes 4, 5 e 6, esta nova representação ajuda a diagonalizar, mediante uma aproximação Gaussiana, as Hamiltonianas apresentadas para os sistemas a serem estudados.
- No capítulo 4, estudamos os efeitos de vários parâmetros, como anisotropia tipo Ising e campo magnético externo aplicado na direção- $z$  no modelo colar de Kondo. Encontramos diversos diagramas de fases, tanto no estado fundamental, como a baixas temperaturas. Finalmente, achamos uma expressão para a

linha crítica de Néel, que separa a fase ordenada da fase paramagnética desordenada, assim como o calor específico na chamada *trajetória crítica quântica*.

- No capítulo 5, discutimos os efeitos da dimensão espacial em redes de Kondo, e enfatizamos a importância que ela tem na compreensão das propriedades anômalas em torno de uma transição quântica.
- No capítulo 6, entramos em outra área de interesse nos sistemas que apresentam uma transição de fase quântica, a condensação Bose-Einstein induzida por um campo magnético na direção- $z$  em sistemas magnéticos quânticos. Usando os mesmos métodos do caso de férmions pesados explicamos como estas transições ocorrem e discutimos o tipo de universalidade ao qual pertencem.
- No capítulo 7, apresentamos as conclusões gerais da tese, assim como perspectivas para trabalhos futuros.

## 1.1 Conceitos básicos em transições de fase

Veremos ao longo desta tese que nosso objetivo de estudo é a física ao redor de uma transição de fase quântica tanto em sistemas de férmions pesados como também em sistemas de spins quânticos que apresentam condensação Bose-Einstein de suas excitações quando um campo magnético é aplicado. Assim, fazemos uma breve introdução às transições de fase quânticas e transições de fase a temperatura finita. Para uma revisão mais detalhada veja as referências [13, 19, 20, 21]. Transições de Fase (TF) são tradicionalmente classificadas em transições de primeira ordem e transições contínuas. Transições de primeira ordem acontecem com uma coexistência de fases, exemplos disto são o gelo e a água à 0°C, ou a água e o vapor à 100°C. No entanto, em transições contínuas as fases não coexistem, como por exemplo na transição paramagnética-ferromagnética levada por temperatura. Ambas transições podem ser estudadas pela termodinâmica e são caracterizadas por singularidades nas grandezas físicas no ponto de transição, sempre quando a transição for contínua. No que segue, estudaremos este tipo de transição que pode ser caracterizada por um parâmetro de ordem<sup>1</sup>. Frequentemente a escolha de um parâmetro de ordem para uma transição em particular é óbvia, um exemplo é a transição ferromagnética, onde a magnetização total é o parâmetro de ordem. No entanto, em alguns casos isto é complicado e ainda mais em debate, como a transição metal-isolante em sistemas eletrônicos (transição de Mott [22]). Embora o valor médio do parâmetro de ordem seja zero na fase desordenada, suas flutuações não são zero. Próximo da transição as correlações espaciais destas flutuações se tornam de longo alcance e perto do Ponto Crítico (PC) seu comprimento de escala típico,  $\xi$ , diverge como,

$$\xi \propto |t|^{-\nu}, \quad (1.1)$$

---

<sup>1</sup>Esta é uma quantidade termodinâmica que é zero numa fase desordenada e diferente de zero numa fase ordenada.

onde  $\xi$  é chamado de comprimento de correlação,  $\nu$  o expoente crítico deste, e  $t$  um parâmetro adimensional que mede a distância ao ponto crítico definido como,

$$t = \frac{(T_c - T)}{T_c}, \quad (1.2)$$

onde  $T_c$  é a temperatura crítica na qual ocorre a transição. Além destas correlações espaciais das flutuações do parâmetro de ordem, existe também o análogo no tempo. A típica escala temporal para um decaimento das flutuações é a correlação temporal,  $\tau_c$ , que perto do ponto crítico diverge como,

$$\tau_c \propto \xi^z \propto |t|^{-\nu z}, \quad (1.3)$$

onde  $z$  é o expoente crítico dinâmico, que descreve a dinâmica intrínseca (quântica) do sistema [11]. Estas divergências, Eq. (1.1) e Eq. (1.3), são as responsáveis pelos chamados fenômenos críticos. No ponto crítico da transição o comprimento de correlação e a correlação temporal são infinitos, e diz-se que o sistema mostra invariância de escala. Como consequência, todas as grandezas dependem de parâmetros externos, mediante leis de potência. Para algumas grandezas importantes o comportamento assintótico é descrito como,

- Calor específico (campo nulo):

$$C \propto t^{-\alpha}. \quad (1.4)$$

- Susceptibilidade isotérmica:

$$\chi \propto t^{-\gamma}. \quad (1.5)$$

Define-se também em muitos casos, para caracterizar as transições, o parâmetro de ordem como  $\phi$ , sendo que  $\phi = 0$  corresponde a uma fase desordenada e  $\phi \neq 0$  à fase ordenada. O comportamento assintótico deste vem dado por

$$\phi \propto t^\beta. \quad (1.6)$$

Na presença de campos externos o comportamento assintótico do parâmetro de ordem em relação ao campo conjugado na isoterma crítica é

$$\phi(t=0) \propto |H|^{1/\tilde{\delta}} \text{sgn}(H), \quad (1.7)$$

onde  $H$  é um campo externo e  $\text{sgn}(x)$  é a função sinal. O conjunto de expoentes, chamados de expoentes críticos, caracteriza completamente o comportamento crítico perto da transição de fase. Estes expoentes não são independentes e estão relacionados entre si por algumas desigualdades como:

- Desigualdade de Rushbrooke

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2. \quad (1.8)$$

- Primeira desigualdade de Griffiths

$$\alpha + \beta(1 + \tilde{\delta}) \geq 2. \quad (1.9)$$

- Segunda desigualdade de Griffiths

$$\gamma \geq \beta(\tilde{\delta} - 1). \quad (1.10)$$

- Desigualdade de Fisher

$$\gamma \geq (2 - \eta)\nu. \quad (1.11)$$

- Desigualdade de Josephson

$$d\nu \geq 2 - \alpha. \quad (1.12)$$

Nas duas últimas relações,  $d$  é a dimensão espacial e  $\eta$  é o expoente referente ao comportamento assintótico da função de correlação, definida como,

- Função de correlação

$$\Gamma(r) \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}}. \quad (1.13)$$

É interessante observar que na criticalidade  $T = T_c$  essas desigualdades entre expoentes críticos são satisfeitas como igualdades e conhecidas como leis de escala. Outro ponto interessante é a universalidade<sup>2</sup> destas transições contínuas, i.e., o fato de que diversos modelos, a princípio muito diferentes, podem apresentar propriedades idênticas no limite de longos comprimentos de onda e conseqüentemente possuem os mesmos expoentes críticos associados. Entretanto, a posição do ponto crítico e as amplitudes associadas às formas de escala são em geral não-universais [13] e dependem de propriedades microscópicas de cada modelo.

## 1.2 Efeitos quânticos na vizinhança do ponto crítico

Para investigar em que medida a mecânica quântica afeta uma transição de fase contínua temos que comparar duas escalas de energias, i.e.,  $\hbar\omega_c$  que é a energia das flutuações associadas às frequências de interesse e  $k_B T$  que é a energia associada às flutuações de temperatura. Vimos na seção anterior que a escala temporal típica,  $\tau_c$ , diverge próxima de uma transição contínua. Desse modo a escala de frequência típica  $\omega_c$  diverge como,

$$\hbar\omega_c \propto |t|^{\nu_z} . \quad (1.14)$$

De acordo com estes resultados podemos entender porque as transições a temperatura nula são diferentes das transições a temperatura finita. Em temperatura finita, mesmo para modelos essencialmente quânticos, as flutuações importantes próximo do PC são bem descritas classicamente quando  $\hbar\omega_c \ll k_B T$ . No caso contrário, os efeitos quânticos serão relevantes quando,

$$\hbar\omega_c \gg k_B T. \quad (1.15)$$

---

<sup>2</sup>O tipo de universalidade ao qual um sistema pertence é determinado somente pelas simetrias do parâmetro de ordem e pela dimensão do sistema.



Agora, para uma transição ocorrendo a uma temperatura  $T_c$ , a mecânica quântica será irrelevante para  $|t| < T_c^{1/\nu z}$ , i.e., o comportamento crítico é inteiramente clássico próximo da transição. Isso justifica chamar toda transição de fase a temperatura finita de “clássica” mesmo quando envolvem sistemas essencialmente quânticos como Hélio líquido ou supercondutores, sendo que podem ser perfeitamente explicadas pela mecânica estatística clássica. Por outro lado, para transições a  $T = 0$  em função de um parâmetro não térmico  $r$ , como campo magnético ou pressão, o comportamento é sempre determinado pelas flutuações quânticas. Isto torna este tipo de transição de fase diferente, justificando sua referência por transição de fase quântica<sup>3</sup>. A competição entre estas flutuações, clássicas e quânticas, produz um diagrama de fases interessante na vizinhança do QCP, que chamaremos de  $r_c$ , desde que a ordem de longo alcance aconteça a temperatura nula ou finita. A Fig. (1.1) descreve a situação onde ordem existe somente a  $T = 0$ , um exemplo disto são sistemas de spin quânticos em duas dimensões onde a ordem é proibida pelo teorema de Mermin-Wagner [23]. Neste caso, o comportamento a temperatura finita é caracterizado por três regiões bem diferentes, separadas por *crossovers*, dependendo se o comportamento crítico é dominado pelas flutuações térmicas ou quânticas do parâmetro de ordem. Na região desordenada térmica, a ordem é destruída principalmente pelas flutuações térmicas, enquanto que na região desordenada quântica a física é descrita pelas flutuações quânticas. Entre estas duas regiões encontra-se a chamada “região crítica quântica” [24, 25]. A fronteira desta região é determinada pela condição  $k_B T > \hbar \omega_c \propto \delta^{\nu z}$ , onde  $\delta = |r - r_c|$  mede a distância para o QCP, e onde a criticalidade é determinada pelas flutuações térmicas. Assim, a física da região crítica quântica é controlada pelas excitações térmicas do seu estado fundamental, cuja principal característica é a ausência de quase-partículas convencionais. Isto faz com que as grandezas termodinâmicas nesta região tenham um comportamento não

---

<sup>3</sup>Para temperaturas muito baixas os efeitos quânticos são observados experimentalmente e influem até mesmo em transições térmicas se  $T_c \rightarrow 0$  [13].

convencional como por exemplo, comportamento Não Líquido de Fermi (NFL, do inglês “Non-Fermi Liquid”), etc.

Quando ordem também existe a temperatura finita, o diagrama de fases é ainda mais rico. Isso é mostrado na Fig. (1.2), na qual uma transição de fase ocorre variando-se o parâmetro  $r$  a temperaturas baixas. Como discutimos anteriormente as flutuações clássicas dominam na vizinhança da transição a temperatura finita até se tornarem indistinguíveis conforme a temperatura diminui até o QCP<sup>4</sup>, onde somente flutuações quânticas dominam o sistema.

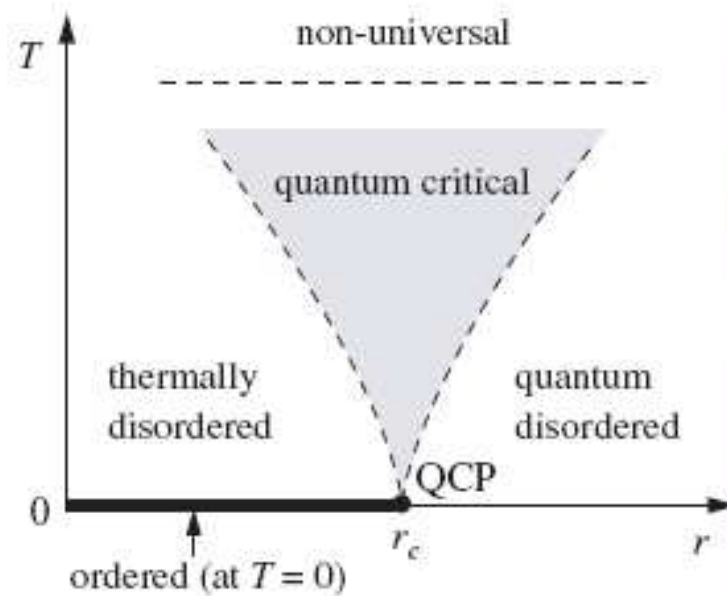


Figura 1.1: Diagrama de fases temperatura  $T$  versus um parâmetro externo não térmico  $r$ , onde a ordem só acontece a temperatura nula [26]. As linhas pontilhadas indicam a fronteira da região crítica quântica, chamada de *quantum critical*, que é regida pela relação  $k_B T > \delta^{\nu z}$ , das regiões desordenada térmica e quântica, chamadas de *thermally disordered* e *quantum disordered*, respectivamente. Mostra-se também o QCP localizado em  $r = r_c$ .

<sup>4</sup>Este ponto crítico a temperatura nula pode ser aproximado fazendo  $r \rightarrow r_c$  a  $T = 0$  ou  $T \rightarrow 0$  em  $r = r_c$ .

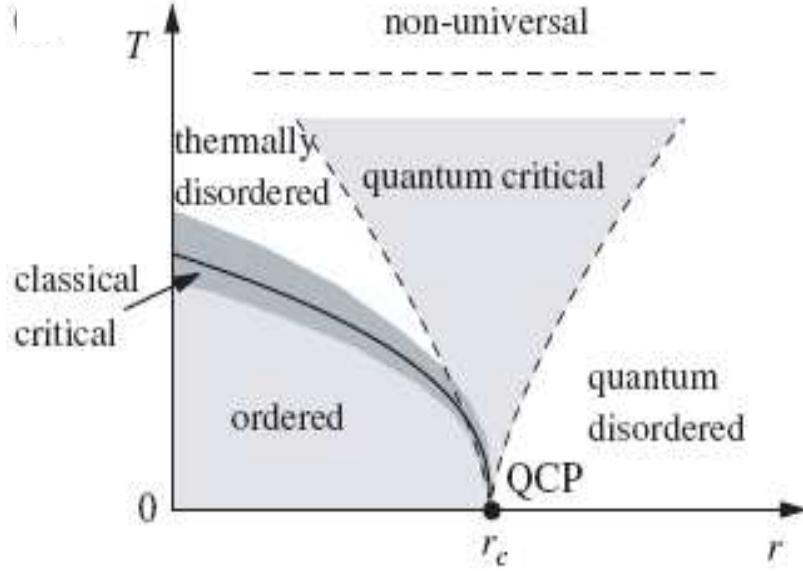


Figura 1.2: Diagrama de fases temperatura  $T$  versus um parâmetro externo não térmico  $r$ , onde a ordem existe a temperatura finita, assim como a temperatura nula. A linha cheia separa a fase ordenada de longo alcance da desordenada, chamadas de *ordered* e *thermally disordered*, respectivamente. Próximo desta linha o comportamento crítico é clássico. Mostra-se também as regiões crítica quântica, chamada de *quantum critical*, desordenada térmica e quântica, chamadas de *thermally disordered* e *quantum disordered*, respectivamente, e o QCP localizado em  $r = r_c$ . Figura reproduzida da referência [26].

### 1.3 Teoria de escala nas transições de fase quânticas

As transições de fase, como discutimos anteriormente, são caracterizadas por divergências de um comprimento e um tempo característicos,

$$\xi \sim \delta^{-\nu}, \quad (1.16)$$

$$\tau_c \sim \delta^{-\nu z}, \quad (1.17)$$

onde  $\delta$  mede a distância até o QCP e  $z$  é definido devido à possível anisotropia entre a

dimensão temporal e as dimensões espaciais. No caso isotrópico temos simplesmente  $z = 1$  e a divergência do “comprimento de correlação temporal” na criticalidade ( $\delta = 0$ ) é idêntica à divergência do comprimento de correlação espacial. Tendo a distância ao QCP  $\delta \propto (J - J_c)$  onde  $J$  é um parâmetro da Hamiltoniana e de acordo com a hipótese de Kadanoff [27] podemos reescalar:

$$J' = b^{-y} J, \quad (1.18)$$

$$\delta' = b^a \delta, \quad (1.19)$$

$$\tau' = b^z \tau, \quad (1.20)$$

onde o fator de escala é  $b = (L/L')$ , sendo  $L$  e  $L'$  as dimensões lineares do sistema original e do sistema reescalado respectivamente. Podemos relacionar estes expoentes  $y$  e  $a$  com os expoentes críticos, assim o comprimento de correlação escala como,

$$\xi'(|\delta'|) = \frac{\xi(|\delta|)}{b}, \quad (1.21)$$

onde  $b$  é um valor arbitrário. Usando (1.19) temos,

$$\xi'(b^a |\delta|) = \frac{\xi(|\delta|)}{b}, \quad (1.22)$$

e fazendo  $b^a |\delta| = 1$  ou  $b = |\delta|^{-1/a}$  encontramos para o comportamento do comprimento de correlação próximo da criticalidade

$$\xi = |\delta|^{-1/a} \xi'. \quad (1.23)$$

Portanto, de acordo com (1.16) o expoente  $\nu$  é

$$\nu = \frac{1}{a}. \quad (1.24)$$

Para encontrar a relação com o expoente  $z$  basta exigir que a incerteza

$$\Delta E \Delta \tau \geq \hbar \quad (1.25)$$

seja invariante de escala. Observamos que  $\Delta E$  (uma energia) deve escalar como  $J$  (outra energia) em (1.18) e o tempo característico escala como (1.20) na medida que podemos escrever:

$$\begin{aligned}\Delta E' \Delta \tau' &= \Delta E \Delta \tau \quad (\text{invariante de escala}) \\ \Rightarrow \quad b^{(z-y)} \Delta E \Delta \tau &= \Delta E \Delta \tau \\ &\Rightarrow z = y.\end{aligned}\tag{1.26}$$

A parte singular da energia livre a  $T = 0$  comporta se como:

$$f_s = \frac{F_s}{L^d} = Jf(\delta),\tag{1.27}$$

e por isso reescalando por  $L' = L/b$  temos:

$$f'_s = \frac{F_s}{(L')^d} = b^d f_s = J'f(|\delta'|).\tag{1.28}$$

Usando (1.18) e (1.19) encontramos:

$$b^d f_s = b^{-y} Jf(b^a |\delta|)\tag{1.29}$$

e fazendo  $b = |\delta|^{-1/a}$  temos:

$$\frac{f_s}{J} = |\delta|^{\frac{y+d}{a}} f(1).\tag{1.30}$$

Mas a parte singular da densidade de energia comporta se como

$$f_s \propto |\delta|^{2-\alpha},\tag{1.31}$$

o que define o expoente  $\alpha$ . Com o uso das relações para  $z$  e  $\nu$  dadas pelas Eqs. (1.24) e (1.26) na Eq. (1.30) obtemos que a densidade de energia livre escala como

$$f_s \propto |\delta|^{\nu(d+z)},\tag{1.32}$$

e portanto os expoentes satisfazem a igualdade

$$2 - \alpha = \nu(d + z).\tag{1.33}$$

Podemos observar que esta relação é idêntica à desigualdade de Josephson, dada pela Eq. (1.12), satisfeita como igualdade com dimensão efetiva  $d_{eff} = d + z$ . Esta relação ilustra, de forma bastante clara, o papel excepcional da dinâmica do sistema neste tipo de transições a temperatura nula. De fato, uma consequência disto é que diversas transições quânticas de interesse têm expoentes clássicos, pois  $d_{eff} = d + z$  torna-se em geral maior que a dimensão crítica superior  $d_{uc}$ . Por esta razão as flutuações tornam-se irrelevantes, e a criticalidade pode ser bem descrita por uma teoria Gaussiana (critério de Ginzburg), onde as flutuações do sistema, mas não suas interações, são levadas em conta. Assim, se  $z = 1$ , tempo e espaço são simétricos, e o modelo quântico de  $d$  dimensões pode ser tratado como um modelo clássico em  $(d+1)$  dimensões. Neste trabalho trataremos modelos com expoente dinâmico  $z = 1$  e  $z = 2$  (veja-se capítulos 4, 5 e 6). Formas de escala para temperatura finita e o estudo completo das teorias de escala em transições quânticas utilizadas nesta tese podem ser encontradas na referência [13].

# Capítulo 2

## Férmions pesados

### 2.1 Introdução

Nos últimos anos o estudo experimental e teórico dos sistemas fortemente correlacionados, entre eles, os sistemas chamados Férmions Pesados (HF, do inglês “Heavy Fermion”) aumentou no interesse da comunidade científica [28, 29], principalmente pelo atrativo que apresentam por serem sistemas próximos de um ponto crítico quântico<sup>1</sup> [2, 30]. Este ponto crítico, a temperatura nula, separa uma fase magnética com ordem de longo alcance de uma fase não magnética, sendo o responsável, a baixas temperaturas, das propriedades *anômalas* que estes materiais apresentam [13, 31, 32]. O atrativo científico que possuem estes sistemas está baseado no entendimento da física dos sistemas fortemente correlacionados. Neste capítulo apresentamos, brevemente, aspectos teóricos e experimentais que motivaram nosso estudo teórico destes sistemas.

Do o ponto de vista experimental, a pressão externa ( $P$ ), substituição química ( $x$ ) e o campo magnético externo ( $H$ ) são ferramentas poderosas para investigar o com-

---

<sup>1</sup>Veremos ao longo desta tese que a descoberta deste ponto é de crucial importância para poder estudar estes materiais.

portamento crítico quântico nos HF. Estas técnicas experimentais influenciam as correlações eletrônicas entre os íons  $f$ , conseguindo-se ter um controle sob o parâmetro  $J/W$  [33, 34], sendo  $J$  a constante de acoplamento entre o spin dos íons  $f$  e o spin dos elétrons de condução, e  $W$  a largura da banda dos elétrons de condução [35]. Do ponto de vista teórico, esta *criticalidade quântica* pode ser descrita por uma teoria que propõe novas excitações críticas, inerentemente quânticas [36, 37, 209], enquanto que outras seguem uma teoria usual de transições de fase contínuas, a temperatura nula [11, 13, 31, 32, 39, 40]. No decorrer desta tese enfatizaremos esta última abordagem. Começaremos com uma descrição dos férmions pesados, para depois fazer uma introdução básica da física envolvida nestes compostos. Finalmente, mostramos os diversos estados fundamentais que estes apresentam.

## 2.2 Férmions pesados

Férmions pesados são materiais intermetálicos contendo elementos metálicos e Terras Raras (TR), como o *Cério* ( $Ce$ ) e o *Itérbio* ( $Yb$ ), no início e no fim da série das terras raras, ou *Urânio* ( $U$ ) na série dos Actinídeos (Ac). Estes apresentam, geralmente, uma configuração do tipo  $4f^n 5d^1 6s^2$  para as TR ( $5f^n 6d^1 7s^2$  no caso dos Ac), com a camada  $f$  incompleta, enquanto que os elétrons das camadas mais externas ( $d$  e  $s$ ) formam uma banda de condução. Por um lado, a instabilidade nas camadas  $f$  dos elementos de TR (ou Ac) proporciona um caráter ambíguo para os elétrons  $f$ , na fronteira entre serem considerados como localizados ou itinerantes [33, 41, 42, 43]. Por outro lado, os elétrons de condução fornecidos pelos elementos metálicos aumentam a interação elétron-elétron nestes materiais e, como consequência, um alto valor da massa efetiva ( $m_{eff}$ ) de seus elétrons de condução é observado. A ordem de grandeza da  $m_{eff}$  das quase-partículas (dos HF) encontra-se entre  $100-1000m_e$  ( $m_e \sim$  massa do elétron) [41] de um metal normal como o *Cobre* ( $Cu$ ). O fato de



considerar a massa das novas quase-partículas renormalizada à uma escala maior, explica muitas das propriedades anômalas observadas experimentalmente nestes materiais, particularmente no estado líquido de Fermi [13]. Uma característica comum dos sistemas de férmions pesados é o comportamento magnético a altas temperaturas, descrito por uma susceptibilidade magnética uniforme que muda com o inverso da temperatura  $T$ . Este comportamento tipo Curie está associado com a presença de um momento magnético no íon  $f$ . Ao se reduzir a temperatura do sistema, entretanto, a susceptibilidade torna-se independente da temperatura, ou seja, tipo Pauli [32], o que sugere um aniquilamento ou blindagem do momento magnético do íon em analogia com o que ocorre no efeito Kondo [44]. Este *crossover*, desde um comportamento magnético a altas temperaturas para um não magnético quando se resfria o sistema, apesar de remanescente do problema Kondo de uma impureza em uma matriz metálica, contém de fato uma física inteiramente original [31, 32, 45] como veremos posteriormente no capítulo 4.

## 2.3 Física dos Férmions pesados

De uma forma geral, as propriedades físicas dos férmions pesados são descritas pela competição entre duas interações <sup>2</sup>: a blindagem parcial dos momentos magnéticos pelos elétrons de condução (Efeito Kondo) [44, 46, 47] e a interação magnética coletiva de longo alcance entre os momentos localizados (interação Ruderman-Kittel-Kosiya-Yosida - RKKY) [48, 49, 50]. Estas interações escalam duas energias diferentes, cujas temperaturas características,  $T_K$  e  $T_{RKKY}$ , dependem da intensidade do parâmetro de controle ( $J/W$ ). O estado magnético do HF é definido quando a interação RKKY é maior que a interação Kondo, e o estado não magnético é definido na situação contrária. A questão mais interessante acontece quando a competição

---

<sup>2</sup>Sempre que desprezamos as flutuações de carga.

entre ambas interações está balanceada.

Muitos destes sistemas de HF distinguem-se, como foi dito anteriormente, por apresentarem, a baixas temperaturas, uma susceptibilidade de Pauli aumentada em relação a de metais normais. Segundo a teoria proposta por Landau [51], a susceptibilidade magnética  $\chi(T)$  e o calor específico dividido pela temperatura  $C(T)/T$ , tendem a uma constante no limite em que  $T \rightarrow 0$ . Com relação ao transporte elétrico, o comportamento previsto para a resistividade em função da temperatura é dado por  $\rho(T) = \rho_0 + AT^2$ , onde  $\rho_0$  é uma resistividade residual extrínseca e  $A > 0$ . Convém enfatizar que estas propriedades renormalizadas são encontradas quando a temperatura é inferior à chamada temperatura de coerência<sup>3</sup> ( $T_{coh}$ ) [13, 32], que marca o início do regime Líquido de Fermi (FL, do inglês “Fermi Liquid”).

Outro grupo de compostos de HF apresenta, em geral sob pressão, um comportamento diferente do descrito pela teoria de Landau, designado como comportamento não líquido de Fermi (NFL). Neste regime,  $\chi(T)$  e  $C(T)/T$  divergem de forma logarítmica ou como lei de potência quando  $T \rightarrow 0$  e  $\rho(T)$  varia como lei de potência  $T^\beta$ ,  $1 < \beta < 2$  [33, 34]. De todas estas características do estado NFL, a divergência de  $C(T)/T$  quando  $T \rightarrow 0$  é a mais importante pois a densidade de estados na superfície de Fermi diverge, motivo pelo qual dificilmente a física destes materiais pode ser entendida no contexto da teoria de Landau. Este comportamento NFL é observado para determinadas concentrações dos elementos químicos que formam os compostos ou para determinados valores de parâmetros externos, como pressão ou campo magnético. Diferentes teorias foram propostas para explicar este comportamento. Na literatura científica encontramos basicamente três grupos [33]: (1) modelos baseados na presença de desordem [52, 53, 54], (2) modelos Kondo multicanais [55, 56], e (3) modelos baseados na proximidade de uma

---

<sup>3</sup>Esta temperatura é difícil de ser obtida nos tratamentos usuais de muitos corpos. Entretanto, usando teoria de escala, pode-se demonstrar a existência desta nova escala de energia. Isto como resultado da competição entre o efeito Kondo e a interação RKKY, sendo inferior à escala de energia representada pela temperatura Kondo.

transição magnética [31, 36, 39, 57, 58].

No primeiro caso, um dos primeiros compostos que sugere a presença de desordem é  $UCu_{5-x}Pd_x$  com  $x = 1.0$  e  $x = 1.5$  [59], onde  $x$  representa a concentração química que induz a desordem. Com base nesses resultados Bernal *et al.* [52, 59] propuseram o *modelo de desordem de Kondo*, em que as ligas de HF são descritas em termos de um conjunto de spins independentes acoplados a uma nuvem de elétrons de condução. Após a proposta deste modelo, Miranda *et al.* [53, 60, 61, 62], consideraram o papel da interação elétron-elétron e de desordem no aparecimento do comportamento NFL. Um outro tratamento foi apresentado por Castro Neto *et al.* [54], onde além de desordem é considerada uma competição entre o efeito Kondo e a interação RKKY. Demais compostos, em que a desordem desempenha um papel importante, podem ser encontrados nas referências [33, 34].

No segundo caso, com respeito aos modelos de multicanais, são considerados diferentes tipos de elétrons de condução na blindagem dos momentos localizados i.e., de bandas diferentes, as quais são associadas a diferentes canais. Um exemplo de composto descrito dentro dessa teoria é  $UBe_{13}$ . Uma revisão deste modelo pode ser encontrada nas referências [63, 64].

Finalmente, no terceiro caso, o parâmetro de controle  $J/W$  leva o sistema ao ponto crítico quântico que fixa a transição de fase a temperatura nula. Ao redor deste ponto as flutuações do parâmetro de ordem são determinadas pela mecânica quântica. Neste contexto, espera-se que as interações entre as excitações fundamentais das quase-partículas e as flutuações de spin expliquem o desaparecimento do magnetismo no QCP<sup>4</sup> [11, 31, 33, 39, 40]. Um composto descrito por esta teoria é  $YbRh_2Si_2$ , que apresenta um comportamento NFL quando um campo magnético é aplicado [65]. A Fig. (2.1) mostra o diagrama de fases, temperatura versus campo magnético, para este composto no qual o comportamento NFL é encontrado na

---

<sup>4</sup>Neste ponto crítico dinâmica e estática estão acopladas, i.e., o QCP será afetado da mesma maneira por uma frequência ou temperatura finita, como foi dito no capítulo 1.

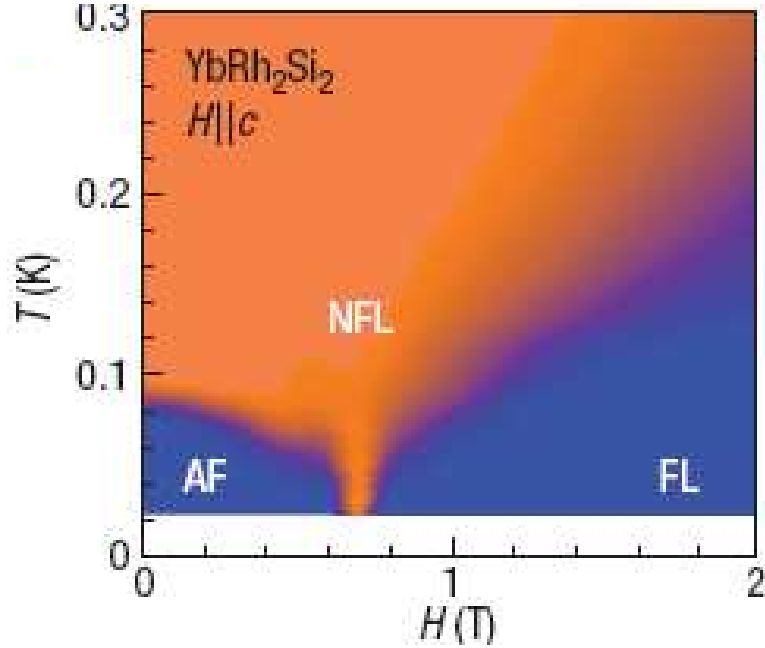


Figura 2.1: Diagrama de fases temperatura  $T$  em unidades Kelvin (K) versus campo magnético em unidades Tesla (T) do composto  $YbRh_2Si_2$ . Mostra-se a supressão do ordenamento magnético por um campo magnético transversal,  $H \parallel c$ . Se mostra também a lei de potência  $\Delta\rho \equiv (\rho(T) - \rho_0)\alpha T^\alpha$  onde a região de cor laranja mostra o comportamento NFL, que acontece a temperaturas muito baixas e ao redor do QCP  $H_{c1} = 0.66$  T, com  $\alpha = 1$ . A região de cor azul indica um comportamento metálico normal, e corresponde à fase AF e o comportamento FL com  $\alpha = 2$ . Figura reproduzida da referência [65].

região de cor laranja, e é definido pela relação  $\Delta\rho \equiv (\rho(T) - \rho_0)\alpha T^\alpha$  onde  $\alpha = 1$ . A região de cor azul define o comportamento FL e a fase antiferromagnética (AF) com  $\alpha = 2$ . Como nosso interesse está direcionado para este último caso, restringiremos a ele a partir daqui, enfatizando sempre que estamos na proximidade de uma transição magnética, com temperatura de ordenamento próxima de  $0^\circ$  K.

## 2.4 Estados fundamentais dos Férmions pesados

Em geral os férmions pesados podem ser encontrados em uma variedade de es-

tados fundamentais: (1) supercondutor em coexistência (ou próximo) com a fase antiferromagnética [66, 67], (2) antiferromagnético [68], (3) líquido de Fermi, e (4) isolante de Kondo [69].

No primeiro caso, temos compostos como  $UPt_3$  [70],  $UBe_{13}$  [71, 72],  $CeCu_2Si_2$  [66, 73],  $CePd_2Si_2$ ,  $CeCu_2Ge_2$  [74],  $URu_2Si_2$  [75],  $CeRhIn_5$  [76, 77] e  $CeCoIn_5$  [78, 79, 80] sendo que a transição pode ser induzida por substituição química de um de seus constituintes, campo magnético [76, 77, 78, 79, 80] ou pressão [73, 74, 81]. Neste caso, a instabilidade para este estado ocorre após o sistema entrar no regime líquido de Fermi. O mecanismo responsável pela supercondutividade ainda não está entendido em detalhe [82], mas diversas teorias acreditam que as flutuações magnéticas têm um papel fundamental no surgimento das propriedades supercondutoras [83]. A Fig. (2.2) é mostrada como exemplo de um diagrama de fases temperatura versus pressão, para o composto  $CePd_2Si_2$  [81], que ilustra o aparecimento de supercondutividade ao redor do QCP.

No segundo caso, temos sistemas como  $U_2Zn_{17}$ ,  $UCd_{11}$  e  $UCu_5$  que, quando submetidos a pressão, deixam de apresentar ordem magnética de longo alcance e desta maneira fica mais simples de se evidenciar a existência de um regime líquido de Fermi. É interessante que no caso oposto, ao se aplicar *pressão negativa* através de substituição química em um férmion pesado não magnético como  $CeRu_2Si_2$ , pode-se induzir antiferromagnetismo no sistema. Estes resultados mostram que os férmions pesados estão próximos de uma instabilidade magnética. Um exemplo de composto que apresenta estado fundamental AF é o  $CeCu_{6-x}Au_x$ , que possui uma fase antiferromagnética para  $x > 0.1$ . Para  $x = 0.1$  a temperatura de Néel anula-se. O comportamento do sistema passa a ser dominado pelo ponto crítico quântico e a resistividade comporta-se como  $\rho(T) \approx \rho_0 + AT$  com  $A > 0$  na região NFL [68]. No  $CeCu_{5.8}Au_{0.2}$  ( $T_N = 0.25K$ ) acima de uma pressão de 9 kbar o AF é suprimido. Uma análise similar é feita para o composto  $CeCu_{5.7}Au_{0.3}$  ( $T_N = 0.5K$ ). A Fig. (2.3)

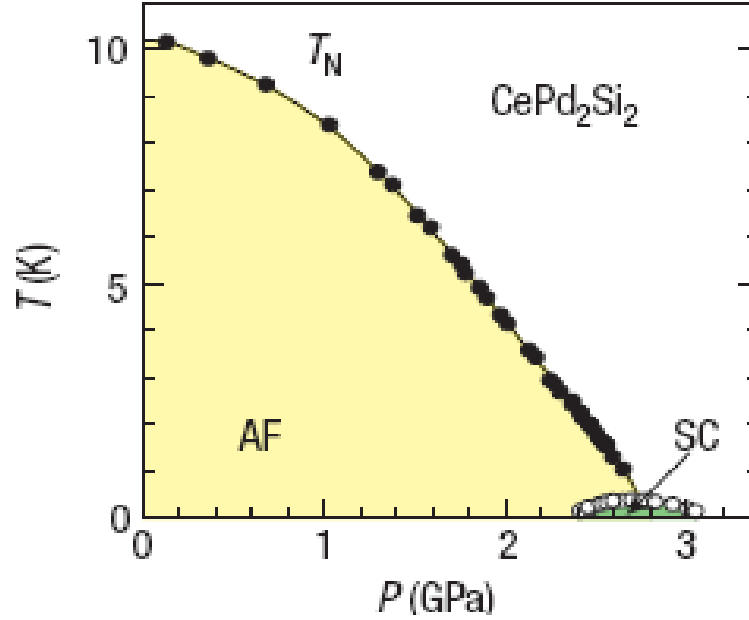


Figura 2.2: Diagrama de fases temperatura  $T$  em Kelvin (K) versus pressão em unidades Gigapascal (GPa), para o composto  $CePd_2Si_2$ . Mostra-se o estado supercondutor surgindo próximo do QCP a temperaturas muito baixas. A temperatura de Néel  $T_N$  e a temperatura crítica supercondutora são indicadas por círculos cheios e vazios, respectivamente. Mostra-se também a fase ordenada antiferromagnética, denotada como  $AF$  e a fase supercondutora denotada como  $SC$ . Figura reproduzida da referência [81].

mostra o diagrama de fases temperatura versus dopagem  $x$  deste sistema.

No terceiro caso, para sistemas que apresentam estado fundamental líquido de Fermi, temos os compostos  $CeCu_6$ ,  $CeRu_2Si_2$  e  $UAl_2$  que não sofrem nenhuma instabilidade até as mais baixas temperaturas estudadas. Vale ressaltar que a própria existência de um regime líquido de Fermi, nos sistemas fortemente correlacionados já é um fato surpreendente.

Finalmente, no quarto grupo, um exemplo de isolante de Kondo é o composto  $Ce_3Bi_4Pt_3$  [84, 85]. Antecipando nosso estudo dos isolantes de Kondo, que veremos no capítulo 4, mencionaremos que a razão de incluí-los entre os férmions pesados é que a temperaturas suficientemente altas, as propriedades termodinâmicas destes

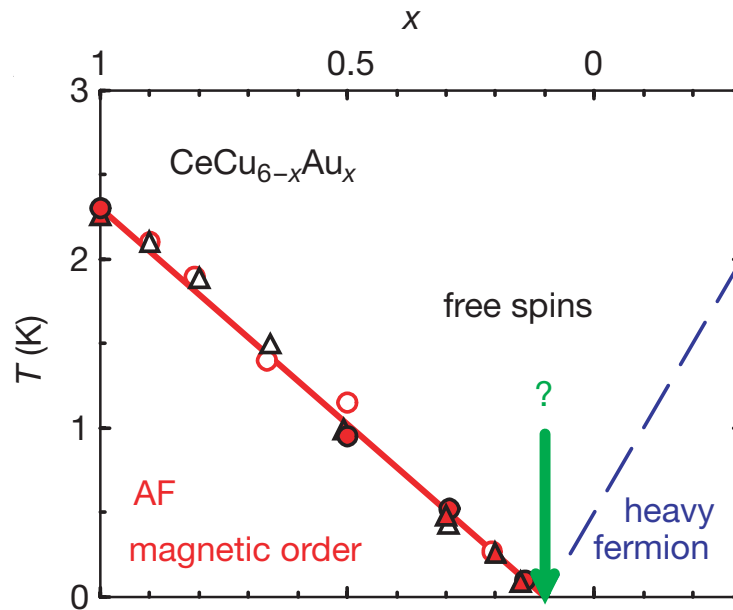


Figura 2.3: Diagrama de fases, do composto  $CeCu_{6-x}Au_x$ , temperatura em unidades (K) versus a dopagem definida como  $x$ . Veja que incrementar a concentração de  $Au$  leva a um ordenamento AF. O QCP está em  $x = 0.1$ . Mostra-se também a fase AF chamada de *AF magnetic order*, o estado líquido de Fermi, chamado de *heavy fermion*, e a região crítica quântica a temperaturas *altas*. Nesta última região, chamada de *free spins*, os spins estão descorrelacionados e podem ser considerados como *livres*. Finalmente, mostra-se também uma seta indicando que conforme a temperatura diminui no QCP, nosso conhecimento da física envolvida na criticalidade também diminui. Figura reproduzida da referência [68].

materiais são descritas por um modelo de gás de elétrons com massa renormalizada. Para o leitor interessado em mais detalhes sobre a física dos férmions pesados, assim como outros dados experimentais, o encorajamos a ler os artigos de revisão [33, 43, 86, 87].

Em resumo neste capítulo introduzimos basicamente os conceitos envolvidos na física dos férmions pesados e alguns comportamentos destes sistemas quando atravessam uma transição de fase quântica. Isto ajudará a compreensão dos modelos propostos para estudar estes compostos, entre eles o modelo colar de Kondo, que será introduzido no capítulo 4. Também neste capítulo, dedicaremos um estudo à parte aos isolantes de Kondo, devido à sua natureza especial e de certa forma

contraditória com a noção original de férmions pesados como sistemas metálicos.



# Capítulo 3

## Operadores de spin de Sachdev

### 3.1 Introdução

Em 1989, S. Sachdev e N. R. Bhatt introduziram uma nova representação para operadores de spin-1/2, chamados de operadores de enlace (bond-operators) [16]. Esta representação foi usada no estudo das propriedades do estado dimerizado<sup>1</sup> aplicando-o à Hamiltoniana de Heisenberg quântico AF bi-dimensional frustrado proposto por Gelfand *et al.* [88]. Basicamente tratava-se do estudo em sistemas isolantes, mas têm sido aplicados com sucesso no estudo: em *spin ladders* e compostos relacionados [89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98], em sistemas Hall quântico de duas camadas [99, 100], em antiferromagnetos dopados para descrever a fase isolante de Mott e supercondutora [101], na descrição do efeito Kondo em cupratos supercondutores [102], em sistemas que apresentam condensação Bose-Einstein de magnons [103, 104, 211, 106], para sistemas isolantes como  $TlCuCl_3$  [107, 108],  $BaCuSi_2O_6$  [109], em redes de Kondo [110, 111, 112, 113, 114, 115, 116, 117], e também na Hamiltoniana de Heisenberg quântico AF frustrado registrado na redação

---

<sup>1</sup>Um estado dimerizado consiste numa cobertura da rede com singletos formados por pares de spins.

desta tese [118]. A principal utilidade deste método está em tratar sistemas onde existe um estado fundamental natural desordenado, imposto pela Hamiltoniana ou por quebra espontânea de simetria<sup>2</sup>. O objetivo deste capítulo é mostrar como estes novos operadores surgem no caso de spin-1/2 e de spin-1, assim como as propriedades que satisfazem. O método permite ainda o cálculo direto da energia do estado fundamental e a obtenção das propriedades termodinâmicas do sistema.

## 3.2 Os operadores de enlace para spin-1/2

Na descrição da mecânica quântica um spin é um operador vetorial cujas componentes são os geradores do grupo  $SU(2)$ . Por exemplo; um operador de spin  $\mathbf{S}$  pode ser expresso em termos de suas componentes  $S_x$ ,  $S_y$  e  $S_z$  e as mesmas satisfazem as regras de comutação de momento angular<sup>3</sup>:

$$\begin{aligned} [\mathbf{S}^2, S_x] &= [\mathbf{S}^2, S_y] = [\mathbf{S}^2, S_z] = 0 \\ [S_\alpha, S_\beta] &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_\gamma, \quad \mathbf{S}^2 = S(S+1), \end{aligned} \quad (3.1)$$

onde  $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$  é o tensor completamente anti-simétrico e os sub-índices  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  referem-se às componentes  $x$ ,  $y$  e  $z$  dos operadores de spin. Considerando duas partículas situadas em um sítio de uma rede<sup>4</sup>, distinguiremos seus operadores de spin  $\mathbf{S}_1$  e  $\mathbf{S}_2$  pelos índices 1 e 2. No que se refere ao sistema composto (chamado geralmente de sítio  $i$ ) este não levará índice de sítio (a menos que especifiquemos o contrário), e sim aquele que identifique a componente cartesiana. Consideremos agora que cada

<sup>2</sup>Esta representação pode ser considerada como análoga à transformação Holstein-Primakov para uma fase com quebra de simetria rotacional do spin.

<sup>3</sup>Onde estamos usando a convenção  $\hbar = \mu_B = 1$  com  $\mu_B$  o magneton de Bohr e  $\hbar$  a constante de Planck.

<sup>4</sup>Poderíamos considerar dois spins ligados entre dois sítios diferentes. De fato, os operadores de enlace foram inicialmente introduzidos por Sachdev e Bhatt [16] para estudar sistemas dimerizados de spin-1/2 situados em sítios diferentes de uma rede. Porém, devido ao fato de que nosso estudo ao longo desta tese envolve sistemas onde duas partículas por sítio descrevem a física inicialmente, começamos com esta consideração.

operador do par tem spin-1/2, tal que sua Hamiltoniana é descrita por:

$$\mathcal{H} = JS_1 \cdot S_2, \quad (3.2)$$

onde  $J < 0$  no caso ferromagnético (FR) e  $J > 0$  quando temos o caso antiferromagnético (AF). Assim existem quatro estados,  $|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle$  e  $|\downarrow\uparrow\rangle$ , próprios da Hamiltoniana dada pela Eq. (3.2)<sup>5</sup> e onde,  $|\downarrow\uparrow\rangle$  denota o estado no qual a primeira partícula tem uma componente- $z$  de spin- $-1/2$  e a segunda partícula uma componente- $z$  de spin- $+1/2$ . Qualquer combinação destes estados terá a mesma energia. No entanto, se desejamos ter valores definidos do spin total  $S$  e suas componentes ao longo do eixo- $z$ ,  $S_z$ , deveríamos escolher quatro combinações apropriadas:

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

Tabela 3.1: Estados singleto e tripleto para um par de partículas situadas em um sítio de uma rede, cada partícula com spin-1/2.

Assim, estes estados podem ser combinados para formar, no espaço de Hilbert, o estado singleto  $|s\rangle$  ( $S = 0$ ) e os três estados excitados (considerando  $J > 0$ ) que formam os tripletos ( $S = 1$ )  $|t_x\rangle, |t_y\rangle$  e  $|t_z\rangle$ . Portanto, podemos definir operadores

<sup>5</sup>Do ponto de vista matemático, o problema do acoplamento de dois spins  $S_1$  e  $S_2$  corresponde à construção do espaço de Hilbert produto  $\mathcal{H}_{S_1} \otimes \mathcal{H}_{S_2}$  e sua decomposição em sub-espacos invariantes ante rotações.

de criação, que criam os estados singleto e tripleto a partir do vácuo  $|0\rangle$ , através de:

$$\begin{aligned}
 |s\rangle &= s^\dagger|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \\
 |t_x\rangle &= t_x^\dagger|0\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle), \\
 |t_y\rangle &= t_y^\dagger|0\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle), \\
 |t_z\rangle &= t_z^\dagger|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle),
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

onde as setas do lado esquerdo e direito no ket representam a componente- $z$  do operador de spin  $\mathbf{S}_1$  e  $\mathbf{S}_2$ , respectivamente. Se o gap entre a energia do estado singleto  $E_s = -\frac{3}{4}J$  e a energia do estado tripleto  $E_t = \frac{1}{4}J$  é pequeno comparado com os outros níveis de energia do sistema, a física a baixas temperaturas será determinada somente por estes quatro estados. Consequentemente, o sistema será bem descrito somente pelo grau de liberdade spin.

A condição de que o estado físico, no espaço de Hilbert, de cada par de spins é singleto ou um dos três estados tripletos leva a considerar que os operadores devem satisfazer a relação,

$$s^\dagger s + \sum_{\alpha} t_{\alpha}^\dagger t_{\alpha} = 1, \tag{3.4}$$

onde  $\alpha = x, y, z$ ;  $s^\dagger s$  conta quantos estados singleto temos e  $t_{\alpha}^\dagger t_{\alpha}$  conta quantos estados tripleto temos. Demonstraremos na seção seguinte que estes operadores representados em função dos estados singleto e tripleto satisfazem as mesmas regras de comutação especificadas na Eq. (3.1). O objetivo agora é demonstrar que se pode escrever os operadores de spin  $\mathbf{S}_1$  e  $\mathbf{S}_2$  em termos dos operadores  $s$ ,  $t_x$ ,  $t_y$  e  $t_z$ . Para isto vamos considerar a aplicação destes nos estados  $|s\rangle$ ,  $|t_x\rangle$ ,  $|t_y\rangle$  e  $|t_z\rangle$ .

Lembrando que:

$$\begin{aligned}
 S_x |\uparrow\rangle &= \frac{1}{2} |\downarrow\rangle, & S_x |\downarrow\rangle &= \frac{1}{2} |\uparrow\rangle, \\
 S_y |\uparrow\rangle &= \frac{i}{2} |\downarrow\rangle, & S_y |\downarrow\rangle &= \frac{-i}{2} |\uparrow\rangle, \\
 S_z |\uparrow\rangle &= \frac{1}{2} |\uparrow\rangle, & S_z |\downarrow\rangle &= \frac{-1}{2} |\downarrow\rangle.
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

Agora por razões didáticas consideramos somente a componente  $x$  de  $\mathbf{S}_1$ :  $S_{1x}$ , e o aplicaremos aos estados singlete  $|s\rangle$  e tripletos  $|t_x\rangle$ ,  $|t_y\rangle$  e  $|t_z\rangle$ .

- Para o estado singlete  $|s\rangle$ :

$$S_{1x}|s\rangle = S_{1x}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)\right] = -\frac{1}{2}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle)\right] = \frac{1}{2}|t_x\rangle, \tag{3.6}$$

então,

$$S_{1x}|s\rangle = S_{1x}s^\dagger |0\rangle = \frac{1}{2}|t_x\rangle. \tag{3.7}$$

Por outro lado:

$$\frac{1}{2}t_x^\dagger s s^\dagger |0\rangle = \frac{1}{2}|t_x\rangle, \tag{3.8}$$

logo:

$$S_{1x} \propto \frac{1}{2}t_x^\dagger s. \tag{3.9}$$

- Para o estado excitado  $|t_x\rangle$ :

$$S_{1x}|t_x\rangle = S_{1x}\left[-\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle)\right] = \frac{1}{2}|s\rangle, \tag{3.10}$$

então,

$$S_{1x}|t_x\rangle = S_{1x}t_x^\dagger |0\rangle = \frac{1}{2}|s\rangle. \tag{3.11}$$

Por outro lado:

$$\frac{1}{2}s^\dagger t_x t_x^\dagger |0\rangle = \frac{1}{2}|s\rangle, \tag{3.12}$$

logo:

$$S_{1x} \propto \frac{1}{2}s^\dagger t_x. \tag{3.13}$$

- Para o estado excitado  $|t_y\rangle$ :

$$S_{1x}|t_y\rangle = S_{1x}\left[\frac{i}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle)\right] = \frac{i}{2}|t_z\rangle, \quad (3.14)$$

então,

$$S_{1x}|t_y\rangle = S_{1x}t_y^\dagger |0\rangle = \frac{i}{2}|t_z\rangle. \quad (3.15)$$

Por outro lado:

$$\frac{i}{2}t_z^\dagger t_y t_y^\dagger |0\rangle = \frac{i}{2}|t_z\rangle, \quad (3.16)$$

logo:

$$S_{1x} \propto \frac{i}{2}t_z^\dagger t_y. \quad (3.17)$$

- Para o estado excitado  $|t_z\rangle$ :

$$S_{1x}|t_z\rangle = S_{1x}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)\right] = -\frac{i}{2}|t_y\rangle, \quad (3.18)$$

então,

$$S_{1x}|t_z\rangle = S_{1x}t_z^\dagger |0\rangle = -\frac{i}{2}|t_y\rangle. \quad (3.19)$$

Por outro lado:

$$-\frac{i}{2}t_y^\dagger t_z t_z^\dagger |0\rangle = -\frac{i}{2}|t_y\rangle, \quad (3.20)$$

logo:

$$S_{1x} \propto -\frac{i}{2}t_y^\dagger t_z. \quad (3.21)$$

Assim, considerando as Eqs. (3.9), (3.13), (3.17) e (3.21),  $S_{1x}$  pode ser escrito como:

$$S_{1x} = \frac{1}{2}(s^\dagger t_x + t_x^\dagger s - i(t_y^\dagger t_z - t_z^\dagger t_y)). \quad (3.22)$$

Lembrando que o tensor completamente anti-simétrico neste caso é dado por:

$$\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_\beta^\dagger t_\gamma = (\epsilon_{xyz}t_y^\dagger t_z + \epsilon_{xzy}t_z^\dagger t_y), \quad (3.23)$$

obtemos finalmente uma relação entre o operador de spin  $S_{1x}$  e os operadores singleto e tripleto:

$$S_{1x} = \frac{1}{2}(s^\dagger t_x + t_x^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_\beta^\dagger t_\gamma). \quad (3.24)$$

Da mesma forma, demonstra-se para as outras componentes  $S_{1y}$  e  $S_{1z}$  tendo assim a generalização,

$$S_{1,\alpha} = \frac{1}{2}(s^\dagger t_\alpha + t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_\beta^\dagger t_\gamma), \quad (3.25)$$

onde  $\alpha = x, y, z$ . Finalmente, usando o mesmo raciocínio para o operador de spin  $\mathbf{S}_2$  podemos mostrar que a ação dos operadores de spin  $\mathbf{S}_1$  e  $\mathbf{S}_2$  nos estados singleto e tripleto nos leva à representação:

$$\begin{aligned} S_{1,\alpha} &= \frac{1}{2}(s^\dagger t_\alpha + t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_\beta^\dagger t_\gamma), \\ S_{2,\alpha} &= \frac{1}{2}(-s^\dagger t_\alpha - t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_\beta^\dagger t_\gamma), \end{aligned} \quad (3.26)$$

onde  $\alpha, \beta, \gamma$  tomam os valores de  $x, y, z$  e  $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$  é o tensor totalmente anti-simétrico.

### 3.2.1 Relações de comutação entre os operadores de enlace para spin-1/2

Desde que as relações de comutação bosônicas ou anticomutação fermiônicas reproduzem de forma correta a álgebra dos operadores de spin  $\mathbf{S}_1$  e  $\mathbf{S}_2$ , poderíamos adotar qualquer uma das duas [119]. Porém, por uma questão de conveniência têm-se adotado as relações de comutação bosônicas, desde que considerar os operadores como fermiônicos não provê nenhum significado físico no sentido da aproximação Gaussiana que usaremos nesta tese<sup>6</sup>. Portanto, os operadores singleto e tripleto satisfazem as relações de comutação:

$$[s, s^\dagger] = 1, \quad [t_\alpha, t_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha,\beta}, \quad [s, t_\alpha^\dagger] = 0. \quad (3.27)$$

onde a última relação indica que os operadores  $s$  e  $t_\alpha$  comutam i.e., atuam em espaços diferentes. Por último, verificaremos se a álgebra de  $\mathbf{S}_1$  e  $\mathbf{S}_2$  é satisfeita.

---

<sup>6</sup>Veremos nos seguintes capítulos que o fato de considerar os operadores de enlace como bosônicos está de acordo no sentido da aproximação Gaussiana usada nesta tese, com a condensação Bose-Einstein dos estados singleto  $\langle s \rangle = \langle s^\dagger \rangle = \bar{s}$  e tripleto  $\langle t \rangle = \langle t^\dagger \rangle = \bar{t}$ .

Por exemplo vamos calcular a identidade  $[S_{1x}, S_{1y}] = iS_{1z}$ . Usando a representação de  $s$  e  $t_\alpha$ , temos:

$$\begin{aligned}
 [S_{1x}, S_{1y}] = & \frac{1}{4} \left( [s^\dagger t_x, s^\dagger t_y] + [s^\dagger t_x, t_y^\dagger s] + i[s^\dagger t_x, t_x^\dagger t_z] - i[s^\dagger t_x, t_z^\dagger t_x] \right. \\
 & + [t_x^\dagger s, s^\dagger t_y] + [t_x^\dagger s, t_y^\dagger s] + i[t_x^\dagger s, t_x^\dagger t_z] - i[t_x^\dagger s, t_z^\dagger t_x] \\
 & - i[t_y^\dagger t_z, s^\dagger t_y] - i[t_y^\dagger t_z, t_y^\dagger s] + [t_y^\dagger t_z, t_x^\dagger t_z] - [t_y^\dagger t_z, t_z^\dagger t_x] \\
 & \left. + i[t_z^\dagger t_y, s^\dagger t_y] + i[t_z^\dagger t_y, t_y^\dagger s] - [t_z^\dagger t_y, t_x^\dagger t_z] + [t_z^\dagger t_y, t_z^\dagger t_x] \right), \quad (3.28)
 \end{aligned}$$

usando a identidade:

$$[AB, CD] = -[C, A]BD - A[C, B]D - C[D, A]B - CA[D, B]$$

encontramos:

$$\begin{aligned}
 [S_{1x}, S_{1y}] &= \frac{1}{4} (-t_y^\dagger t_x + i s^\dagger t_z + t_x^\dagger t_y + i t_z^\dagger s + i s^\dagger t_z - t_y^\dagger t_x + i t_z^\dagger s + t_x^\dagger t_y) \\
 &= \frac{i}{2} (s^\dagger t_z + t_z^\dagger s - i(t_x^\dagger t_y - t_y^\dagger t_x)) = iS_{1z}. \quad (3.29)
 \end{aligned}$$

O mesmo raciocínio pode ser usado para mostrar:

$$\begin{aligned}
 [S_{1\alpha}, S_{1\beta}] &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{1\gamma}, & [S_{2\alpha}, S_{2\beta}] &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{2\gamma}, \\
 [S_{1\alpha}, S_{2\beta}] &= 0, & \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 &= -\frac{3}{4} s^\dagger s + \frac{1}{4} t_\alpha^\dagger t_\alpha, \\
 \mathbf{S}_1^2 &= \frac{3}{4}, & \mathbf{S}_2^2 &= \frac{3}{4}. \quad (3.30)
 \end{aligned}$$

Pode ser provado (e é fisicamente óbvio) que a condição  $\mathbf{S}_{1(2)}^2 = \frac{3}{4}$  é equivalente a exigir que cada sítio esteja ocupado por um único tipo de operador de spin  $\mathbf{S}_{1(2)}$ . Essas relações, dadas pela Eq. (3.30), são exatamente as propriedades esperadas no começo desta seção para os operadores de spin-1/2 do grupo  $SU(2)$ . Portanto, os operadores de spin que correspondem a sítios da rede de um sistema estudado podem ser agora expressos em termos dos novos operadores bosônicos singleto e tripleto.



### 3.3 Operadores de enlace para spin-1/2 na presença de um campo magnético

Vimos na seção (3.2) que os operadores de spin-1/2 representados em termos de operadores singleto e tripleto produzem estados singleto e tripleto atuando no vácuo  $|0\rangle$  com  $S_z = 0$  por sítio. Aqui o formalismo de operadores de enlace para spin-1/2 é desenvolvido quando um campo magnético transversal  $\mathbf{H}$  é aplicado ao par de operadores de spin  $\mathbf{S}_1$  e  $\mathbf{S}_2$ . Isto pode ser representado como,

$$\mathbf{H} \cdot (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2), \quad (3.31)$$

onde  $g\mu_B = 1$  e  $g$  é a razão giromagnética e  $\mu_B$  o magneton de Bohr como dissemos anteriormente. Neste caso os autoestados propostos, apresentados na Eq. (3.3) não são os autoestados apropriados de um campo magnético externo na direção- $z$ , portanto estes são transformados para operadores transversais,  $u^\dagger$  e  $d^\dagger$ , com respeito à direção do campo magnético. Estes operadores vêm dados por [120],

$$\begin{aligned} u^\dagger &= \frac{-1}{\sqrt{2}}(t_x^\dagger + it_y^\dagger), & u &= \frac{-1}{\sqrt{2}}(t_x - it_y), \\ d^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(t_x^\dagger - it_y^\dagger), & d &= \frac{1}{\sqrt{2}}(t_x + it_y), \end{aligned} \quad (3.32)$$

e criam os estados tripletos  $|\uparrow\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\downarrow\rangle$  como,

$$\begin{aligned} u^\dagger|0\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}}(t_x^\dagger + it_y^\dagger)|0\rangle, \\ d^\dagger|0\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(t_x^\dagger - it_y^\dagger)|0\rangle. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Em termos desses operadores podemos imaginar que cada sítio está ocupado por uma das quase-partículas criadas pelos operadores de enlace  $s^\dagger$ ,  $u^\dagger$ ,  $d^\dagger$  e  $t_z^\dagger$ , ou equivalentemente, cada sítio está em um dos quatro estados  $|s\rangle$ ,  $|u\rangle$ ,  $|d\rangle$  e  $|t_z\rangle$  criados

do vácuo  $|0\rangle$  como,

$$\begin{aligned}
 |s\rangle &= s^\dagger|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \\
 |u\rangle &= u^\dagger|0\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \\
 |d\rangle &= d^\dagger|0\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle, \\
 |t_z\rangle &= t_z^\dagger|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle).
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

Esta transformação conserva a condição de único estado possível mediante  $s^\dagger s + u^\dagger u + d^\dagger d + t_z^\dagger t_z = 1$ . O mesmo ocorre se pensássemos como quase-partículas criadas em cada sítio, nesse caso esta condição proíbe a criação de mais de uma quase-partícula por sítio. Em termos destes operadores  $s$ ,  $u$ ,  $d$  e  $t_z$ , os operadores de spin  $\mathbf{S}_1$  e  $\mathbf{S}_2$  podem ser expressos como,

$$\begin{aligned}
 S_{1,2}^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\pm s^\dagger d \mp u^\dagger s + t_z^\dagger d + u^\dagger t_z), \\
 S_{1,2}^- &= (S_{1,2}^+)^\dagger, \\
 S_{1,2}^z &= \frac{1}{2}(\pm s^\dagger t_z \pm t_z^\dagger s - d^\dagger d + u^\dagger u).
 \end{aligned} \tag{3.35}$$

Verificamos também as relações,

$$\begin{aligned}
 t_x^\dagger t_x + t_y^\dagger t_y &= u^\dagger u + d^\dagger d, \\
 t_x^\dagger t_x^\dagger + t_y^\dagger t_y^\dagger &= u^\dagger d^\dagger + d^\dagger u^\dagger,
 \end{aligned} \tag{3.36}$$

i.e., termos diagonais transformaram-se em outros termos diagonais e termos não diagonais transformaram-se em termos mistos. Estas relações serão úteis quando utilizarmos os operadores de enlace para spin-1/2 e spin-1 em sistemas com campo magnético aplicado na direção- $z$  (veja capítulos 4 e 6). Também nesta nova base  $(u,d)$  o campo magnético tem uma representação diagonal dada por,

$$\mathbf{H} \cdot (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2) = iH(t_y^\dagger t_x - t_x^\dagger t_y) = H(u^\dagger u - d^\dagger d), \tag{3.37}$$

com  $H = |\mathbf{H}|$ , e assegurando que os operadores  $u^\dagger$ ,  $d^\dagger$  e  $t_z$  reproduzem os níveis de energia dos autoestados do campo magnético,  $S_z = 0, \pm 1$ .

### 3.4 Operadores de enlace para spin-1

Como vimos na seção 3.2.1, a álgebra dos spins-1/2 pode ser satisfeita usando os operadores de spin  $s$  e  $t_\alpha$  satisfazendo as relações de comutação dadas pela Eq. (3.30). Agora, considerando a Hamiltoniana dada pela Eq. (3.2), a energia do par formado pelo operadores de spin  $\mathbf{S}_1$  e  $\mathbf{S}_2$  é dada por,

$$-\frac{3}{4}Js^\dagger s + \frac{1}{4}Jt_\alpha^\dagger t_\alpha. \quad (3.38)$$

Vemos que quando  $J \rightarrow -\infty$ , com  $J < 0$  ou seja, no caso ferromagnético, a energia do singlete vai para o infinito. Portanto, o estado singlete pode ser excluído e obtemos uma representação para um spin-1 [121] que definimos como  $\mathbf{S}$ :  $S_\alpha = -i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_\beta^\dagger t_\gamma$ , e temos,

$$S_x = -i(t_y^\dagger t_z - t_z^\dagger t_y), \quad (3.39)$$

$$S_y = -i(t_z^\dagger t_x - t_x^\dagger t_z), \quad (3.40)$$

$$S_z = -i(t_x^\dagger t_y - t_y^\dagger t_x), \quad (3.41)$$

onde a condição de único estado possível vem dada pela condição  $t_x^\dagger t_x + t_y^\dagger t_y + t_z^\dagger t_z = 1$  desde que excluimos o número de estados singlete na Eq. (3.4). Neste caso podemos verificar as relações de comutação,

$$\begin{aligned} [S_\alpha, S_\beta] &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}S_\gamma, \\ S^2 &= 2. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Portanto, o spin-1  $\mathbf{S}$  pode ser representado por três bósons  $t_\alpha$  com  $\alpha = x, y, z$ , onde  $t_z^\dagger|0\rangle$  corresponde ao autoestado  $S_z = 0$ ,  $t_x^\dagger|0\rangle$  e  $t_y^\dagger|0\rangle$  aos autoestados  $S_z = \pm 1$  com valor médio  $\langle S_z \rangle = 0$ , próprio de um estado fundamental desordenado. Considerando a relação  $S^\pm = S_x \pm iS_y$  nas Eqs. (3.39) e (3.40) temos,

$$S^+ = t_z^\dagger(t_x + it_y) - (t_x^\dagger + it_y^\dagger)t_z, \quad (3.43)$$

$$S^- = t_z^\dagger(-t_x + it_y) + (t_x^\dagger - it_y^\dagger)t_z. \quad (3.44)$$

Agora transformamos os operadores tripletos  $t_x$  e  $t_y$  para operadores transversais  $(u,d)$  [122, 123] dados pela Eq. (3.32). O estado  $t_z^\dagger|0\rangle = (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$  em função desta representação vem dado por:

$$S_z = u^\dagger u - d^\dagger d. \quad (3.45)$$

Substituindo a Eq. (3.32) nas Eqs. (3.43) e (3.44) a representação em operadores de enlace de um spin-1 vem dada por,

$$\begin{aligned} S^+ &= \sqrt{2}(u^\dagger t_z + t_z^\dagger d), \\ S^- &= \sqrt{2}(t_z^\dagger u + d^\dagger t_z), \\ S_z &= u^\dagger u - d^\dagger d. \end{aligned} \quad (3.46)$$

onde agora a condição de único estado possível vem dada por:  $u^\dagger u + d^\dagger d + t_z^\dagger t_z = 1$ . Veja que esta representação de spin-1 dada pela Eq. (3.46) poderia ter sido obtida da representação para spin-1/2 com campo magnético aplicado na direção- $z$ , dada pela Eq. (3.35). Isto é possível excluindo simplesmente o operador singleto  $s^\dagger$ , desde que como definimos no começo desta seção, o fato de considerar um spin-1 por sítio significa fazer o par de spins-1/2 fortemente ligado por uma energia  $J$ . Esta nova representação para um operador de spin-1 vai ser usada no capítulo 6 para estudar a condensação Bose-Einstein de magnons induzida por um campo magnético aplicado na direção- $z$ .

Em conclusão, vimos neste capítulo uma nova representação para operadores de spin tanto no caso de spin-1/2 como spin-1. Nos próximos capítulos usaremos esta representação no estudo de diversos sistemas que apresentam uma transição de fase quântica, como os isolantes de Kondo e a condensação Bose-Einstein de magnons induzida por um campo magnético externo aplicado na direção- $z$ .

# Capítulo 4

## Efeitos de anisotropia e campo magnético em redes de Kondo

### 4.1 Introdução

Neste capítulo discutiremos o *modelo colar de Kondo* para compreender a fenomenologia básica de um tipo de férmions pesados chamado de isolantes de Kondo, do qual começamos a falar no capítulo 2. Mostraremos também os efeitos de um parâmetro de anisotropia tipo Ising e de um campo magnético aplicado na direção- $z$  neste modelo. Embora nos restringiremos a estudar modelos com caráter “isolante”, os nossos resultados descrevem também os graus de liberdade magnéticos dos metais férmions pesados, próximos de uma transição de fase quântica magnética.

Estes estudos começaram nas décadas do 50 e 60, e foram realizados em sistemas de impurezas em matrizes metálicas que levaram a identificar as idéias básicas aplicadas a compostos contendo  $Ce$ ,  $Y$  e  $La$ . As questões fundamentais basearam-se nos mecanismos necessários para a formação de momentos magnéticos localizados estáveis nas impurezas, com uma descrição do íon magnético tomada dos compostos isolantes, e considerando seu efeito sobre os elétrons de condução [124].

## 4.2 Isolantes de Kondo

Nesta seção estudaremos uma nova família de férmions pesados descoberta há poucos anos atrás e que se caracteriza por apresentar um comportamento tipo semicondutor [84]. Estes sistemas, apesar de serem isolantes a temperatura nula, têm diversas propriedades físicas em comum com os férmions pesados metálicos que abordamos no capítulo 2. Por exemplo, a susceptibilidade magnética a altas temperaturas tem um comportamento tipo Curie-Weiss mas, à medida que o sistema é resfriado ela tende para um valor constante, podendo até tornar-se nula. Temos, portanto, novamente o *crossover* característico dos férmions pesados de uma situação magnética a altas temperaturas para uma não magnética a temperaturas baixas.

Fisicamente, os íons  $f$  da terra rara, responsáveis pelo comportamento dependente da temperatura da susceptibilidade, são blindados pelos elétrons tipo  $s$  da banda de condução formando com estes um estado singleto não magnético, tipo Kondo, a baixas temperaturas. Entretanto, contrario do que ocorre no caso dos férmions pesados metálicos, os elétrons da banda de condução em isolantes de Kondo ficam aparentemente localizados nos sítios das terras raras ao formarem o par singleto, dando origem a um estado isolante. Para que isto possa acontecer é necessário dois elétrons por célula unitária: um elétron  $f$  e um elétron de condução. A temperaturas altas,  $k_B T \gg \Delta$  onde  $\Delta$  é o gap extraído, por exemplo, do comportamento exponencial da resistividade a baixas temperaturas, pode-se determinar uma região onde o calor específico eletrônico  $\gamma$  tem um comportamento aproximadamente linear, o que permite definir uma massa térmica ( $m_T \propto \gamma$ ). O fato de que o valor desta massa seja consideravelmente aumentado e o comportamento da susceptibilidade magnética, descrito acima, com sua física subjacente, justificam incluir estes sistemas na categoria dos férmions pesados, apesar de seu estado fundamental isolante.

Em relação aos compostos que estão dentro deste grupo de isolantes de Kondo incluem-se,  $Ce_3Bi_4Pt_3$  ( $\Delta = 3.6\text{meV}$ ),  $SmB_6$  ( $\Delta = 2.3\text{meV}$ ),  $CeNiSn$  ( $\Delta = 0.3\text{meV}$ ),  $YbB_{12}$  ( $\Delta = 5.3\text{meV}$ ), onde meV significa milielétron volts. Além desses, Aeppli e Fisk [69] chamaram a atenção para o sistema metal de transição  $FeSi$ , que possui propriedades físicas muito semelhantes às deste tipo de férmion pesado. Este composto é um semicondutor de estrutura cúbica e apresenta a susceptibilidade magnética e a resistividade tendendo a zero exponencialmente com a temperatura. De fato, este composto tem todas as propriedades físicas que caracterizam os isolantes de Kondo, apresentando a vantagem de não ter as complicações devidas ao campo cristalino presente nos sistemas de terras raras (por exemplo no  $Ce_3Bi_4Pt_3$  a susceptibilidade decresce com a temperatura, mas satura em um valor finito devido a uma contribuição de Van Vleck [69]).

Diversos modelos têm sido propostos a fim de explicar a física apresentada por estes compostos a baixas temperaturas, embora nenhum deles se mostre completamente satisfatório. À continuação descreveremos brevemente os modelos mais usados para estudar os isolantes de Kondo; eles são o modelo de Anderson e o modelo da rede de Kondo. Devemos ressaltar também, que o modelo de duas bandas foi usado para descrever a transição metal-isolante em isolantes de Kondo [125, 126, 127, 128]. Deixaremos para a próxima seção 4.3 o modelo colar de Kondo que basicamente pode ser obtido do modelo da rede de Kondo quando desprezamos o grau de liberdade de carga dos elétrons de condução.

### 4.2.1 O modelo de Anderson

Como isolantes de Kondo são sistemas eletrônicos fortemente correlacionados, os modelos propostos usam Hamiltonianas que são utilizadas no estudo dos férmions pesados intermetálicos, sendo uma delas a Hamiltoniana do modelo de Anderson [129]. Este modelo, considerado no estudo de isolantes de Kondo [85], descreve uma coleção

de estados  $f$  fortemente correlacionados, criados nos sítios de uma rede cristalina e hibridizados com uma banda de condução. A Hamiltoniana é dada por,

$$\mathcal{H}_A = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij}^s c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + E_f \sum_{i,\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma}^f n_{i-\sigma}^f + V \sum_{i,\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}), \quad (4.1)$$

onde  $t_{i,j}^s$  representa a *probabilidade* de um elétron na banda de condução *pular* do sítio  $i$  para  $j$ . Os operadores  $c_{i\sigma}^\dagger, c_{i\sigma}$  criam e destroem elétrons na banda de condução,  $f_{i\sigma}^\dagger, f_{i\sigma}$  são operadores de criação e destruição dos elétrons nos níveis  $f$  localizados na terra rara,  $V$  é o termo de hibridização entre a banda de condução e o orbital do íon<sup>1</sup>,  $E_f$  a energia dos estados  $f$  e  $n_{i\sigma}^f = f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}$  o operador número dos elétrons localizados. As correlações Coulombianas de intensidade  $U$ , entre elétrons  $f$  de spins opostos no mesmo sítio, tornam a Hamiltoniana da Eq. (4.1) um problema de muitos corpos, extremamente complicado e para tratá-lo algumas aproximações devem ser introduzidas. Entre elas está o método de *bósons escravos* que foi aplicado aos isolantes de Kondo por Riseborough [85] e Sanchez-Castro *et al.* [130]. No entanto, apesar de incorporar de forma bem simples aspectos de correlações fortes, este método tem a desvantagem de produzir uma transição de fase espúria, a uma dada temperatura, de uma fase isolante para uma fase metálica em que o gap de excitação das quase-partículas se anula [131].

### 4.2.2 O modelo da rede de Kondo

Este modelo emerge do Modelo Periódico de Anderson (PAM, do inglês “Periodic Anderson Model”) dado pela Hamiltoniana da Eq. (4.1), fazendo  $U \rightarrow \infty$  e expandindo  $V$  até segunda ordem via a transformação Schrieffer-Wolff, que elimina as flutuações de carga dos momentos  $f$  [132]. Assim, o regime de baixas energias do

---

<sup>1</sup>Embora  $\mathcal{H}_A$  tenha sido descrita para tratar impurezas  $d$ , podemos considerar que a impureza tem um único orbital  $f$ , não levando em conta a degenerescência do orbital. Anderson tratou o caso de dois níveis  $d$  degenerados onde se leva em conta um termo de troca entre os orbitais. O resultado mostra que o termo de troca favorece a aparição de um momento local [129].



modelo periódico de Anderson é bem descrito pelo modelo da rede de Kondo [133],

$$\mathcal{H}_{KLM} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c.) + J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot c_{i,\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} c_{i,\beta}, \quad (4.2)$$

onde os elétrons  $f$  são reduzidos aos momentos localizados  $\mathbf{S}_i$ . O primeiro termo representa a banda de condução ( $c_{i,\sigma}^\dagger$  é o operador de criação de um elétron de condução,  $t$  é o hopping entre primeiros vizinhos). A hibridização do PAM é substituída pelo segundo termo, que é a interação entre os elétrons de condução e os momentos localizados  $\mathbf{S}_i$  via a interação intra-sítio  $J$ , e  $\sigma$  são matrizes de Pauli. Este modelo foi usado para estudar isolantes de Kondo, ( $J > 0$ ) [69, 134], e manganitas, ( $J < 0$ ) [135]. Convém ressaltar que, embora o grau de liberdade de carga dos elétrons nos níveis  $f$  localizados tenha sido excluído, este modelo contém ainda o grau de liberdade de carga dos elétrons de condução contido no primeiro termo da Hamiltoniana dada pela Eq. (4.2).

Basicamente, este modelo (que chamaremos em diante KLM, do inglês “Kondo Lattice Model”) contém duas escalas de energia: a interação RKKY e a blindagem Kondo. A primeira tende a estabelecer um estado magnético, em geral antiferromagnético de longo alcance<sup>2</sup>, e a última um estado líquido de spin sem ordenamento magnético.

Este modelo foi estudado em uma dimensão [136], e uma fase desordenada, tipo líquido de spin<sup>3</sup>, é estabelecida para qualquer valor da razão  $J/t$ , produzindo um gap de energia finito nas excitações de carga e de spin (sendo o gap de spin sempre menor que o gap de carga<sup>4</sup> [137]). No entanto, estas peculiaridades do modelo unidimensional tornam-se de pouca relevância para entender sistemas reais

<sup>2</sup>Um estado ordenado de longo alcance é aquele no qual spins infinitamente distantes permanecem correlacionados.

<sup>3</sup>O estado ordenado AF desaparece devido ao fato de que, em uma dimensão, as flutuações quânticas aumentam muito, e as correlações magnéticas decaem exponencialmente com a distância entre spins.

<sup>4</sup>Dessa maneira, as propriedades no regime de baixas energias do KLM serão bem descritas por excitações de spin ao invés de carga. Esse foi o raciocínio de Doniach para postular o modelo colar de Kondo que veremos na seguinte seção 4.3.

que estamos interessados em estudar.

Em duas e três dimensões, diversas aproximações [111, 137, 138, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 145, 146] sugerem que a fase desordenada, tipo líquido de spin, deve mudar a baixas temperaturas, para um estado ordenado de longo alcance, i.e., para valores de  $J/t$  menores que um valor crítico  $(J/t)_c$ .

Existem muitas dificuldades em estudar o modelo da rede de Kondo próximo de uma instabilidade magnética em dimensões  $d \geq 2$  e temperaturas finitas, por este motivo diversas aproximações foram implementadas. No que resta do capítulo estudaremos um modelo simplificado do KLM, o chamado modelo colar de Kondo, quando um parâmetro de anisotropia tipo Ising e um campo magnético, aplicado na direção- $z$ , são introduzidos separadamente em sua Hamiltoniana. Utilizaremos uma aproximação Gaussiana, dependente da dimensão, com a representação dos spins através dos operadores de enlace introduzidos no capítulo 3.

### 4.3 O modelo colar de Kondo

Em 1977, Doniach propôs um modelo para a Hamiltoniana da rede de Kondo unidimensional visando estudar a competição entre a blindagem Kondo e a interação RKKY, a que chamou de Modelo Colar de Kondo (KNM, do inglês “Kondo Necklace model”) [35]. Nesse modelo, a banda de elétrons de condução é substituída por uma cadeia de spins acoplados  $XY$  e o grau de liberdade de carga dos elétrons de condução é omitido, assumindo que não é essencial para o processo desta competição. Isto permite que as propriedades críticas sejam somente descritas por excitações de spin. O modelo é como segue:

$$\mathcal{H}_{KNM} = t \sum_{\langle i,j \rangle} (\tau_i^x \tau_j^x + \tau_i^y \tau_j^y) + J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \tau_i, \quad (4.3)$$

onde  $\tau$  e  $S$  são operadores de spin-1/2, atuando no sítio  $i$ , do elétron de condução e do

momento localizado, respectivamente,  $t$  são acoplamentos entre spins  $\tau$  de primeiros vizinhos e  $\langle ij \rangle$  representa a soma entre os vizinhos mais próximos. O primeiro termo reproduz elétrons propagando-se em uma rede. No caso unidimensional deve ser substituído, depois de uma transformação Jordan-Wigner, por uma banda de férmions sem spins [147]. O segundo termo é a interação magnética entre o spin dos elétrons de condução  $\tau_i$  e o momento localizado  $S_i$ , via interação spin-spin AF,  $J > 0$ . A Fig. (4.1) mostra um arranjo esquemático de um colar de Kondo para quatro sítios em uma banda semi-cheia.

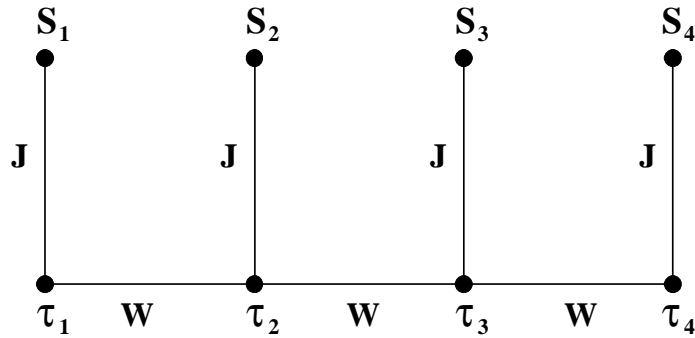


Figura 4.1: Cadeia colar de Kondo para quatro sítios,  $\tau$  e  $S$  denotam os operadores de spin do elétron de condução e do momento localizado, respectivamente.  $J$  é o parâmetro de troca AF, ( $J > 0$ ), e  $W$  é a largura da banda de condução. Note que, como o KNM é definido com dois spins em cada sítio, a menor representação da célula do sistema está descrita por quatro estados, que como vimos no capítulo 3 são o estado singleto e os três estados tripletos. Figura reproduzida da referência [148].

À primeira vista poderíamos dizer que o KLM e o KNM basicamente se diferenciam pois o primeiro modelo serve para descrever sistemas *isotrópicos* tipo Heisenberg, e o segundo descreve sistemas tipo-XY. No entanto, a principal diferença está no fato de que o primeiro considera graus de liberdade de spin e de carga (do elétron

de condução), enquanto que o segundo é formulado somente em termos de operadores de spin. Isto exclui os comportamentos eletrônicos anômalos, presentes na física Kondo próximo de uma instabilidade magnética, desde que excitações elétron-buraco desaparecem quando o grau de liberdade de carga do elétron de condução é deixado de lado. A justificativa de excluir graus de liberdade de carga está no fato de que eles são irrelevantes na física Kondo de baixas energias [149, 150].

Note também que o KNM incorpora um único aspecto do KLM: a competição entre a blindagem Kondo e a interação RKKY, que em uma banda semi-cheia gera um estado fundamental isolante. Assim, teoricamente parece haver consenso em estudar esta competição usando somente graus de liberdade de spin [151, 152]. Isto é evidente experimentalmente pelo fato que pequenas pressões, i.e., pequenas mudanças nos parâmetros  $J$  e  $t$ , podem induzir ou destruir um estado fundamental magnético nesses sistemas [13]. Portanto, esperaríamos que as propriedades físicas básicas do modelo rede de Kondo, em uma banda semi-cheia, sejam conservadas e a análise dos sistemas isolantes de Kondo com o modelo colar de Kondo seria apropriada [153].

Além do mais, estudos parecem sugerir que o KLM e KNM pertencem ao mesmo tipo de universalidade em uma dimensão [154]. Outra justificativa é que, em geral, os férmions pesados estão próximos de uma instabilidade magnética e uma abordagem desta questão em termos de um modelo que considera somente flutuações de spin é adequada<sup>5</sup> [68]. Por exemplo, no trabalho de Rappoport e Continentino [155], obteve-se o diagrama de fases ( $T/W$ ) versus ( $J/W$ ) do modelo colar de Kondo em três dimensões pelo método grupo de renormalização de campo médio. A Fig. (4.2) apresenta este diagrama de fases e está em excelente concordância com resultados experimentais em compostos de  $Ce$ , como é mostrado na Fig. (4.3).

---

<sup>5</sup>Isto não é o caso para todos os férmions pesados, mas é verdade também que a classe de universalidade das transições quânticas dos férmions pesados ainda não tem sido totalmente determinadas, e devem ainda não ser únicas.

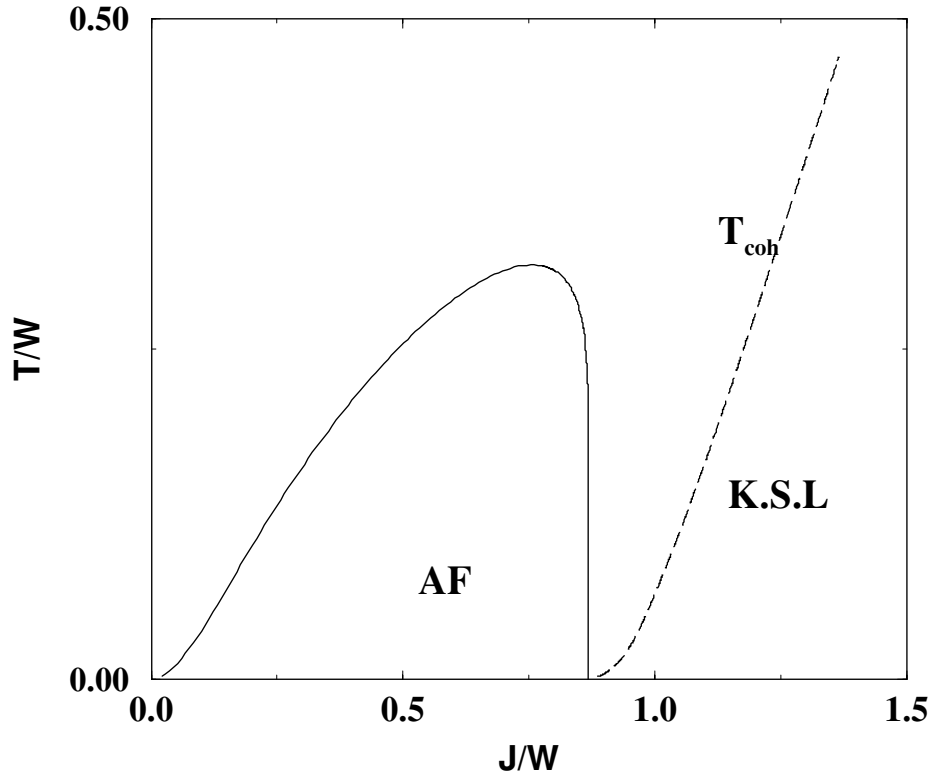


Figura 4.2: Diagrama de fases temperatura como  $T/W$  versus a razão  $J/W$  do modelo colar de Kondo em três dimensões obtido pelo método grupo de renormalização de campo médio. A linha tracejada representa a temperatura de coerência ( $T_{coh}$ ), AF a fase antiferromagnética e KSL o regime Líquido de Spin Kondo (KSL, do inglês “Kondo Spin Liquid”). Figura reproduzida da referência [155].

Em uma dimensão o modelo colar de Kondo foi extensivamente estudado por uma variedade de métodos: campo médio variacional [35], campo médio com operadores de enlace [110, 113], simulação Monte-Carlo quântico [154], expansão em séries de  $J/t$  [92, 157], técnica grupo de renormalização no espaço real [158, 159, 160, 161, 162], diagonalização numérica exata [163], cálculos em grupo de renormalização no espaço real matriz densidade [164, 165], bosonização [151, 166] e diagonalização exata [167, 168]. As propriedades de seu estado fundamental também têm sido estudadas por uma variedade de métodos [110, 113, 151, 154, 157, 158, 164, 165, 166,

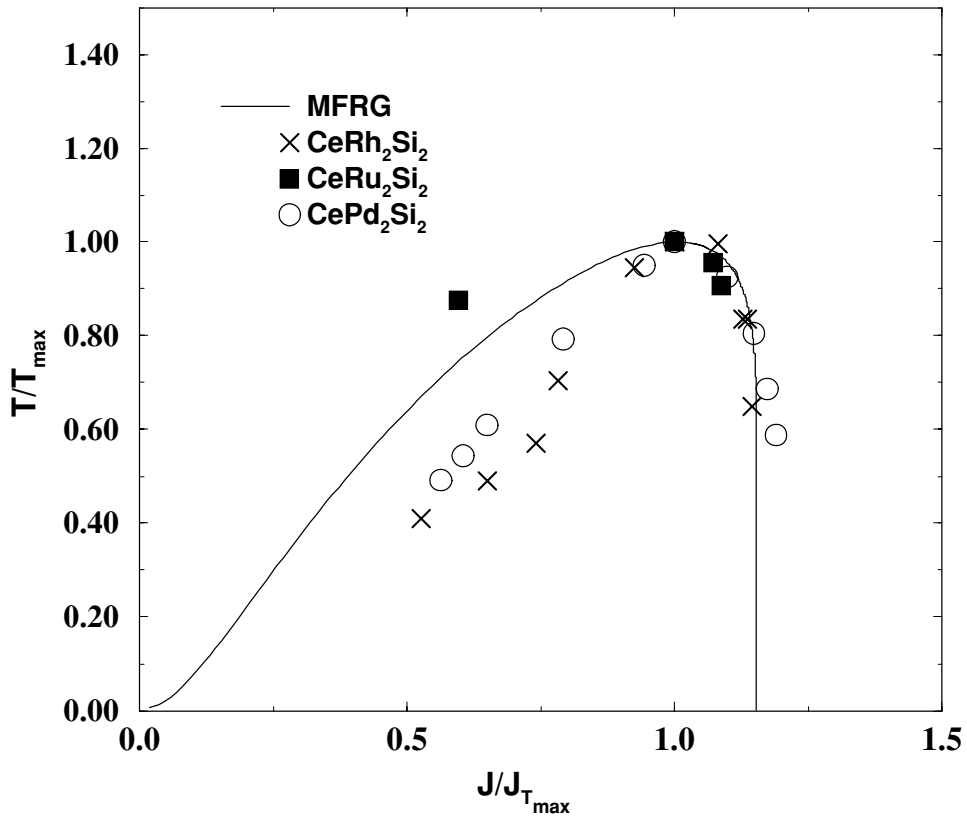


Figura 4.3: Diagrama de fases do modelo colar de Kondo em três dimensões da referência [155] comparado com resultados experimentais para compostos de *Ce* [156]. Figura reproduzida da referência [155].

169]. No entanto, em dimensões maiores ( $d > 1$ ), a termodinâmica e as propriedades críticas a temperatura finita deste modelo, próximo de uma instabilidade magnética, permanecem em aberto [170]. Esta é a motivação para o estudo a ser apresentado nas seções, 4.4 e 4.5, onde a influência de um parâmetro de anisotropia tipo Ising e de um campo magnético na direção- $z$  é investigada, em dimensões  $d \geq 2$  e temperatura finita.

## 4.4 Comportamento termodinâmico crítico quântico do modelo colar de Kondo anisotrópico

### 4.4.1 A Hamiltoniana

Consideramos o modelo colar de Kondo com um parâmetro de anisotropia tipo Ising inter-sítio,  $\varsigma$ , tal que  $0 \leq \varsigma \leq 1$ . O caso  $\varsigma = 1$  é apropriado para descrever compostos nos quais a fase ordenada tem uma componente Ising relevante, e também para estudar o efeito deste parâmetro de anisotropia nas propriedades termodinâmicas próximo de uma transição de fase quântica. Veremos, no seguinte capítulo 5, que o fato de introduzir um parâmetro de anisotropia geométrica no modelo colar de Kondo permite obter uma linha de transição [115], reafirmando a idéia de que a anisotropia é um parâmetro inerente aos férmions pesados. Chamaremos este modelo de AKNM. Ele foi anteriormente estudado usando a teoria de grupo de renormalização mas somente em uma dimensão e temperatura nula [171].

Usamos a representação de spins em operadores de enlace introduzida no capítulo 3, que foi aplicada previamente no KLM [111] e no KNM [110] mas sempre considerando  $(T, \varsigma) = (0, 0)$ . Encontramos que o método permite calcular o expoente de deslocamento que caracteriza a forma da linha crítica de Néel próxima do QCP, assim como o calor específico como lei de potência da temperatura ao longo da *linha crítica quântica* ( $J/t = (J/t)_c$ ,  $T \rightarrow 0$ ). Consideramos a seguinte Hamiltoniana,

$$\mathcal{H}_{AKNM} = t \sum_{\langle i,j \rangle} (\tau_i^x \tau_j^x + (1 - \varsigma) \tau_i^y \tau_j^y) + J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_i, \quad (4.4)$$

onde  $t$  é o acoplamento entre os operadores de spins dos elétrons de condução,  $\tau_i$  e  $S_i$  são operadores de spin-1/2 atuando no sítio  $i$ , e a notação  $\langle ij \rangle$  representa a soma entre os vizinhos mais próximos. O primeiro termo reproduz processos de

propagação dos elétrons de condução. O segundo termo é a interação magnética entre o spin do elétron de condução e o momento localizado, via interação AF,  $J > 0$ . O parâmetro de anisotropia tipo Ising,  $\varsigma$ , varia desde o caso totalmente isotrópico  $\varsigma = 0$  até o caso completamente anisotrópico  $\varsigma = 1$ .

Considerando a representação em operadores de enlace, no limite de acoplamento forte, i.e.  $J/t \rightarrow \infty$ , o estado fundamental é composto de pares de spin  $(\tau, S)$  chamados de singletos. O espaço de Hilbert deste par de spins consiste de quatro estados. Estes podem ser representados em termos de um estado singlete  $|s\rangle$  e três estados tripleto  $|t_x\rangle$ ,  $|t_y\rangle$  e  $|t_z\rangle$ , que são criados do vácuo pelos operadores criação singlete e triplete:  $|s\rangle = s^\dagger |0\rangle$ ,  $|t_\alpha\rangle = t_\alpha^\dagger |0\rangle$ , ( $\alpha = x, y, z$ ).

Em termos destes operadores, os operadores de spin-1/2 do elétron de condução e do momento localizado são, respectivamente,

$$\begin{aligned}\tau_{i,\alpha} &= \frac{1}{2}(-s_i^\dagger t_{i,\alpha} - t_{i,\alpha}^\dagger s_i - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_{i,\beta}^\dagger t_{i,\gamma}), \\ S_{i,\alpha} &= \frac{1}{2}(s_i^\dagger t_{i,\alpha} + t_{i,\alpha}^\dagger s_i - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_{i,\beta}^\dagger t_{i,\gamma}),\end{aligned}\quad (4.5)$$

onde  $\alpha, \beta$  e  $\gamma$  representam componentes ao longo dos eixos  $x, y$  e  $z$ , respectivamente, e  $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$  o tensor antisimétrico de Levi-Civita, como definimos no capítulo 3.

Substituindo a nova representação de operadores de spin para os momentos localizados e os elétrons de condução, dada pela Eq. (4.5) na Hamiltoniana Eq. (4.4) encontramos:

$$\mathcal{H}_{AKNM} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_3 + \mathcal{H}_4$$



$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_0 &= \frac{J}{4} \sum_i (-3s_i^\dagger s_i + \sum_\alpha t_{i,\alpha}^\dagger t_{i,\alpha}), \\
 \mathcal{H}_1 &= \sum_i \mu_i (s_i^\dagger s_i + \sum_\alpha t_{i,\alpha}^\dagger t_{i,\alpha} - 1), \\
 \mathcal{H}_2 &= \frac{t}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \left[ s_i^\dagger s_j^\dagger (t_{i,x} t_{j,x} + (1-\varsigma) t_{i,y} t_{j,y}) + h.c. \right] \\
 &\quad + \frac{t}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \left[ s_i^\dagger s_j \left( t_{i,x} t_{j,x}^\dagger + (1-\varsigma) t_{i,y} t_{j,y}^\dagger \right) + h.c. \right], \\
 \mathcal{H}_3 &= -\frac{t}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \left[ t_{i,z}^\dagger t_{j,z}^\dagger ((1-\varsigma) t_{i,x} t_{j,x} + t_{i,y} t_{j,y}) + h.c. \right] \\
 &\quad + \frac{t}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \left[ t_{i,z}^\dagger t_{j,z} \left( (1-\varsigma) t_{i,x} t_{j,x}^\dagger + t_{i,y} t_{j,y}^\dagger \right) + h.c. \right], \\
 \mathcal{H}_4 &= \frac{it}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \left[ \left( s_i^\dagger t_{i,x} + h.c. \right) \left( t_{j,y}^\dagger t_{j,z} - h.c. \right) - (1-\varsigma) \left( s_i^\dagger t_{i,y} + h.c. \right) \left( t_{j,x}^\dagger t_{j,z} - h.c. \right) \right] \\
 &\quad + \frac{it}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \left[ \left( s_j^\dagger t_{j,x} + h.c. \right) \left( t_{i,y}^\dagger t_{i,z} - h.c. \right) - (1-\varsigma) \left( s_j^\dagger t_{j,y} + h.c. \right) \left( t_{i,x}^\dagger t_{i,z} - h.c. \right) \right],
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

onde  $\mathcal{H}_0$  representa a interação entre os operadores de spin  $S$  e  $\tau$  no sítio  $i$ , e  $\mathcal{H}_1$  introduz a condição de único estado físico possível<sup>6</sup>,  $s_i^\dagger s_i + \sum_\alpha t_{i,\alpha}^\dagger t_{i,\alpha} = 1$ . O potencial químico  $\mu_i$ , dependente do sítio, foi introduzido para impor esta restrição local.  $\mathcal{H}_2$ ,  $\mathcal{H}_3$  e  $\mathcal{H}_4$  são os termos introduzidos pelo hopping  $t$ .

Devido à simetria de translação do sistema, fazemos o valor médio do operador singleto  $\langle s_i^\dagger \rangle = \langle s_i \rangle = \bar{s}$ . Isto corresponde a uma condensação Bose-Einstein do estado singleto local Kondo em cada sítio, no limite de acoplamento forte  $J/t \rightarrow \infty$ . Neste limite, o modelo torna-se trivial desde que cada operador de spin  $S$  captura o operador de spin de um elétron de condução  $\tau$  para formar um singleto<sup>7</sup>. Neste caso,

<sup>6</sup>Se pensássemos em partículas, seria a condição de ocupação única de uma quase-partícula em cada sítio.

<sup>7</sup>Tornando assim a densidade de tripletos *baixa*, permitindo desprezar as interações tripleto-tripletto, dada por  $\mathcal{H}_3$ , na Eq. (4.6).

o estado fundamental corresponde a um produto direto de singletos. Além do mais, a simetria translacional do problema implica que devemos assumir  $\mu_i = \mu$ . Portanto, com estas considerações a Hamiltoniana dada pela Eq. (4.6) levando em conta só um elétron de condução por sítio pode ser simplificada e obtemos uma Hamiltoniana efetiva,  $\mathcal{H}_{mf}$ . Esta Hamiltoniana, expressa somente em operadores quadráticos será suficiente para descrever a transição de fase quântica desde a fase desordenada tipo líquido de spin para a fase ordenada AF<sup>8</sup>. Depois de uma transformação de Fourier usando os operadores,

$$t_{i,\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k},\alpha} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}, \quad t_{i,\alpha}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}, \quad (4.7)$$

a Hamiltoniana efetiva, no espaço de momentos, é representada como,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{mf} &= N \left( -\frac{3}{4} J \bar{s}^2 + \mu \bar{s}^2 - \mu \right) + \omega_0 \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k},z}^\dagger t_{\mathbf{k},z} \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} \left[ \Lambda_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k},x}^\dagger t_{\mathbf{k},x} + \Delta_{\mathbf{k}} \left( t_{\mathbf{k},x}^\dagger t_{-\mathbf{k},x}^\dagger + t_{\mathbf{k},x} t_{-\mathbf{k},x} \right) \right] \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} \left[ \Lambda'_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k},y}^\dagger t_{\mathbf{k},y} + \Delta'_{\mathbf{k}} \left( t_{\mathbf{k},y}^\dagger t_{-\mathbf{k},y}^\dagger + t_{\mathbf{k},y} t_{-\mathbf{k},y} \right) \right], \end{aligned} \quad (4.8)$$

onde  $\Lambda_{\mathbf{k}} = \omega_0 + 2\Delta_{\mathbf{k}}$ ,  $\Lambda'_{\mathbf{k}} = \omega_0 + 2\Delta'_{\mathbf{k}}$ ,  $\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{4} t \bar{s}^2 \lambda(\mathbf{k})$ ,  $\Delta'_{\mathbf{k}} = \frac{1}{4} t \bar{s}^2 \lambda(\mathbf{k})(1 - \varsigma)$  e  $\lambda(\mathbf{k}) = \sum_{s=1}^d \cos(\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{a})$ .  $\bar{s}$  é o parâmetro de ordem singleto,  $N$  é o número de sítios da rede e  $Z$  o número total de vizinhos mais próximos em uma rede hiper-cúbica. Os vetores de onda  $\mathbf{k}$  são tomados na primeira zona de Brillouin e o espaçamento da rede  $a = |\mathbf{a}| = 1$ .

A Hamiltoniana da Eq. (4.8) pode ser diagonalizada usando as equações de movimento para as funções de Green convenientes (ver apêndice na referência [173]).

---

<sup>8</sup>Os demais termos, i.e., a interação entre os tripletos e a interação entre três tripletos e um singleto serão desconsiderados. O primeiro porque terá efeitos desprezíveis na Hamiltoniana efetiva quadrática, e o segundo por não ter nenhuma contribuição na energia do estado fundamental no senso da aproximação Gaussiana usada aqui [90, 113, 172].

Obtemos assim,

$$\begin{aligned}
 \ll t_{\mathbf{k},x}; t_{\mathbf{k},x}^\dagger \gg &= \frac{(\omega^2 - \omega_k'^2)(\omega + \Lambda_k)}{2\pi\varpi}, \\
 \ll t_{\mathbf{k},y}; t_{\mathbf{k},y}^\dagger \gg &= \frac{(\omega^2 - \omega_k^2)(\omega + \Lambda'_k)}{2\pi\varpi}, \\
 \ll t_{\mathbf{k},z}; t_{\mathbf{k},z}^\dagger \gg &= \frac{1}{2\pi(\omega - \omega_0)},
 \end{aligned} \tag{4.9}$$

onde  $\varpi = (\omega^2 - \omega_k^2)(\omega^2 - \omega_k'^2)$ . Os pólos dos propagadores dados pela Eq. (4.9) determinam as excitações do sistema como  $\omega_0 = (\frac{J}{4} + \mu)$ , a qual é o espectro sem dispersão do estado tripleto longitudinal,  $\omega_k = \pm\sqrt{\Lambda_k^2 - (2\Delta_k)^2}$  o espectro de excitação do estado tripleto transversal- $x$  e  $\omega_k' = \pm\sqrt{\Lambda_k'^2 - (2\Delta_k')^2}$  que corresponde ao estado tripleto transversal- $y$ . Note que se  $\zeta = 0$ ,  $\Delta_k = \Delta_k'$  e  $\Lambda_k = \Lambda_k'$ . Consequentemente, os espectros de excitação transversais coincidem,  $\omega_x = \omega_y$ , o que corresponde ao modelo colar de Kondo isotrópico [114].

#### 4.4.2 Fase Paramagnética

Visando obter a energia interna paramagnética (e com isso a energia livre), obtemos o valor médio da Hamiltoniana efetiva  $U = \langle \mathcal{H}_{mf} \rangle$  com ajuda do teorema do salto [17]. Portanto, a energia interna na fase paramagnética (PARA) pode ser obtida [112, 114, 115],

$$U = \varepsilon_0 + \sum_{\mathbf{k}} (\omega_0 n(\omega_0) + \omega_{\mathbf{k}} n(\omega_{\mathbf{k}}) + \omega_{\mathbf{k}}' n(\omega_{\mathbf{k}}')), \tag{4.10}$$

onde

$$\varepsilon_0 = N \left( -\frac{3}{4} J \bar{s}^2 + \mu \bar{s}^2 - \mu \right) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}}' - \Lambda_{\mathbf{k}} - \Lambda_{\mathbf{k}}'). \tag{4.11}$$

$\varepsilon_0$  é a energia do estado fundamental na fase PARA tipo líquido de spin,  $n(\omega) = \frac{1}{2} (\coth \frac{\beta\omega}{2} - 1)$  é o fator de Bose com  $\beta = 1/k_B T$ ,  $k_B$  a constante de Boltzman e  $T$  a temperatura. Seguindo as relações termodinâmicas usuais [174], usando a idéia de que as excitações do sistema são quase-partículas, construímos a energia livre.

Para isto usamos a expressão do potencial termodinâmico de um gás de partículas obedecendo a estatística de Bose-Einstein. Esta energia livre é dada por  $F = U - TS$  e a entropia dos bósons segue:

$$S = k_B \sum_{\mathbf{k}} [(n(\omega_{\mathbf{k}}) + 1) \ln(n(\omega_{\mathbf{k}}) + 1) - n(\omega_{\mathbf{k}}) \ln(n(\omega_{\mathbf{k}}))]. \quad (4.12)$$

Assim, usando a Eq. (4.10) e Eq. (4.12) obtemos a energia livre na fase paramagnética tipo líquido de spin como,

$$F = \varepsilon_0 - \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln[1 + n(\omega_{\mathbf{k}})] - \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln[1 + n(\omega'_{\mathbf{k}})] - \frac{N}{\beta} \ln[1 + n(\omega_0)]. \quad (4.13)$$

Esta energia livre nos permite obter o comportamento termodinâmico na proximidade da instabilidade magnética, vindo da fase desordenada paramagnética. Agora para obter os parâmetros introduzidos,  $\bar{s}^2$  e  $\mu$ , minimizamos a energia livre mediante as equações de ponto de sela  $(\partial F / \partial \mu, \partial F / \partial \bar{s}) = (0, 0)$  obtendo,

$$\begin{aligned} 2(2 - \bar{s}^2) &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}} \coth \frac{\beta \omega_{\mathbf{k}}}{2} + \frac{\Lambda'_{\mathbf{k}}}{\omega'_{\mathbf{k}}} \coth \frac{\beta \omega'_{\mathbf{k}}}{2} \right) + f(\omega_0), \\ \frac{2J}{t} \left( \frac{3}{4} - \frac{\mu}{J} \right) &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{\omega_0}{\omega_{\mathbf{k}}} \lambda(\mathbf{k}) \coth \frac{\beta \omega_{\mathbf{k}}}{2} + \frac{\omega_0}{\omega'_{\mathbf{k}}} \lambda(\mathbf{k}) (1 - \varsigma) \coth \frac{\beta \omega'_{\mathbf{k}}}{2} \right), \end{aligned} \quad (4.14)$$

onde  $f(\omega_0) = \frac{N}{2} (\coth \frac{\beta \omega_0}{2} - 1)$  é a contribuição dos tripletos  $t_z$ .

### 4.4.3 Resultados numéricos a $T = 0$

Estudamos primeiro o caso  $T = 0$ , i.e., sem flutuações térmicas. À temperatura nula as equações auto-consistentes na Eq. (4.14) podem ser simplificadas como,

$$\begin{aligned} 4(2 - \bar{s}^2) &= I_1(y) + I_2(y) + I_3(y) + I_4(y), \\ \frac{4Jy}{t} \left( \frac{3}{4} - \frac{\mu}{J} \right) &= I_2(y) - I_1(y) + I_4(y) - I_3(y), \end{aligned} \quad (4.15)$$

com

$$\begin{aligned}
 I_1(y) &= \frac{1}{\pi^d} \int_0^\pi \frac{d^d k}{\sqrt{1 + y\lambda(\mathbf{k})}}, & I_3(y) &= \frac{1}{\pi^d} \int_0^\pi \frac{d^d k}{\sqrt{1 + y(1 - \varsigma)\lambda(\mathbf{k})}} \\
 I_2(y) &= \frac{1}{\pi^d} \int_0^\pi d^d k \sqrt{1 + y\lambda(\mathbf{k})}, & I_4(y) &= \frac{1}{\pi^d} \int_0^\pi d^d k \sqrt{1 + y(1 - \varsigma)\lambda(\mathbf{k})},
 \end{aligned}
 \tag{4.16}$$

onde introduzimos o parâmetro adimensional  $y = t\bar{s}^2/\omega_0$ . Portanto, uma equação para  $y$  pode ser obtida:

$$y = \frac{2t}{J} (1 - [I_1(y) + I_3(y)]/4). \tag{4.17}$$

A temperatura nula, obtemos as soluções numéricas das equações auto-consistentes da Eq. (4.15) usando a Eq. (4.17). Neste caso, paramagnético, temos que o espectro de excitação na direção- $z$  é  $\omega_z(k) = \omega_0$ , sem dispersão. Os outros espectros,  $\omega_k$  e  $\omega'_k$ , mostram uma dispersão que tem um mínimo no vetor recíproco AF  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)$  em três dimensões. Portanto, o mínimo valor das excitações define

$$\Delta^x = \omega_0 \sqrt{1 - yd}, \quad \Delta^y = \omega_0 \sqrt{1 - yd(1 - \varsigma)}. \tag{4.18}$$

A energia do gap de spin  $\Delta^x$  e  $\Delta^y$  define a escala de energia para a fase paramagnética desordenada tipo líquido de spin Kondo quando  $0 \leq \varsigma \leq 1$  e  $\varsigma < 0$ , respectivamente. Para  $\varsigma = 0$ ,  $\Delta^x$  e  $\Delta^y$  são idênticos e obtemos o gap de spin original do KNM [110]. Esta análise do gap de spin é importante desde que o desaparecimento deste e o surgimento de modos moles<sup>9</sup> com possível condensação dos tripletos define a transição de fase quântica no QCP, ( $J/t = (J/t)_c, T = 0$ ). Sendo a transição da fase paramagnética tipo líquido de spin Kondo para a fase ordenada de longo alcance antiferromagnética.

Neste ponto é conveniente clarificar que nas Figs. (4.4), (4.5) e (4.6), apresentamos a figura da energia do gap de spin como  $\Delta/J$  versus  $(J/t)^{-1}$  seguindo a

---

<sup>9</sup>São os modos que aparecem quando a energia do sistema tende zero como consequência de  $k \rightarrow 0$ .

nomenclatura do caso isotrópico  $\zeta = 0$  [110], apesar de que consideramos ao longo deste capítulo o parâmetro de controle como  $J/t$ . Isto não produzirá nenhuma diferença nas propriedades físicas, porém, somente o início das curvas mudará da esquerda para direita.

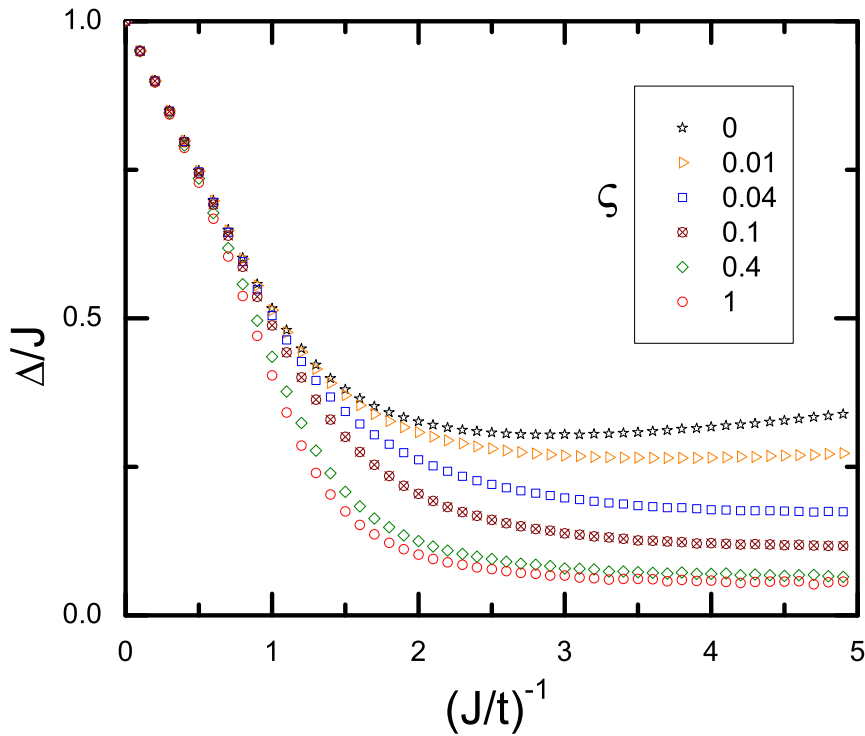


Figura 4.4: O gap de spin  $\Delta/J$  versus o parâmetro de controle  $(J/t)^{-1}$  é esboçado para diferentes valores do parâmetro de anisotropia  $\zeta$  em uma dimensão e temperatura nula. A figura mostra que o gap de spin é sempre finito para  $0 \leq \zeta \leq 1$ . Figura reproduzida da referência [176].

O caso unidimensional (1d) é mostrado na Fig. (4.4), a energia do gap cai linearmente para pequenos valores de  $(J/t)^{-1}$  e desvia-se consideravelmente do comportamento linear à medida que  $(J/t)^{-1}$  aumenta. Assim, a energia do gap de spin sempre será finita para qualquer valor do parâmetro de anisotropia tipo Ising  $\zeta$ , entre  $0 \leq \zeta \leq 1$ , próprio da fase desordenada em redes de Kondo unidimensio-

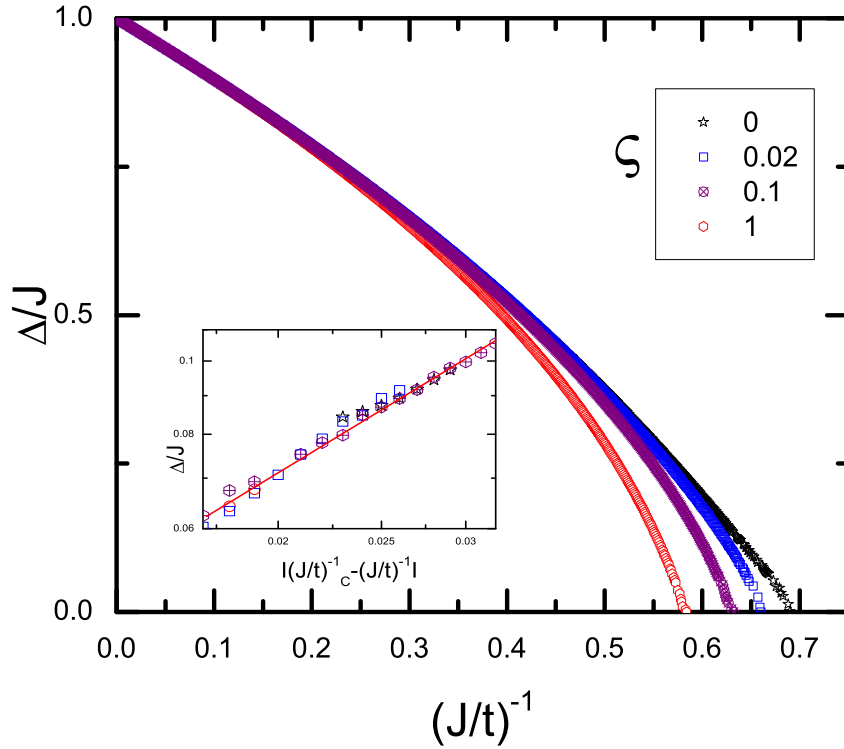


Figura 4.5: Figura a temperatura nula do gap de spin como  $\Delta/J$  versus o parâmetro de controle  $(J/t)^{-1}$  em duas dimensões. O desenho no interior mostra a figura log-log do gap de spin versus  $|(J/t)^{-1}_c - (J/t)^{-1}|$  para  $0 \leq \zeta \leq 1$ . Isso mostra que  $\Delta/J$  desaparece próximo do ponto crítico quântico  $(J/t)^{-1}_c$  com expoente  $\nu z \approx 1$ . Figura reproduzida da referência [176].

nais [110, 136]. Na referência [175], utilizando-se uma aproximação de ondas de spin no AKNM unidimensional, foi encontrada uma transição de fase quântica em um valor crítico  $\zeta_c$ . Nosso estudo não encontra nenhum valor crítico finito de  $(J/t)^{-1}$ . Acreditamos que nossos resultados sejam corretos, e os da referência [175] uma consequência das aproximações usadas. Isto porque o estado fundamental de redes de Kondo unidimensionais está sempre em uma fase paramagnética tipo líquido de spin [110, 111] no limite de acoplamento forte,  $J/t \rightarrow \infty$ , usado aqui.

A energia do gap de spin em duas dimensões ( $2d$ ), para vários valores de ani-

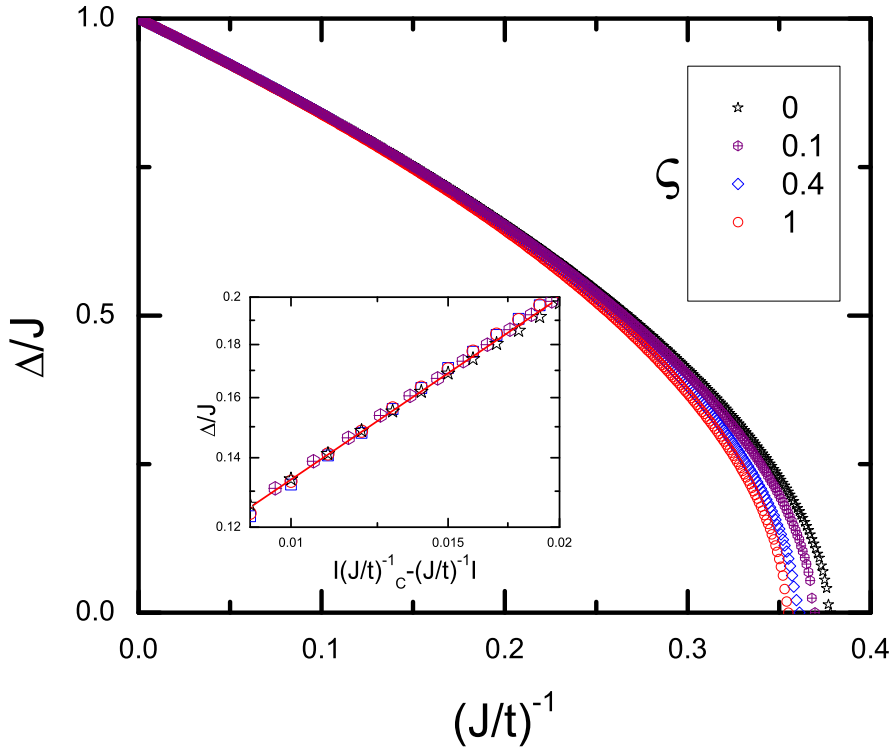


Figura 4.6: Figura a temperatura nula do gap de spin como  $\Delta/J$  versus o parâmetro de controle  $(J/t)^{-1}$  em três dimensões e parâmetro de anisotropia entre  $0 \leq \zeta \leq 1$ . A lei de escala do gap próxima do QCP é mostrada no desenho interno. A figura log-log de  $\Delta/J$  vs  $|(J/t)_c^{-1} - (J/t)^{-1}|$  é esboçada para  $\zeta = 0, 0.1, 0.4, 1$ , e escala como  $\Delta/J \sim |(J/t)_c^{-1} - (J/t)^{-1}|^{\nu z}$  com expoente  $\nu z \approx 0.5$ . Figura reproduzida da referência [176].

isotropia, é mostrada na Fig. (4.5). Para  $0 < \zeta \leq 1$  os efeitos da anisotropia são fracos e muda a posição do QCP ligeiramente, até  $\zeta = 0$ , onde ambos modos moles,  $\Delta^x$  e  $\Delta^y$ , contribuem. Portanto, o comportamento qualitativo é o *mesmo* para este intervalo de anisotropias e o expoente do gap é aproximadamente  $\nu z \simeq 1$ . Isso é esboçado no interior da Fig. (4.5).

Em três dimensões ( $3d$ ), os efeitos do gap de spin são similares ao caso bidimensional, como mostra a Fig. (4.6). O gap de spin tem um expoente  $\nu z \simeq 0.5$  para  $0 \leq \zeta \leq 1$ . Como no caso  $2d$ , quando  $\zeta = 0$  os modos  $\omega_k$  e  $\omega'_k$  coincidem.



Concluimos que, em  $2d$  e  $3d$ , para valores do parâmetro de anisotropia entre  $0 \leq \varsigma \leq 1$ , existe um valor crítico  $(J/t)_c^{-1}$ , para o qual o gap de spin desaparece como  $\Delta/J \propto |(J/t)_c^{-1} - (J/t)^{-1}|^{\nu_z}$ , com  $\nu_z \approx 1$  e  $\nu_z \approx 0.5$  em duas e três dimensões, respectivamente. Consequentemente, uma transição de fase quântica para uma fase ordenada acontece. No entanto, em  $1d$  isto não sucede. Estes resultados são similares aos da referência [110] para  $\varsigma = 0$ , e mostra um tipo de universalidade similar aos modelos de redes de Kondo com parâmetro de anisotropia tipo Ising nulo [110, 111, 114]. Em três dimensões, da relação entre o gap de spin e a distância ao QCP, esboçado no interior da Fig. (4.6), mostra-se que quando  $(J/t)^{-1}$  se incrementa desde seu limite de acoplamento forte, o gap de spin dos tripletos decresce no vetor de onda  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)$  e desaparece em  $(J/t)^{-1} = (J/t)_c^{-1}$ . Como  $\Delta/J \propto |(J/t)_c^{-1} - (J/t)^{-1}|^{0.5}$  próxima do QCP, podemos imediatamente identificar o expoente do gap de spin  $\nu_z \approx 0.5$ , confirmando resultados anteriores [114].

#### 4.4.4 Resultados analíticos na trajetória crítica quântica

Desde que transições de fase quânticas são associadas geralmente com modos moles no QCP, nos quais o gap desaparece, as propriedades físicas seguem leis de potência em função da temperatura, determinada por expoentes críticos quânticos [13]. Uma destas propriedades é o calor específico,  $C_V$ , no qual estamos interessados aqui. Esta propriedade foi extensivamente explorada experimentalmente nos férmions pesados, na chamada *trajetória crítica quântica* ( $J/t = (J/t)_c$ ,  $T \rightarrow 0$ ). Isto foi feito fixando a pressão (em nosso caso o parâmetro  $J/t$ ) em seu valor crítico, para o desaparecimento da ordem magnética [33]. Assim, calculamos analiticamente o calor específico acima do ponto crítico quântico  $J/t = (J/t)_c$ , e quando  $T \rightarrow 0$ , em função do parâmetro de anisotropia para os casos,  $\varsigma \ll 1$  e  $\varsigma \approx 1$ .

Todos os cálculos serão feitos considerando duas aproximações fundamentais: (i) o sistema está na trajetória crítica quântica, i.e.,  $J/t = (J/t)_c$ , e a temperatura  $T \rightarrow 0$ , (ii) a região de temperaturas onde calcularemos o calor específico será muito menor que a região onde a temperatura de Kondo ( $T_K$ ) se mostra importante, portanto usaremos  $T \ll T_K$ .

Começaremos escrevendo  $k = Q + q$  e expandindo para pequenos  $q$ :  $\lambda(q) = -d + q^2/2 + O(q^4)$ , tal que  $Q = (\pi, \pi, \pi)$  em três dimensões. O espectro de excitação dos tripletos pode ser reescrito como,

$$\begin{aligned}\omega_q &\approx \omega_0 \sqrt{1 + y\lambda(q)} = \sqrt{\Delta^2 + Dq^2}, \\ \omega'_q &\approx \omega_0 \sqrt{1 + y\lambda(q)(1 - \varsigma)} = \sqrt{\Delta^2 + D(1 - \varsigma)q^2 + \omega_0^2 \varsigma},\end{aligned}\quad (4.19)$$

onde  $\Delta = \Delta^x$  é a energia do gap dado pela Eq. (4.18) desde que  $0 \leq \varsigma \leq 1$ ,  $D = \omega_0^2/2d$  é a constante de rigidez (stiffness) a  $T = 0$ , e  $\omega_0$  o ramo de excitação sem dispersão.

Considerando  $\Delta = 0$ , quando a razão  $J/t$  atinge seu valor crítico  $(J/t)_c$  [13], nas

Eqs. (4.19) e usando a relação termodinâmica  $C_V = -T\partial^2 F/\partial T^2$ , onde a energia livre  $F$  vem dada pela Eq. (4.13), obtemos

$$C_V = \frac{S_d}{4k_B T^2 \pi^d} \int_0^\pi dq q^{d-1} (\omega_q^2 + \omega_q'^2) \left( \sinh^{-2} \frac{\beta\omega_q}{2} + \sinh^{-2} \frac{\beta\omega_q'}{2} \right), \quad (4.20)$$

onde  $S_d$  é o ângulo sólido. Dessa maneira, a Eq. (4.20) dá a expressão para o calor específico em função da temperatura na trajetória crítica quântica, como uma contribuição dos bósons  $t_x$  e  $t_y$ .

*Caso  $0 \leq \varsigma \ll 1$ :* Da relação entre o calor específico e o parâmetro de anisotropia, dada pela Eq. (4.20), discutimos agora o caso  $\varsigma \ll 1$ . Fazendo uma mudança de variáveis na Eq. (4.20) obtemos,

$$C_V(\varsigma \ll 1) = \frac{S_d k_B Z^{d/2}}{\pi^d} \left( \frac{k_B T}{\omega_0} \right)^d \left( \Upsilon_1(d) + \frac{\varsigma}{4} (\Upsilon_2(d) - 2\Upsilon_1(d)) \right), \quad (4.21)$$

onde  $\Upsilon_1(d) = \int_0^\infty dx x^{d+1} \sinh^{-2}(x/2)$ ,  $\Upsilon_2(d) = \int_0^\infty dx x^{d+2} \coth(x/2) \sinh^{-2}(x/2)$  e  $x = \beta\omega_0 q/\sqrt{Z}$ . Em duas dimensões temos  $\Upsilon_1(2) = 24\zeta(3)$  e  $\Upsilon_2(2) = 96\zeta(3)$ , onde  $\zeta(n) = \sum_i^\infty \frac{1}{i^n}$  é a função Zeta de Riemann de índice  $n$  [177]. Em três dimensões encontramos  $\Upsilon_1(3) = 16\pi^4/15$  e  $\Upsilon_2(3) = 16\pi^4/3$ . Para  $\varsigma = 0$ , os espectros de excitação da Eq. (4.19) coincidem e recuperamos o valor exato  $C_V(\varsigma = 0) = \frac{128\sqrt{6}\pi^2 k_B}{15} \left( \frac{k_B T}{\omega_0} \right)^3$  obtido na referência [114].

*Caso  $\varsigma \approx 1$ :* Aqui é suficiente considerar  $\xi = 1 - \varsigma \ll 1$ , onde  $\xi$  é um parâmetro adimensional que controla o parâmetro de anisotropia tipo Ising. Portanto, trabalhando como no caso  $0 \leq \varsigma \ll 1$  temos,

$$C_V(\varsigma \approx 1) = \frac{S_d k_B Z^{d/2}}{4\pi^d} \left( \frac{k_B T}{\omega_0} \right)^d \Upsilon_1(d)(2 - \varsigma). \quad (4.22)$$

Os resultados das Eqs. (4.21) e (4.22) mostram que o calor específico na trajetória crítica quântica, é somente renormalizada pelo valor da anisotropia, e, portanto,  $C_V \propto T^d$  para  $\varsigma \ll 1$  e  $\varsigma \approx 1$ . Note que isto é consistente com o resultado da teoria de escala  $C_V \propto T^{d/z}$  com expoente dinâmico  $z = 1$  [13].

Considerando  $z = 1$ , em três dimensões temos a dimensão efetiva  $d_{eff} = d + z = d_{uc} = 4$  onde  $d_{uc}$  é a dimensão crítica superior para a transição magnética [13]. Conseqüentemente, a presente aproximação Gaussiana produz a descrição correta do QCP em redes de Kondo para  $d \geq 3$ , embora em  $3d$  não reproduz as correções logarítmicas próprias de sistemas com  $d_{eff} = d_{uc}$  [178].

#### 4.4.5 Fase Antiferromagnética

A aproximação usada aqui pode ser estendida à fase antiferromagnética fazendo uma condensação do tripleto  $t_{\mathbf{k},x}$  no vetor recíproco  $\mathbf{Q}$ . Assim temos  $t_{\mathbf{k},x} = \sqrt{N}\bar{t}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{Q}} + \eta_{\mathbf{k},x}$ , onde  $\bar{t}$  é o valor médio do bóson  $t_x$  no estado fundamental. Este valor médio, pode ser considerado como o parâmetro de ordem antiferromagnético. O operador  $\eta_{\mathbf{k},x}$  representa a flutuação do tripleto- $x$ . Fazendo os mesmos passos como no caso paramagnético, a energia interna será,

$$U' = \varepsilon'_0 + \sum_{\mathbf{k}} (\omega_0 n(\omega_0) + \omega_{\mathbf{k}} n(\omega_{\mathbf{k}}) + \omega'_{\mathbf{k}} n(\omega'_{\mathbf{k}})), \quad (4.23)$$

onde

$$\begin{aligned} \varepsilon'_0 &= N \left[ -\frac{3}{4} J \bar{s}^2 + \mu \bar{s}^2 - \mu + \left( \frac{J}{4} + \mu - \frac{1}{2} t Z \bar{s}^2 \right) \bar{t}^2 \right] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{\mathbf{k}} + \omega'_{\mathbf{k}} - \Lambda_{\mathbf{k}} - \Lambda'_{\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (4.24)$$

é o estado fundamental na fase antiferromagnética. A energia livre neste caso será,

$$F' = \varepsilon'_0 - \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln[1 + n(\omega_{\mathbf{k}})] - \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln[1 + n(\omega'_{\mathbf{k}})] - \frac{N}{\beta} \ln[1 + n(\omega_0)]. \quad (4.25)$$

Minimizando a energia livre na fase antiferromagnética, dada pela Eq. (4.25), usando  $(\partial F'/\partial \mu, \partial F'/\partial \bar{s}, \partial F'/\partial \bar{t}) = (0, 0, 0)$ , obtemos as seguintes equações auto-

consistentes,

$$\begin{aligned}
\bar{s}^2 &= 1 + \frac{J}{Zt} - \frac{f(\omega_0)}{2} \\
&\quad - \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}} (1 + 2n(\omega_{\mathbf{k}})) + \sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})(1-\delta)}{Z}} (1 + 2n(\omega'_{\mathbf{k}})) \right), \\
\bar{t}^2 &= 1 - \frac{J}{Zt} - \frac{f(\omega_0)}{2} - \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{(1 + 2n(\omega_{\mathbf{k}}))}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}}} + \frac{(1 + 2n(\omega'_{\mathbf{k}}))}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})(1-\delta)}{Z}}} \right), \\
\mu &= \frac{1}{2} Zt\bar{s}^2 - J/4,
\end{aligned} \tag{4.26}$$

onde os espectros de excitação do estado tripleto transversal- $x$  e transversal- $y$  são dados agora por,  $\omega_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} Zt\bar{s}^2 \sqrt{1 + 2\lambda(\mathbf{k})/Z}$  e  $\omega'_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} Zt\bar{s}^2 \sqrt{1 + 2\lambda(\mathbf{k})(1-\delta)/Z}$ , respectivamente.

Alternativamente, poderíamos obter os parâmetros  $\bar{s}$  e  $\bar{t}$  na Eq. (4.26), calculando os valores médios através dos saltos das funções de Green apropriadas [18]. Geralmente as equações para  $\bar{s}$  e  $\bar{t}$  na Eq. (4.26) deveriam ser resolvidas e para  $\varsigma = 0$  os parâmetros  $\bar{s}$  e  $\bar{t}$  da referência [114] são obtidos.

Nesta fase ordenada a condensação dos tripletos e dos singletos surge da interação RKKY e do efeito Kondo, respectivamente. A temperatura finita, a condensação de singletos acontece em uma escala de temperatura que é da ordem da energia do parâmetro de troca  $J$ . Por outro lado, a escala de energia abaixo da qual as excitações do estado tripleto transversal- $x$  condensam, é dada pela temperatura crítica de Néel ( $T_N$ ) que será calculada na próxima sub-seção 4.4.6. Portanto, o fato de que  $\bar{s}$  e  $\bar{t}$  serem finitos nesta fase deve ser interpretado, neste nível usando a aproximação Gaussiana, como a coexistência de blindagem Kondo e antiferromagnetismo na fase ordenada [110, 111, 114].

#### 4.4.6 Linha crítica de Néel

Seguindo o estudo da sub-seção anterior 4.4.5, a linha crítica que dá a instabilidade da fase AF para  $J/t < (J/t)_c$  é obtida fazendo o parâmetro de ordem antiferromagnético  $\bar{t} = 0$ . Desse modo, da Eq. (4.26) obtemos a fronteira da fase AF próxima do QCP como,

$$\frac{|g|}{Z} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{n(\omega_{\mathbf{k}})}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}}} + \frac{n(\omega'_{\mathbf{k}})}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})(1-\varsigma)}{Z}}} \right) + \frac{f(\omega_0)}{2}, \quad (4.27)$$

onde  $g = |(J/t)_c - (J/t)|$  mede a distância ao QCP, como definimos anteriormente. O ponto crítico quântico  $(J/t)_c$  vem dado por,

$$\left(\frac{J}{t}\right)_c = Z \left[ 1 - \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{1}{\sqrt{1 + 2\lambda(\mathbf{k})/Z}} + \frac{1}{\sqrt{1 + 2\lambda(\mathbf{k})(1-\varsigma)/Z}} \right) \right], \quad (4.28)$$

que separa a fase ordenada AF da fase desordenada tipo líquido de spin Kondo caracterizada pelo gap de spin finito a temperatura nula.

Fazendo a mesma análise da sub-seção 4.4.4, expandindo os espectros de excitação ao redor do vetor de onda recíproco  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)$  em três dimensões, a Eq. (4.27) é expressa em forma integral como:

$$\frac{|g|}{Z} = \frac{S_d \omega_0}{4\pi^d} \int_0^\pi dq q^{d-1} \left( \frac{1}{\omega_q} \left( \coth \frac{\beta \omega_q}{2} - 1 \right) + \frac{1}{\omega'_q} \left( \coth \frac{\beta \omega'_q}{2} - 1 \right) \right), \quad (4.29)$$

onde consideramos na Eq. (4.27) que para temperaturas  $k_B T \ll \omega_0$   $f(\omega_0)$  pode ser desprezível. A Eq. (4.29) permite obter a linha crítica de Néel em função do parâmetro de anisotropia tipo Ising  $\varsigma$  e da distância ao QCP,  $|g|$ .

*Caso*  $0 \leq \varsigma \ll 1$ : Resolvendo a Eq. (4.29) para  $0 \leq \varsigma \ll 1$  obtemos,

$$\frac{|g|}{Z_{\varsigma \ll 1}} = \frac{S_d Z^{d/2}}{2\pi^d} \left( \frac{k_B T}{\omega_0} \right)^{d-1} \left[ \Phi_1(d) + \frac{\varsigma}{8} (\Phi_2(d) + 2\Phi_1(d)) \right], \quad (4.30)$$

onde  $\Phi_1(d) = \int_0^\infty dx x^{d-2} (\coth \frac{x}{2} - 1)$  e  $\Phi_2(d) = \int_0^\infty dx x^{d+1} \sinh^{-2}(x/2)$ . Note que as integrais  $\Phi_1(d)$  e  $\Phi_2(d)$  divergem para  $d < 3$  mostrando que, para qualquer valor

do parâmetro de anisotropia  $0 \leq \varsigma \ll 1$ , não existe linha crítica a temperatura finita em  $d < 3$  [112, 114]. Em duas dimensões e para o caso isotrópico,  $\varsigma = 0$ , de fato não existe linha de transição em concordância com o teorema de Mermin-Wagner [23]. No entanto, para  $d \geq 3$ , as integrais são finitas e a equação para a linha crítica tem a forma,  $(T_N)_{\varsigma \ll 1} \propto |g|^\phi$ , com  $\phi = 1/(d-1)$ .

Se escrevemos a equação para a linha crítica,  $f(g, T_N) = 0$ , na forma,  $(J/t)_c(T) - (J/t)_c(0) + v_0 T_N^{1/\psi} = 0$ , onde  $v_0$  está relacionado com a interação entre as flutuações de spin, identificamos o expoente de deslocamento,  $\psi = z/(d+z-2)$  [39]. Comparando este último com  $\phi$  obtemos o expoente dinâmico  $z = 1$ , um resultado Gaussiano, desde que a linha crítica só existe para  $d > 2$ .

No caso anisotrópico,  $\varsigma = 1$ , ou para valores próximos deste,  $\varsigma \approx 1$ , acreditamos que deve existir uma linha de transição em duas dimensões a temperatura finita. No entanto, encontrar analiticamente este resultado é ainda mais complicado que para o caso anterior,  $0 \leq \varsigma \ll 1$ . Um tratamento numérico deverá ser feito para encontrar esta linha de transição, como nas redes de Kondo anisotrópicas unidimensionais [171].

A dependência em temperatura da função  $f(g, T)$ , surgindo das interações entre flutuações de spin, pode modificar a dependência em temperatura das propriedades físicas como o calor específico, na trajetória crítica quântica ( $J/t = (J/t)_c$ ,  $T \rightarrow 0$ ). No entanto, podemos ver que o resultado puramente Gaussiano calculado na subseção 4.4.4 é dominante, em concordância com as aproximações usadas aqui. Para  $\varsigma = 0$ , obtemos a linha crítica de Néel  $k_B T_N = 0.13\omega_0 |g|^{1/2}$  estabelecida para o KNM na referência [114].

Em resumo, obtivemos analiticamente uma expressão para a linha de Néel próxima do QCP para  $0 \leq \varsigma \ll 1$ . Mostramos que esta linha não existe em  $d = 2$  para qualquer valor do parâmetro de anisotropia entre  $0 \leq \varsigma \ll 1$ , enquanto que, para  $d \geq 3$  a lei de potência entre  $|g|$  e a linha crítica na presença do parâmetro de anisotropia

é a *mesma* que no modelo colar de Kondo original. Portanto, a *criticalidade* próxima do QCP é governada pelos *mesmos* expoentes críticos do modelo colar de Kondo isotrópico ( $\zeta = 0$ ).

## 4.5 Comportamento crítico quântico magnético induzido por campo magnético no modelo colar de Kondo

### 4.5.1 A Hamiltoniana

Nesta seção discutiremos muito brevemente um assunto que está sendo explorado tanto do ponto de vista experimental [179, 180, 181] quanto teórico [168, 182, 183, 184]. Trata-se dos efeitos de um campo magnético nos isolantes de Kondo. Experimentos em  $YbB_{12}$  [185],  $Ce_3Bi_4Pt_3$  [186, 187],  $SmB_6$  [188, 189],  $SmS$  [190],  $TmSe$  [191], e  $Ce_xNi_{1-x}Sn$  [192] em campos intensos indicam que uma fase metálica é estabelecida após o fechamento do gap em um campo magnético crítico  $H_{c1}$ . Por exemplo, medidas de transporte em  $Ce_3Bi_4Pt_3$  em campos magnéticos intensos [187, 193] indicam que a resistividade cai para um valor dominado pelas impurezas magnéticas para campos superiores a um campo magnético crítico<sup>10</sup>  $H_{c1} \approx 50$  T (Teslas). Isto é mostrado na figura 4.7.

Para estudar os efeitos de um campo magnético em um isolante de Kondo introduzimos um termo de campo magnético  $H$ , na direção- $z$ , na Hamiltoniana dada pela Eq. (4.3). Consideramos que o sistema está na fase desordenada tipo líquido de spin, e que qualquer ordem de longo alcance será induzida pelo campo magnético. Inicialmente, em nosso nível de estudo, este interfere na competição Kondo-RKKY favore-

---

<sup>10</sup>Esta transição isolante-metal para o composto  $Ce_3Bi_4Pt_3$  pode ser induzida também por pressão e dopagem [194, 195, 196].



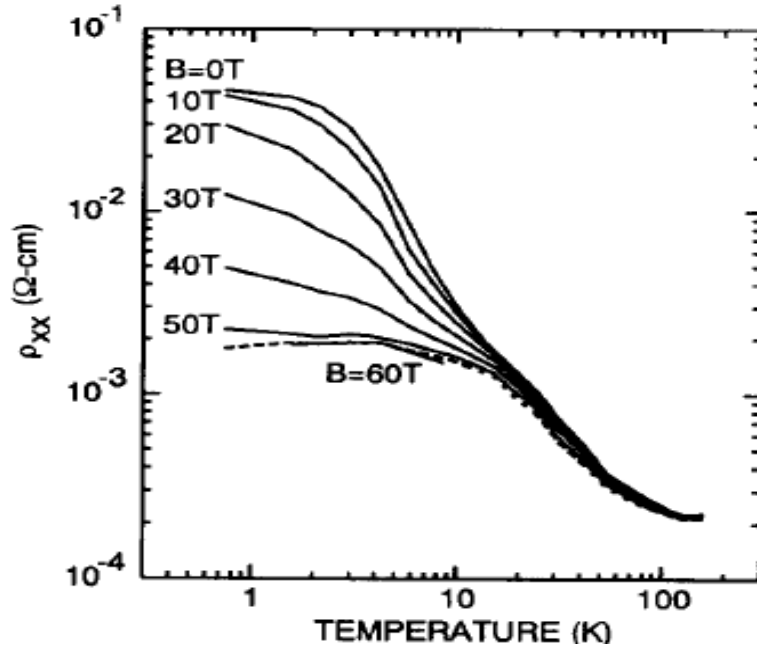


Figura 4.7: Resistividade longitudinal versus a temperatura para campos magnéticos fixos. A linha pontilhada mostra os dados com  $H = 55\text{ T}$ . Veja que a resistividade é relativamente constante para  $T < 10\text{ K}$  e  $H > 50\text{ T}$ . Figura reproduzida da referência [193].

cendo a formação em cada sítio, e na proximidade de uma instabilidade magnética, de um estado tripleto ao invés de um singleto. Após um campo magnético crítico  $H_{c1}$  [182, 184, 197] uma fase antiferromagnética é estabelecida. Em campos suficientemente intensos os spins localizados tornam-se polarizados e após um campo magnético crítico  $H_{c2}$  o sistema passa a uma fase paramagnética saturada. O estudo usando uma aproximação Gaussiana com a representação dos operadores de spin em função dos operadores de enlace deve incorporar: um acoplamento entre o momento localizado e o spin dos elétrons de condução que dá a formação de singletos, o surgimento de uma ordem antiferromagnética transversal ao campo aplicado, e uma magnetização uniforme paralela ao campo [116, 198]. A Hamiltoniana do KNM com um campo magnético externo é dada por,

$$\mathcal{H}_H = t \sum_{\langle i,j \rangle} (\tau_i^x \tau_j^x + \tau_i^y \tau_j^y) + J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_i + \sum_i H \cdot (S_i^z + \tau_i^z), \quad (4.31)$$

onde somente introduzimos o termo do campo magnético na Hamiltoniana original dada pela Eq. (4.3) e  $S = |\mathbf{S}|$ . Neste último termo de Zeeman fizemos  $H = g\mu_B H$ . Assumimos que a razão giromagnética,  $g$ , do elétron de condução e dos spins localizados é a mesma<sup>11</sup> e igual a  $g = \mu_B = 1$ , onde  $\mu_B$  é o magneton de Bohr.

Consideramos a representação em operadores de enlace bosônicos, encontrada na seção 3.3, correspondente aos estados singleto e tripleto, apropriada para o caso com campo magnético na direção- $z$ . Assim, os operadores de spin para o momento localizado são dados por,

$$\begin{aligned} S^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(s^\dagger d - u^\dagger s + t_z^\dagger d + u^\dagger t_z), \\ S^- &= (S^+)^\dagger, \\ S^z &= \frac{1}{2}(s^\dagger t_z + t_z^\dagger s + t_z^\dagger d + u^\dagger t_z), \end{aligned} \quad (4.32)$$

e para o operador de spin do elétron de condução,

$$\begin{aligned} \tau^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-s^\dagger d + u^\dagger s + u^\dagger u - d^\dagger d), \\ \tau^- &= (\tau^+)^\dagger, \\ \tau^z &= \frac{1}{2}(-s^\dagger t_z - t_z^\dagger s + t_z^\dagger d + u^\dagger t_z), \end{aligned} \quad (4.33)$$

onde a transformação conserva o número de estados por sítio mediante,

$$s_i^\dagger s_i + u_i^\dagger u_i + d_i^\dagger d_i + t_{iz}^\dagger t_{iz} = 1. \quad (4.34)$$

Com a representação de operadores de spin definido pelas Eqs. (4.32) e (4.33) na Hamiltoniana da Eq. (4.31) obtemos,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_3$$

---

<sup>11</sup>Isto não modificará os aspectos qualitativos de nossas conclusões [197].

onde,

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_0 &= \sum_i \left[ \left( -\frac{3}{4}J + \mu_i \right) s_i^\dagger s_i + \left( \frac{J}{4} + \mu_i \right) t_{i,z}^\dagger t_{i,z} \right] \\
 &+ \sum_i \left[ \left( \frac{J}{4} + \mu_i + H \right) u_i^\dagger u_i + \left( \frac{J}{4} + \mu_i - H \right) d_i^\dagger d_i - \mu_i \right], \\
 \mathcal{H}_1 &= \frac{t}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ s_i^\dagger s_j (u_i u_j^\dagger + d_i d_j^\dagger) - s_i^\dagger s_j^\dagger (u_i d_j + d_i u_j) + h.c. \right], \\
 \mathcal{H}_2 &= \frac{t}{8} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \left( s_i^\dagger (u_i - d_i) + h.c. \right) \left( (u_j^\dagger + d_j^\dagger) t_{j,z} + h.c. \right) \right] \\
 &+ \frac{t}{8} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \left( s_i^\dagger (u_i + d_i) - h.c. \right) \left( (u_j^\dagger - d_j^\dagger) t_{j,z} - h.c. \right) \right], \\
 \mathcal{H}_3 &= \frac{t}{8} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \left( t_{i,z}^\dagger (u_i + d_i) + h.c. \right) \left( (u_j^\dagger + d_j^\dagger) t_{j,z} + h.c. \right) \right] \\
 &+ \frac{t}{8} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \left( t_{i,z}^\dagger (u_i - d_i) - h.c. \right) \left( (u_j^\dagger - d_j^\dagger) t_{j,z} - h.c. \right) \right]. \quad (4.35)
 \end{aligned}$$

$\mathcal{H}_0$  representa a interação do campo magnético externo  $H$  com os estados singleto e tripleto. O potencial químico  $\mu_i$  é introduzido para reforçar a condição (4.34) em cada sítio.  $\mathcal{H}_1$  descreve o processo de interação singleto-tripletto:  $s_i^\dagger s_j (u_i u_j^\dagger + d_i d_j^\dagger)$  representa a propagação dos tripletos e  $s_i^\dagger s_j^\dagger (u_i d_j + d_i u_j)$  a aniquilação de um par tripleto.  $\mathcal{H}_2$  representa a interação entre três tripletos e um singleto, a qual não será considerada devido a condições de simetria da rede [16, 90]. Finalmente,  $\mathcal{H}_3$  representa o termo de interação tripleto-tripletto e contém o possível processo de dispersão dos tripletos. Este termo também não será considerado desde que não produz mudanças significativas nas propriedades do sistema próximo do QCP [90, 116, 199].

### 4.5.2 Estado líquido de spin ( $H < H_{c1}$ )

Em campo magnético zero, assim como para todos os campos menores que o campo magnético crítico  $H_{c1}$ , o sistema encontra-se na fase desordenada, tipo líquido

de spin, com um gap de spin entre os estados singleto e tripleto em cada sítio. Isto é representado desprezando a dinâmica dos singletos e substituindo  $s_i$  por um valor médio  $\bar{s}_i$ , correspondendo a um condensado de singletos.

Procedemos como na seção anterior 4.4, e o operador  $s_i$  e o potencial químico por sítio  $\mu_i$  são substituídos pelos valores médios  $\langle s_i \rangle = \bar{s}$  e  $\mu_i = \mu$ , respectivamente. Esses parâmetros podem ser determinados de forma auto-consistente minimizando a energia livre total <sup>12</sup>. Assim, a Hamiltoniana da Eq. (4.35), após uma transformada de Fourier que a leva de uma representação de sítios para o espaço de momentos, é dada como,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{mf} = & N \left( -\frac{3}{4} J \bar{s}^2 + \mu \bar{s}^2 - \mu \right) + \left( \frac{J}{4} + \mu \right) \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k},z}^\dagger t_{\mathbf{k},z} \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \left[ (\Lambda_{\mathbf{k}} + H) u_{\mathbf{k}}^\dagger u_{\mathbf{k}} + (\Lambda_{\mathbf{k}} - H) d_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}} \right] \\ & + \sum_{\mathbf{k}} [\Delta_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} d_{-\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}} u_{-\mathbf{k}} + h.c.)], \end{aligned} \quad (4.36)$$

onde  $\Lambda_{\mathbf{k}} = \omega_0 + 2\Delta_{\mathbf{k}}$ ,  $\lambda(\mathbf{k}) = \sum_{s=1}^d \cos k_s$ ,  $\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{4} t \bar{s}^2 \lambda(\mathbf{k})$  e o espaçamento da rede foi considerado igual  $a = |\mathbf{a}| = 1$  como definimos na seção 4.4.1. Diagonalizamos a Hamiltoniana efetiva da Eq. (4.36) usando as funções de Green com os seguintes propagadores,

$$\begin{aligned} \ll u_{\mathbf{k}}; u_{\mathbf{k}}^\dagger \gg_{\omega} &= \frac{(\omega + \Lambda_{\mathbf{k}} - H)}{2\pi[(\omega - H)^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2]}, \\ \ll d_{-\mathbf{k}}^\dagger; u_{\mathbf{k}}^\dagger \gg_{\omega} &= \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2\pi[(\omega - H)^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2]}, \\ \ll d_{\mathbf{k}}; d_{\mathbf{k}}^\dagger \gg_{\omega} &= \frac{(\omega + \Lambda_{\mathbf{k}} + H)}{2\pi[(\omega + H)^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2]}, \\ \ll u_{-\mathbf{k}}^\dagger; d_{\mathbf{k}}^\dagger \gg_{\omega} &= \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2\pi[(\omega + H)^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2]}, \\ \ll t_{\mathbf{k},z}; t_{\mathbf{k},z}^\dagger \gg_{\omega} &= \frac{1}{2\pi(\omega - \omega_0)}, \end{aligned} \quad (4.37)$$

<sup>12</sup>Somente nesta parte da tese não estudaremos as diversas transições de fase a temperatura finita. Isso será deixado para trabalhos posteriores a esta tese.

os quais dão as médias térmicas, quando aplicamos o teorema do salto. Portanto, obtemos a energia interna neste regime líquido de spin,  $\langle \mathcal{H}_{mf} \rangle$  como,

$$\begin{aligned}
 U = \langle \mathcal{H}_{mf} \rangle &= \varepsilon_0 + \frac{\omega_0}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left( \coth \frac{\beta \omega_0}{2} - 1 \right) \\
 &+ \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{\omega_{\mathbf{k}} + H}{2} \right) \left( \coth \frac{\beta(\omega_{\mathbf{k}} + H)}{2} - 1 \right) \\
 &+ \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{\omega_{\mathbf{k}} - H}{2} \right) \left( \coth \frac{\beta(\omega_{\mathbf{k}} - H)}{2} - 1 \right), \quad (4.38)
 \end{aligned}$$

onde  $\varepsilon_0 = N \left( -\frac{3}{4} J \bar{s}^2 + \mu \bar{s}^2 - \mu \right) + \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{\mathbf{k}} - \omega_0)$  é o estado fundamental desta fase desordenada e  $\beta = 1/k_B T$ . Dos pólos dos propagadores da Eq. (4.37) vemos que existem três modos  $\omega_{\mathbf{k}} + H$ ,  $\omega_{\mathbf{k}} - H$  e  $\omega_0$ , onde  $\omega_{\mathbf{k}} = \pm \sqrt{\Lambda_{\mathbf{k}}^2 - (2\Delta_{\mathbf{k}})^2}$ . Esta última é a relação de dispersão tripleto transversal e será considerada quando o campo magnético for inferior a um campo magnético crítico  $H_{c1}$ . Acima deste campo, o sistema passa a ter uma ordem de longo alcance induzida por campo magnético. O parâmetro  $\omega_0 = \left( \frac{J}{4} + \mu \right)$  é o espectro de excitação sem dispersão do estado tripleto longitudinal. Assim, nesta fase desordenada, tipo líquido de spin, os modos tripletos não modificam a forma de sua dispersão e são simplesmente desdobrados pelo campo magnético.

Quando o campo magnético é incrementado, o modo do estado de mais baixa energia  $|u\rangle$  torna-se mole em  $Q = (\pi, \pi, \pi)$ . Isto determina o campo magnético crítico  $H_{c1}$  como,

$$H_{c1} = \Delta = \omega_0 \sqrt{1 - \frac{yZ}{2}}, \quad (4.39)$$

onde  $y = \frac{t\bar{s}^2}{\omega_0}$  é um parâmetro adimensional,  $\Delta$  a energia do gap de spin, e  $Z$  o número de vizinhos mais próximos em cada sítio da rede hiper-cúbica. Um simples raciocínio pode ser feito considerando um único singleto, com acoplamento AF,  $J > 0$ : em campo zero, o estado fundamental é um singleto com um gap de spin  $\Delta = J$ , o qual separa os tripletos mediante a interação Zeeman. No campo magnético crítico,  $H_{c1} = \Delta$ , a energia do menor estado tripleto excitado  $u^\dagger|0\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$  é reduzida a

zero, e o estado fundamental torna-se tripleto.

### 4.5.3 Fase antiferromagnética ( $H_{c1} < H < H_{c2}$ )

No regime de campos intermediários, o estado fundamental de cada sítio pode ser considerado como parcialmente polarizado ferromagnético. É importante notar que não existe uma componente específica AF no estado fundamental singlete. Assim, a ordem emerge somente de fechar o gap de spin da excitação com mais baixa energia em  $k = Q$ . Aqui a componente- $z$  da magnetização uniforme é paralela ao campo externo. Isto para ganhar energia Zeeman, enquanto que uma magnetização *staggered* é estabelecida no plano- $xy$ , perpendicular ao campo magnético aplicado.

A descrição apropriada desta fase é uma combinação linear dos estados singlete e tripleto. Dessa maneira, na formulação de operadores de enlace, o estado fundamental da fase ordenada é representado pelos valores médios  $\bar{s}$ ,  $\bar{u}$  e  $\bar{d}$  desses operadores singlete e tripleto<sup>13</sup> [108, 100]. O fato de que o modo tripleto de energia mais alta  $d^\dagger$  condense e tenha um valor médio parece algo contraintuitivo, e foi deixado de lado em vários tratamentos de campo médio [120, 200]. No entanto, a presença de termos da forma  $u_k d_{-k}$  na Hamiltoniana dada pela Eq. (4.36) reafirma que uma componente finita deste estado é requerida.

Contudo, o estado fundamental neste caso está composto de bósons tripletos ao invés de singletos. Embora o tratamento convencional por operadores de enlace deve perder consistência na descrição dessas excitações dos tripletos, desde que interações tripleto-tripletos são excluídas no senso das aproximações usadas aqui, esperamos que isso resultará numa correta descrição [116, 198].

Na medida que o campo magnético aumenta após o campo crítico  $H_{c1}$ , o es-

---

<sup>13</sup>Quando o campo magnético aumenta desde zero, o valor médio singlete  $\bar{s}$  diminui. Após o campo crítico  $H_{c1}$  onde uma transição para a fase AF acontece, este diminui mais ainda. Simultaneamente, os valores médios  $\bar{u}$  e  $\bar{d}$  aumentam com o campo magnético.

tado fundamental misturado singleto-triplete, muda com o campo até um campo magnético crítico  $H_{c2}$ , onde todos os spins se alinham com o campo magnético.

#### 4.5.4 Fase saturada ( $H > H_{c2}$ )

Na notação de operadores de enlace o estado com maior probabilidade neste caso é  $|\uparrow\uparrow\rangle$ , assim assumimos que o tripleto  $u^\dagger$  condensa  $\langle u^\dagger \rangle = \langle u \rangle = \bar{u}$ . Fazendo as aproximações Gaussianas, como na seção 4.5.2, para este caso [90, 120] e depois de uma transformada de Fourier dos operadores bosônicos obtemos,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{mf} &= N((\omega_0 + H)\bar{u}^2 - \mu) \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} \left[ A_{\mathbf{k}} s_{\mathbf{k}}^\dagger s_{\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k},z}^\dagger t_{\mathbf{k},z} + C_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}} \right] \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} \left[ D_{\mathbf{k}} \left( s_{\mathbf{k}} t_{-\mathbf{k},z}^\dagger + t_{\mathbf{k},z} s_{-\mathbf{k}}^\dagger + h.c. \right) \right], \end{aligned} \quad (4.40)$$

onde  $A_{\mathbf{k}} = -\frac{3}{4}J + \mu + 2D_{\mathbf{k}}$ ,  $B_{\mathbf{k}} = \omega_0 + 2D_{\mathbf{k}}$ ,  $C_{\mathbf{k}} = \omega_0 - H$  e  $D_{\mathbf{k}} = \frac{1}{4}t\bar{u}^2\lambda(\mathbf{k})$ . Usando as funções de Green na Eq. (4.40) e resolvendo as equações de movimento obtemos,

$$\begin{aligned} \ll s_{\mathbf{k}}; s_{\mathbf{k}}^\dagger \gg_\omega &= \frac{1}{2\pi} \frac{\omega - \Lambda_{\mathbf{k}}}{(\omega - \Lambda_{\mathbf{k}} + J/2)^2 - M_{\mathbf{k}}^2}, \\ \ll t_{\mathbf{k},z}; t_{\mathbf{k},z}^\dagger \gg_\omega &= \frac{1}{2\pi} \frac{\omega - \Lambda_{\mathbf{k}} + J}{(\omega - \Lambda_{\mathbf{k}} + J/2)^2 - M_{\mathbf{k}}^2}, \\ \ll d_{\mathbf{k}}; d_{\mathbf{k}}^\dagger \gg_\omega &= \frac{1}{2\pi(\omega - (\omega_0 - H))}, \end{aligned} \quad (4.41)$$

onde  $M_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\frac{J}{2})^2 + (2D_{\mathbf{k}})^2}$ ,  $\omega_0 = (\frac{J}{4} + \mu)$  e  $\Lambda_{\mathbf{k}} = \Lambda_{\mathbf{k}} = \omega_0 + 2\Delta_{\mathbf{k}}$  como definido na sub-seção (4.5.2). Os pólos dos propagadores dados na Eq. (4.41) determinam as excitações do sistema como  $\omega_{1,2}(\mathbf{k}) = \Lambda_{\mathbf{k}} - \frac{J}{2} \mp M_{\mathbf{k}}$  e  $\omega_3(\mathbf{k}) = \omega_0 - H$ . Deste último espectro de excitação não dispersivo,  $\omega_3(\mathbf{k})$ , deduzimos o campo magnético crítico  $H_{c2}$ ,

$$H_{c2} = \left( \frac{J}{4} + \mu \right). \quad (4.42)$$

Devemos notar que, em campos magnéticos  $H > H_{c2}$  o sistema tem uma configuração ferromagnética, i.e., todos os spins estão polarizados pelo campo magnético intenso e apontando em sua direção- $z$ . No entanto, a interação magnética entre os operadores de spin do elétron de condução e do momento localizado é antiferromagnética.

Em resumo, descrevemos o estado fundamental do modelo colar de Kondo quando um campo magnético aplicado na direção- $z$  é aplicado na fase desordenada tipo líquido de spin Kondo. Este campo magnético induz ordem AF após um campo magnético crítico  $H_{c1}$ , e uma fase paramagnética saturada após um campo magnético crítico  $H_{c2}$ . Infelizmente, existem poucos exemplos que apresentem este tipo de transição de fase quântica, induzida por um campo magnético. Recentemente, foi encontrado experimentalmente que o composto  $CeOs_4Sb_{12}$ , o qual deve ser classificado como isolante de Kondo, exibe uma transição magnética induzida por um campo magnético externo. Esta transição poderia ser para uma fase AF como discutimos aqui, embora um estudo mais detalhado deveria ser feito, desde que este composto tem uma estrutura eletrônica complicada incluindo graus de liberdade orbitais [201, 202].



# Capítulo 5

## Crossover dimensional em redes de Kondo anisotrópicas

### 5.1 Introdução

A dimensão tem um papel fundamental dentro dos sistemas eletrônicos fortemente correlacionados (SCES) [7, 203, 204, 205, 206, 207]. Por exemplo, conjecturas baseadas em teorias bidimensionais ( $2d$ ), na vizinhança de um ponto crítico quântico (QCP) [36, 39, 81, 101, 208, 209], foram propostas para explicar problemas importantes não-resolvidos em SCES, tais como, comportamento não líquido de Fermi e supercondutividade de alta temperatura crítica. No entanto, os materiais reais aos quais estas idéias foram aplicadas são geralmente tridimensionais ( $3d$ ), com um acoplamento eletrônico finito entre suas camadas constituintes. Dessa maneira, os mecanismos para redução dimensional têm permanecido como um assunto teórico<sup>1</sup> [210, 211]. A noção de dimensionalidade adquire uma natureza “emergente”: embora as partículas individuais movimentem-se em uma estrutura tridimensional,

---

<sup>1</sup>Até nossos dias um ponto crítico quântico bidimensional não foi observado experimentalmente em nenhum *bulk* tridimensional.

seu comportamento coletivo ocorre em dimensões inferiores [205].

Especificamente, em materiais férmions pesados (HF), existem diversas teorias propondo que sistemas quase-bidimensionais ( $q2d$ ) têm um papel relevante na compreensão dos comportamentos anômalos na proximidade de uma instabilidade magnética. Nesse contexto, a teoria de ondas de spin [11, 40], assim como a descrição local quântica [36] conseguem uma resistividade quase-linear em relação à temperatura e um coeficiente de calor específico divergente logaritmicamente apenas se as flutuações de spin são consideradas  $q2d$ .

A hipótese de que estes materiais HF envolvem camadas desacopladas de spins motiva a busca de um mecanismo que possa gerar um ambiente quase-bidimensional para as flutuações do spin, embora o material seja tridimensional. O mecanismo frequentemente mencionado é a introdução de um parâmetro de anisotropia geométrica,  $\xi$  (que definiremos na seção 5.3). A idéia baseia-se em que, ligando um *hopping* entre planos,  $t_{\perp}$ , obtém-se um ordenamento de longo alcance a temperatura finita. Neste capítulo usamos a Hamiltoniana do modelo colar de Kondo (KNM) [35] como um modelo simples para estudar este raciocínio.

O objetivo principal deste capítulo não é examinar se o acoplamento entre planos,  $t_{\perp}$ , é relevante ou não na proximidade de um QCP, mas estudar se o parâmetro de anisotropia geométrica pode estabelecer um ambiente adequado, em que o acoplamento entre camadas seja suficientemente fraco para considerar o sistema quase-bidimensional em todas suas propriedades.

O modelo colar de Kondo neste caso será escrito como,

$$\mathcal{H}_{cross} = t_{\parallel} \sum_{i, \delta_1} (\tau_i^x \tau_{i+\delta_1}^x + \tau_i^y \tau_{i+\delta_1}^y) + t_{\perp} \sum_{i, \delta_2} (\tau_i^x \tau_{i+\delta_2}^x + \tau_i^y \tau_{i+\delta_2}^y) + J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \tau_i, \quad (5.1)$$

onde  $\tau_i$  e  $\mathbf{S}_i$  são conjuntos independentes de operadores de Pauli de spin-1/2, representando os operadores de spin do elétron de condução e do momento localizado, respectivamente.  $\delta_1$  e  $\delta_2$  são as diferenças entre vetores da rede no plano e entre planos, respectivamente.  $t_{\parallel}$  é o hopping no plano e  $t_{\perp}$  o hopping entre eles. O último

termo é a interação magnética entre o spin do elétron de condução e o momento localizado via o acoplamento antiferromagnético,  $J > 0$ .

## 5.2 Aproximação Gaussiana

A aproximação Gaussiana, usando uma representação de spins em termos de operadores de enlace [16], é basicamente uma aproximação de acoplamento forte em  $J$ . Os spins entre camadas em sua maioria formam singletos e a densidade de tripletos é “baixa” (sendo que esta suposição permitirá desprezar a interação tripleto-tripletto).

Para dois spins-1/2, como vimos na seção 3.2, Sachdev e Bhatt [16] introduziram quatro operadores, um singlete e três tripletos, para representar os quatro estados criados no espaço de Hilbert. Substituindo a representação de operadores de spin definido na Eq. (3.3) na Hamiltoniana dada pela Eq. (5.1) obtemos,

$$\mathcal{H}_{cross} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2$$

onde,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &= \frac{J}{4} \sum_i \left( -3s_i^\dagger s_i + t_{i,x}^\dagger t_{i,x} + t_{i,y}^\dagger t_{i,y} + t_{i,z}^\dagger t_{i,z} \right) \\ &\quad + \sum_i \mu_i \left( s_i^\dagger s_i + t_{i,x}^\dagger t_{i,x} + t_{i,y}^\dagger t_{i,y} + t_{i,z}^\dagger t_{i,z} - 1 \right), \\ \mathcal{H}_1 &= \frac{t_{\parallel}}{4} \sum_{i,\delta_1;\alpha} \left( s_i^\dagger s_{i+\delta_1}^\dagger t_{i,\alpha} t_{i+\delta_1,\alpha} + s_i^\dagger s_{i+\delta_1} t_{i,\alpha} t_{i+\delta_1,\alpha}^\dagger \right) \\ &\quad - \frac{t_{\parallel}}{4} \sum_{i,\delta_1;\alpha} \left( t_{i,z}^\dagger t_{i+\delta_1,z}^\dagger t_{i,\alpha} t_{i+\delta_1,\alpha} - t_{i,z}^\dagger t_{i+\delta_1,z} t_{i,\alpha} t_{i+\delta_1,\alpha}^\dagger + h.c. \right), \\ \mathcal{H}_2 &= \frac{t_{\perp}}{4} \sum_{i,\delta_2;\alpha} \left( s_i^\dagger s_{i+\delta_2}^\dagger t_{i,\alpha} t_{i+\delta_2,\alpha} + s_i^\dagger s_{i+\delta_2} t_{i,\alpha} t_{i+\delta_2,\alpha}^\dagger \right) \\ &\quad - \frac{t_{\perp}}{4} \sum_{i,\delta_2;\alpha} \left( t_{i,z}^\dagger t_{i+\delta_2,z}^\dagger t_{i,\alpha} t_{i+\delta_2,\alpha} - t_{i,z}^\dagger t_{i+\delta_2,z} t_{i,\alpha} t_{i+\delta_2,\alpha}^\dagger + h.c. \right), \end{aligned} \quad (5.2)$$

sendo  $\alpha = x, y$ .  $\mathcal{H}_0$  representa a interação entre os spins  $S, \tau$  no sítio  $i$ , e a condição de única ocupação,  $s^\dagger s + t_{i,x}^\dagger t_{i,x} + t_{i,y}^\dagger t_{i,y} + t_{i,z}^\dagger t_{i,z} = 1$ , é introduzida através do potencial químico local  $\mu_i$ .  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$ , são termos associados com o hopping paralelo  $t_{\parallel}$  e perpendicular  $t_{\perp}$ , respectivamente. Como argumentamos no capítulo 4 as interações tripleto-tripletto não serão levadas em conta.

### 5.3 Fase ordenada antiferromagnética

Para estudar a fase antiferromagnética procedemos como na sub-seção 4.4.5, tomando  $\langle s_i^\dagger \rangle = \langle s_i \rangle = \bar{s}$  e  $t_{\mathbf{k},x} = \sqrt{N\bar{t}}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{Q}} + \eta_{\mathbf{k},x}$ , que descreve a condensação do tripleto  $t_{\mathbf{k},x}$  no vetor recíproco AF  $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a, \pi/a)$  em três dimensões, e onde  $a$  é o espaçamento da rede.  $\bar{t}$  representa o valor médio do tripleto- $x$  no estado fundamental e  $\eta_{\mathbf{k},x}$  sua flutuação. Utilizando aproximações similares às do capítulo 4, a Hamiltoniana efetiva neste caso é dada como,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{mf} = & N \left( -\frac{3}{4}J\bar{s}^2 + \mu\bar{s}^2 - \mu \right) + \left( \frac{J}{4} + \mu \right) \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k},z}^\dagger t_{\mathbf{k},z} \\ & + \left( \frac{J}{4} + \mu - \frac{1}{2}\bar{s}^2(t_{\parallel}Z_{\parallel} + t_{\perp}Z_{\perp}) \right) N\bar{t}^2 \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \left[ \Lambda_{\mathbf{k}}\eta_{\mathbf{k},x}^\dagger\eta_{\mathbf{k},x} + D_{\mathbf{k}} \left( \eta_{\mathbf{k},x}^\dagger\eta_{-\mathbf{k},x}^\dagger + \eta_{\mathbf{k},x}\eta_{-\mathbf{k},x} \right) \right] \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \left[ \Lambda_{\mathbf{k}}t_{\mathbf{k},y}^\dagger t_{\mathbf{k},y} + D_{\mathbf{k}} \left( t_{\mathbf{k},y}^\dagger t_{-\mathbf{k},y}^\dagger + t_{\mathbf{k},y}t_{-\mathbf{k},y} \right) \right], \end{aligned} \quad (5.3)$$

onde  $\Lambda_{\mathbf{k}} = \omega_0 + 2D_{\mathbf{k}}$ ,  $\lambda(\mathbf{k})_{\parallel} = \cos k_x + \cos k_y$ ,  $\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{4}t_{\parallel}\bar{s}^2\lambda(\mathbf{k})_{\parallel}$ ,  $\lambda(\mathbf{k})_{\perp} = \cos k_z$ ,  $\Delta'_{\mathbf{k}} = \frac{1}{4}t_{\perp}\bar{s}^2\lambda(\mathbf{k})_{\perp}$ , e  $D_{\mathbf{k}} = \Delta_{\mathbf{k}} + \Delta'_{\mathbf{k}}$ .  $N$  é o número de sítios da rede,  $Z_{\parallel} = 4$  o número total de vizinhos próximos em cada plano e  $Z_{\perp} = 2$  o número de vizinhos próximos entre planos. Consideramos uma rede cúbica por simplicidade. Os vetores de onda  $\mathbf{k}$  são tomados na primeira zona de Brillouin e assumimos o espaçamento da rede igual a  $a = |\mathbf{a}| = 1$ .

Para calcular a energia livre nesta fase antiferromagnética procedemos como no capítulo 4, e assim obtemos os propagadores adequados para este caso,

$$\ll \gamma_{\mathbf{k},\alpha}; \gamma_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger \gg_\omega = \frac{1}{2\pi} \frac{\omega + \Lambda_{\mathbf{k}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2}, \quad \ll t_{\mathbf{k},z}; t_{\mathbf{k},z}^\dagger \gg_\omega = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\omega - \omega_0}, \quad (5.4)$$

onde  $\gamma = \eta, (t)$  para  $\alpha = x, (y)$ . Os pólos destes propagadores dados pela Eq. (5.4) determinam as energias do sistema como,  $\omega_0 = (\frac{J}{4} + \mu)$ , que representa o espectro de excitação sem dispersão do estado tripleto longitudinal. Por outro lado,  $\omega_{\mathbf{k}} = \pm \sqrt{\Lambda_{\mathbf{k}}^2 - (2D_{\mathbf{k}})^2}$  corresponde ao espectro de excitações dos estados tripletos transversais,  $\omega_x$  e  $\omega_y$ . Assim, a contribuição do tripleto  $t_{Q,x}$  para a energia livre dependerá somente do valor médio  $\bar{t}$ . Consequentemente, os propagadores para ambos  $\alpha = x$  e  $y$  serão os mesmos.

Resolvendo as equações acopladas de movimento obtidas dos propagadores dados pela Eq. (5.4), obtemos a energia interna nesta fase antiferromagnética  $U$ , como

$$U = \langle \mathcal{H}_{mf} \rangle = \varepsilon_0 + \frac{\omega_0}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left( \coth \frac{\beta\omega_0}{2} - 1 \right) + \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \left( \coth \frac{\beta\omega_{\mathbf{k}}}{2} - 1 \right), \quad (5.5)$$

onde

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 &= N \left( -\frac{3}{4} J \bar{s}^2 + \mu \bar{s}^2 - \mu \right) \\ &+ N \left( \frac{J}{4} + \mu - \frac{1}{2} \bar{s}^2 (t_{\parallel} Z_{\parallel} + t_{\perp} Z_{\perp}) \right) \bar{t}^2 + \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{\mathbf{k}} - \omega_0), \end{aligned} \quad (5.6)$$

é o estado fundamental antiferromagnético do sistema. Os termos  $\bar{s}$  e  $\bar{t}$  são os parâmetros de ordem singlete e tripleto, respectivamente,  $\beta = 1/k_B T$  onde  $k_B$  é a constante de Boltzman, e  $T$  a temperatura.

Considerando a energia interna,  $U$ , da Eq. (5.5) e a entropia de bósons,  $S$ , dada pela Eq. (4.12), a energia livre AF dada pela relação termodinâmica  $F = U - TS$  é representada como,

$$F = \varepsilon_0 - \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln[1 + n(\omega_{\mathbf{k}})] - \frac{N}{\beta} \ln[1 + n(\omega_0)], \quad (5.7)$$

onde novamente  $n(\omega) = \frac{1}{2} (\coth \frac{\beta\omega}{2} - 1)$  é o fator de ocupação dos bósons. Como o parâmetro  $\bar{s}$  é sempre diferente de zero [110, 111] e  $\bar{t} \neq 0$  na fase AF, minimizamos a energia livre dada pela Eq. (5.7) com respeito a  $\bar{t}$  com  $\partial F/\partial \bar{t} = 0$ , conseguindo  $\mu = t_{\parallel} \bar{s}^2/y - J/4$  e conseqüentemente,

$$\omega_{\mathbf{k}} = \frac{t_{\parallel} \bar{s}^2}{y} \sqrt{1 + y(\lambda(\mathbf{k})_{\parallel} + \xi \lambda(\mathbf{k})_{\perp})}, \quad (5.8)$$

onde definimos  $\xi = t_{\perp}/t_{\parallel}$  como o parâmetro adimensional de anisotropia geométrica e  $y = 1/(2 + \xi)$ . Calculamos os outros parâmetros  $\bar{s}^2 = \bar{s}^2(T)$  e  $\bar{t}^2 = \bar{t}^2(T)$  minimizando a energia livre dada pela Eq. (5.7) usando  $(\partial F/\partial \mu, \partial F/\partial \bar{s}) = (0, 0)$  e obtemos,

$$\begin{aligned} \bar{s}^2 &= 1 + \frac{J y}{t_{\parallel} 2} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{1 + y(\lambda(\mathbf{k})_{\parallel} + \xi \lambda(\mathbf{k})_{\perp})} \coth \frac{\beta\omega_{\mathbf{k}}}{2} - f(\omega_0), \\ \bar{t}^2 &= 1 - \frac{J y}{t_{\parallel} 2} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + y(\lambda(\mathbf{k})_{\parallel} + \xi \lambda(\mathbf{k})_{\perp})}} \coth \frac{\beta\omega_{\mathbf{k}}}{2} - f(\omega_0), \end{aligned} \quad (5.9)$$

onde  $f(\omega_0) = \frac{1}{4} (\coth \frac{\beta\omega_0}{2} - 1)$ . Geralmente as relações para  $\bar{s}$  e  $\bar{t}$  na Eq. (5.9) deveriam ser resolvidas sendo que para  $\xi = 0$  ( $\xi = 1$ ) os resultados da referência [114] para  $2d$  ( $3d$ ) seriam recuperadas.

## 5.4 Linha crítica de Néel

A linha de Néel que separa a fase antiferromagnética da paramagnética é obtida no plano  $T$  versus  $(J/t_{\parallel})$  no qual  $\bar{t}$  desaparece ( $\bar{t} = 0$ ). Assim, da Eq. (5.9) temos,

$$\frac{J}{t_{\parallel}} = \frac{2}{y} \left( 1 - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + y(\lambda(\mathbf{k})_{\parallel} + \xi \lambda(\mathbf{k})_{\perp})}} \coth \frac{\beta\omega_{\mathbf{k}}}{2} + f(\omega_0) \right). \quad (5.10)$$

Esta Eq. (5.10) define a fronteira da fase antiferromagnética. Para  $J/t_{\parallel} > (J/t_{\parallel})_c$ , as excitações tripleto têm um gap de spin finito, e para  $J/t_{\parallel} < (J/t_{\parallel})_c$  o estado fundamental possui uma condensação de ambos, singletos e tripletos no vetor

de onda AF  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)$ . Assim, o QCP a  $T = 0$ ,  $J/t_{\parallel} = (J/t_{\parallel})_c$  separa uma fase ordenada AF de longo alcance de uma fase paramagnética tipo líquido de spin com um gap finito. A escala de energia, abaixo da qual as excitações tripleto condensam é dada pela temperatura de Néel ( $T_N$ ). Conseqüentemente, a relação para o QCP é encontrada fazendo-se  $T = 0$  na Eq. (5.10). Assim,

$$\left(\frac{J}{t_{\parallel}}\right)_c = \frac{2}{y} \left(1 - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + y(\lambda(\mathbf{k})_{\parallel} + \xi\lambda(\mathbf{k})_{\perp})}}\right), \quad (5.11)$$

onde  $y = 1/(2 + \xi)$  como definimos anteriormente. Como  $|g| = |(J/t_{\parallel})_c - (J/t_{\parallel})|$  mede a distância ao QCP, subtraindo a Eq. (5.11) da Eq. (5.10), obtemos,

$$|g| = \frac{1}{yN} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + y(\lambda(\mathbf{k})_{\parallel} + \xi\lambda(\mathbf{k})_{\perp})}} \left(\coth \frac{\beta\omega_{\mathbf{k}}}{2} - 1\right) + \frac{2f(\omega_0)}{y}. \quad (5.12)$$

Um resultado que relaciona a dimensão, o parâmetro de anisotropia  $\xi$ , a temperatura  $T$ , e a distância ao ponto crítico quântico  $|g|$ , expressão fundamental para a análise próxima de uma instabilidade magnética.

### 5.4.1 Resultados numéricos a $T = 0$

O objetivo é encontrar a fronteira da fase antiferromagnética a temperatura nula. Para isto, calculamos como o QCP varia de  $2d$  para  $3d$ , i.e., quando ligamos o parâmetro de anisotropia  $\xi$ . Começamos por avaliar, para diferentes valores de  $\xi$ , o ponto crítico quântico definido pela Eq. (5.11). Para este propósito, primeiramente consideramos o caso bidimensional,  $\xi = 0$ , onde  $t_{\parallel} = t$  e  $t_{\perp} = 0$ , e o caso tridimensional, i.e.,  $\xi = 1$  com  $t_{\parallel} = t_{\perp} = t$ . Com isto, obtemos  $(J/t)_c \approx 1.4409$  no caso bidimensional e  $(J/t)_c \approx 2.6611$  no caso tridimensional. Resultados em concordância com os obtidos no KNM [110], como também no KLM [111].

Na Fig. (5.1) mostramos o acoplamento  $(J/t_{\parallel})_c$  versus o parâmetro de anisotropia  $1 - \xi$  para diferentes valores de  $\xi \in [0, 1]$ . O desenho no interior mostra a

figura log-log da distância ao ponto crítico quântico  $g$  versus o parâmetro de anisotropia  $\xi$  próxima do ponto crítico quântico bidimensional,  $2d$ -QCP, para  $\xi \in [0, 0.1]$ ,  $g = |(J/t_{\parallel})_c - (J/t_{\parallel})_{c2d}|$  e  $(J/t_{\parallel})_{c2d} \approx 1.4409$ . A linha ajustada produz  $g \propto \xi^{1.8}$ .

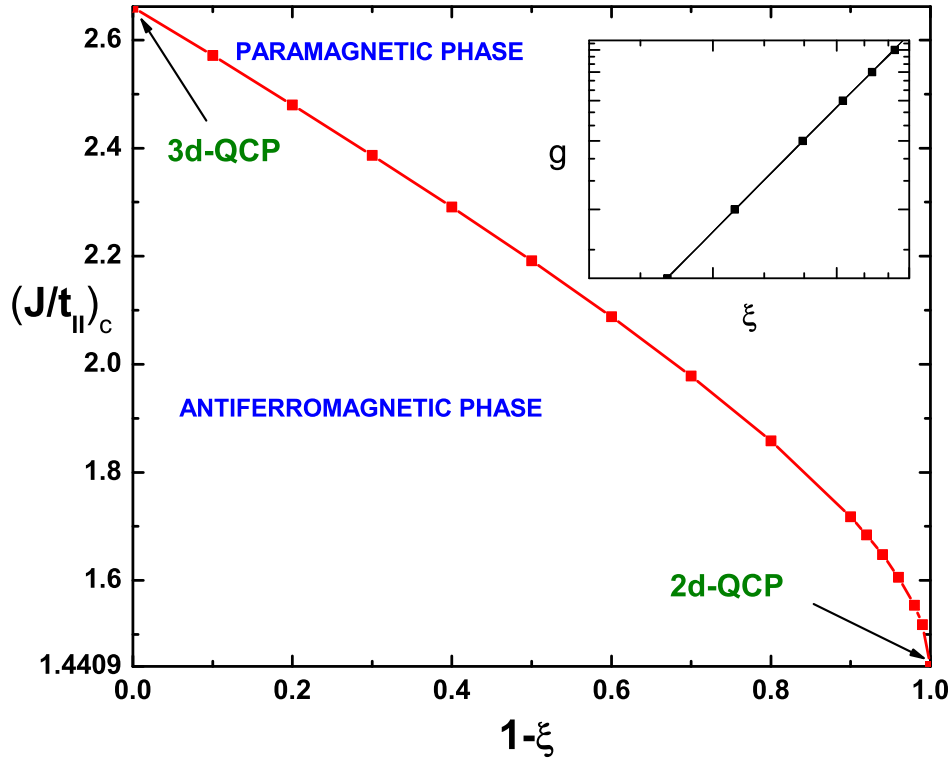


Figura 5.1: Diagrama de fases a temperatura nula,  $(J/t_{\parallel})_c$  versus o parâmetro de anisotropia  $1 - \xi$ , mostrando a linha de transição entre as fases paramagnética e antiferromagnética. Também é mostrado o ponto crítico quântico bidimensional,  $2d$ -QCP  $\approx 1.4409$  e tridimensional  $3d$ -QCP  $\approx 2.6611$ . Os pontos que formam a fronteira AF foram obtidos resolvendo a Eq. (5.11). O desenho no interior mostra a figura log-log da distância ao ponto crítico quântico  $g$  versus o parâmetro de anisotropia  $\xi$  próximo de  $2d$ -QCP para  $\xi \in [0, 0.1]$ , com  $g = |(J/t_{\parallel})_c - (J/t_{\parallel})_{c2d}|$  e  $(J/t_{\parallel})_{c2d} \approx 1.4409$ . A linha ajustada produz  $g \propto \xi^{1.8}$ . Figura reproduzida da referência [115].



## 5.5 Resultados analíticos a temperatura finita

Aqui calculamos analiticamente a linha crítica de Néel, para o caso quase-bidimensional ( $\xi \ll 1$ ) e o caso quase-tridimensional ( $\xi \approx 1$ ). O caso  $\xi \gg 1$ , que corresponde a uma dimensão será mostrado somente para dar continuidade a nossa análise. Como na seção 4.4.4, consideramos duas aproximações essenciais: (i) o sistema está próximo de uma instabilidade magnética, (ii) a região de temperaturas onde encontraremos a temperatura de Néel será inferior à escala de energia dada pela temperatura Kondo ( $T_K$ ).

Expandindo o vetor de onda  $\mathbf{k}$  próximo do vetor de onda recíproco  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)$  como  $\mathbf{k} = \mathbf{q} + \mathbf{Q}$  associado com a instabilidade antiferromagnética obtemos,

$$\begin{aligned}\lambda(\mathbf{q})_{\parallel} &= -2 + \frac{q_{\parallel}^2}{2} + O(q_{\parallel}^4), \\ \lambda(\mathbf{q})_{\perp} &= -1 + \frac{q_z^2}{2} + O(q_z^4),\end{aligned}\tag{5.13}$$

isto produz o espectro das excitações tripleto transversais como,

$$\omega_{\mathbf{q}} = \omega_0 \sqrt{1 + y(\lambda(\mathbf{q})_{\parallel} + \xi \lambda(\mathbf{q})_{\perp})} \approx \omega_0 \sqrt{\frac{y}{2}(q_{\parallel}^2 + \xi q_z^2)},\tag{5.14}$$

onde  $\omega_0$  é o espectro de excitação longitudinal sem dispersão. Substituindo a Eq. (5.14) na Eq. (5.12) e considerando que, para temperaturas  $k_B T \ll \omega_0$ ,  $f(\omega_0)$  pode ser desconsiderado obtemos,

$$|g| \frac{y}{2} = \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} \frac{q_{\parallel} dq_{\parallel} dq_z}{\sqrt{\frac{y}{2}(q_{\parallel}^2 + \xi q_z^2)}} \left( \coth \frac{\beta \omega_{\mathbf{q}}}{2} - 1 \right).\tag{5.15}$$

Para  $\xi = 0$ , a integral na Eq. (5.15) diverge, excluindo qualquer ordem de longo alcance a temperatura finita em duas dimensões, em concordância com o teorema de Mermim-Wagner [23]. Por outro lado, quando  $\xi = 1$ , a interação nos planos e o acoplamento entre planos são equivalentes ( $t_{\perp} = t_{\parallel}$ ), e temos o modelo tridimensional com  $T_N \propto \sqrt{|g|}$  como apresentado na referência [114].

### 5.5.1 Caso $\xi \ll 1$

Aqui mostramos analiticamente o aparecimento de uma linha de Néel quando um pequeno hopping  $t_\perp$  entre planos é ligado. Fazendo uma mudança de variáveis na Eq. (5.15) obtemos,

$$|g| = \frac{1}{y^2 \pi^2 \alpha} \int_0^\pi \left( \int_a^b (\coth u - 1) du \right) dq_z, \quad (5.16)$$

onde  $u = 2\alpha \sqrt{\frac{y}{2}(q_\parallel^2 + \xi q_z^2)}$ ,  $b = 2\alpha \sqrt{y(\pi^2 + \xi q_z^2)}/2$ ,  $a = 2\alpha \sqrt{\xi y/2} q_z$  e  $\alpha = \omega_0/4k_B T$ . Resolvendo a Eq. (5.16) considerando  $\xi \ll 1$  e temperaturas tal que  $k_B T \ll k_B T_K$  conseguimos,

$$|g|_{\xi \ll 1} = 2\sqrt{\xi} + \frac{4}{\pi \alpha} \left[ 1 - \ln \left( 2\pi \sqrt{\xi \alpha} \right) \right] + O(\xi), \quad (5.17)$$

onde fizemos  $y \approx (1 - \frac{\xi}{2})/2$ . O segundo termo no lado direito leva em conta as flutuações térmicas. A Eq. (5.17) dá a linha de Néel em função da distância ao QCP ( $|g|$ ) para um parâmetro de anisotropia  $\xi$  pequeno e temperaturas  $k_B T \ll \omega_0$ . Como dito anteriormente,  $\omega_0$  é semelhante à escala de energia determinada pela temperatura de Kondo  $T_K$ . Observamos também na Eq. (5.17) que  $|g|$  diverge para  $\xi = 0$ , portanto, não existe linha de transição a temperatura finita para duas dimensões. Quando a dimensão do sistema é  $d > 2$ , existe uma transição de fase a temperatura finita.

Na Fig. (5.2) mostramos o diagrama de fases  $\alpha_c^{-1} = 4k_B T_N/\omega_0$  como uma função do parâmetro  $J/t_\parallel$  para diferentes valores de  $\xi = 0.002, 0.006, 0.01, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.1$ .  $\alpha_c^{-1}$  é definido como a temperatura de Néel na qual a fase antiferromagnética aparece. Observamos um fenômeno de *reentrância* que será discutido separadamente. Próximo do ponto crítico quântico tridimensional ( $3d$ -QCP) o sistema não apresenta este comportamento.

Contudo, ajudados pelos cálculos numéricos e analíticos das sub-seções 5.4.1 e 5.5.1, respectivamente, podemos construir o diagrama de fases  $\alpha_c^{-1}$  versus  $J/t_\parallel$

versus  $1 - \xi$  para valores do parâmetro de anisotropia próximos de zero  $\xi \ll 1$ . Isto é mostrado na Fig. (5.3), na qual a fronteira a  $T = 0$  foi calculada usando a Eq. (5.11) e as linhas de Néel usando a Eq. (5.17).

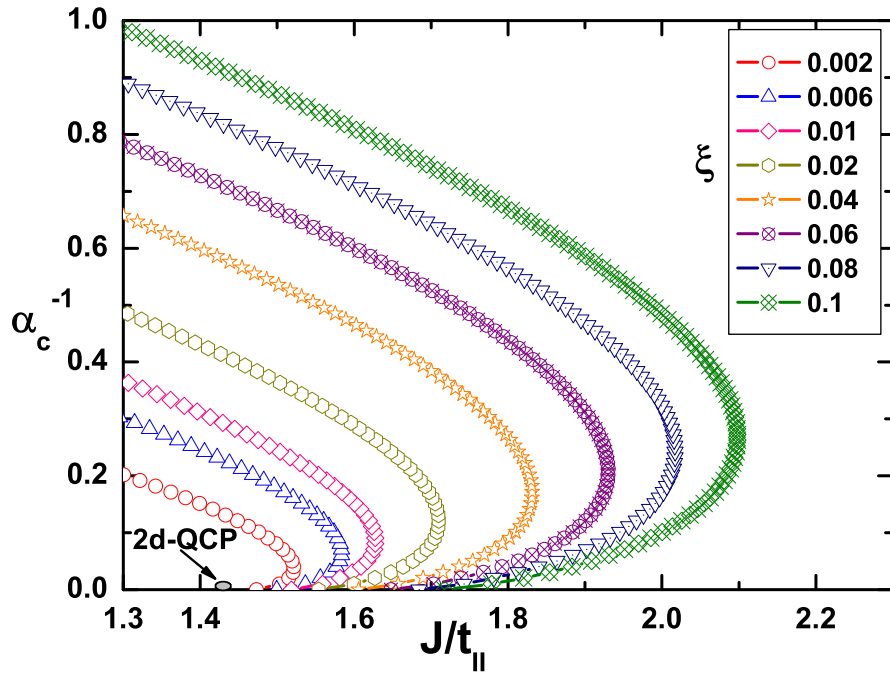


Figura 5.2: Diagrama de fases entre a temperatura como  $\alpha_c^{-1} = 4k_B T_N / \omega_0$  e  $J/t_{\parallel}$  para valores do parâmetro de anisotropia  $\xi = 0.002, 0.006, 0.01, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.1$ . Observamos que a linha de Néel surge ao ligar o hopping entre planos  $t_{\perp}$ , por mais ínfimo que este seja, e aumenta com  $\xi$ . Mostra-se também o ponto crítico quântico em duas dimensões (*2d-QCP*) quando  $\xi = 0$ . A característica interessante deste diagrama de fases está no comportamento reentrante para  $0.002 \leq \xi \leq 0.1$ . Quando a temperatura é diminuída, o sistema passa da fase paramagnética desordenada para a fase ordenada anti-ferromagnética, e volta para a fase desordenada quando a temperatura é diminuída mais ainda. Figura reproduzida da referência [115].

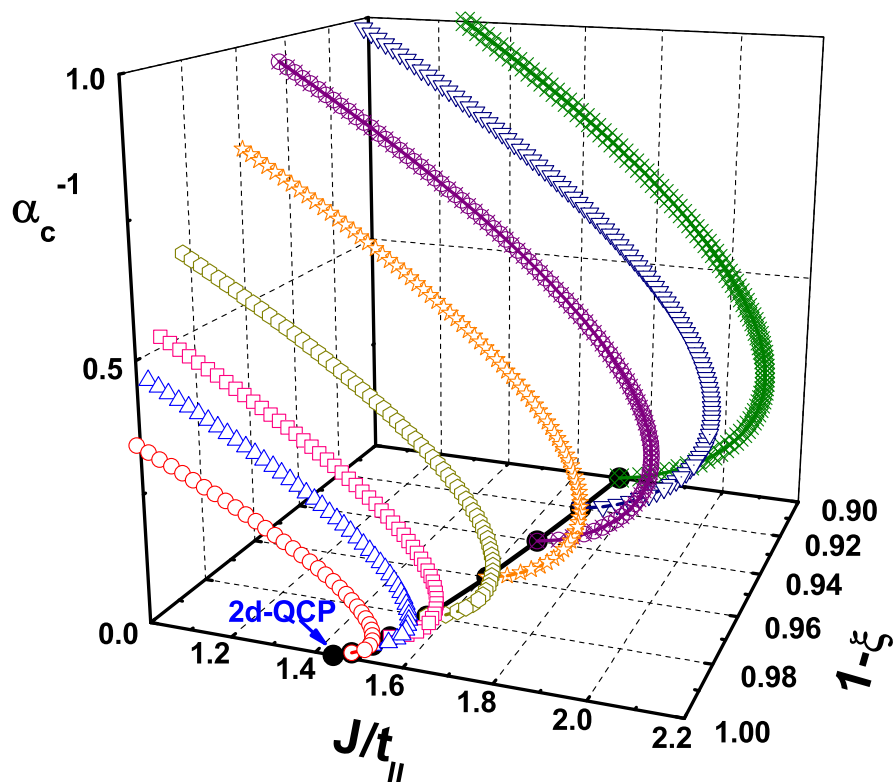


Figura 5.3: Diagrama de fases mostrando a temperatura crítica de Néel como  $\alpha_c^{-1} = 4k_B T_N / \omega_0$  versus  $J/t_{\parallel}$  e o parâmetro de anisotropia  $1 - \xi$ . Observamos que a temperatura de Néel aumenta rapidamente quando  $\xi$  cresce desde zero. Isto mostra que um acoplamento fraco entre planos,  $t_{\perp}$ , é suficiente para destruir o caráter bidimensional da transição de fase quântica. Quando a dimensão do sistema é ligeiramente maior que dois, existe uma transição de fase a temperatura finita. Figura reproduzida da referência [115].

## Reentrância no caso quase-bidimensional

Comportamento reentrante tem sido encontrado em uma variedade de sistemas na matéria condensada [212, 213, 214, 215, 216, 217, 218]. Este fenômeno é caracterizado pela reaparição de uma fase menos ordenada, após uma fase mais ordenada quando a temperatura é diminuída. Para cada sistema físico existe um mecanismo distinto que determina este comportamento.

Este fenômeno também acontece, como mostramos neste estudo, no diagrama de fases do modelo colar de Kondo quase-bidimensional. Ao menos, como indicado usando uma aproximação Gaussiana, com uma representação dos operadores de spin em operadores de enlace.

Basicamente, a reentrância pode ser produzida pelo incremento da entropia devido a desordem do sistema ou, pela presença de graus de liberdade adicionais. Em função das aproximações propostas neste capítulo, isto pode ser explicado como devido à competição entre os estados singletos e tripletos. De fato, a energia interna no caso antiferromagnético provém da contribuição dos condensados singlete e tripleto. Entretanto, a contribuição para a entropia a baixas temperaturas é essencialmente devida aos tripletos. Começando da fase desordenada com temperaturas  $T > T_N$ , as flutuações descorrelacionadas, i.e., os singletos, são as que determinam a termodinâmica e a entropia do modelo. Quando a temperatura é diminuída, próxima de  $T_N$ , a energia livre e a entropia competem, e as flutuações correlacionadas afetam significativamente o domínio da fase paramagnética e antiferromagnética. Se a temperatura é diminuída mais ainda, a entropia, que é devida aos tripletos, é mínima comparada com a energia livre composta somente de condensados singletos. Assim, o sistema passa de novo à fase desordenada com um estado fundamental como produto de singletos. Este fenômeno reentrante não tem sido observado experimentalmente nos compostos de férmions pesados que estudamos teoricamente nesta tese,

assim, esperamos que nosso estudo estimule posteriores experimentos que verifiquem este comportamento.

### 5.5.2 Caso $\xi \approx 1$

Calculamos agora a linha de Néel para o modelo colar de Kondo quase-tridimensional. Para este propósito é suficiente considerar,

$$\xi = 1 - \epsilon, \quad (5.18)$$

onde  $\epsilon$  é um parâmetro adimensional que controla a anisotropia geométrica neste caso. Próximo a  $3d$  o parâmetro de anisotropia será  $\xi \approx 1$ , desse modo  $\epsilon \ll 1$ . Portanto, trabalhando como na sub-seção anterior 5.5.1, usando a Eq. (5.15) e a Eq. (5.18) obtemos,

$$|g|_{\xi \approx 1} = \frac{\sqrt{6}}{8} \frac{1}{\alpha^2} (3 - \epsilon + O(\epsilon^2)). \quad (5.19)$$

A relação acima dada pela Eq. (5.19) mostra que a linha de Néel do modelo colar de Kondo quase-tridimensional ( $\xi \approx 1$ ) é somente renormalizada pelo parâmetro  $\epsilon = 1 - \xi$ . Portanto, quando  $\epsilon = 0$  ( $\xi = 1$ ) a interação nos planos é igual ao hopping entre planos ( $t_{\perp} = t_{\parallel}$ ) e recuperamos a expressão da linha de Néel em  $3d$  como na referência [114].

A Fig. (5.4) mostra a linha de Néel próxima do ponto crítico quântico  $3d$ -QCP para  $\xi = 0.9, 0.99, 1$ . O desenho no interior mostra a figura log-log de  $\alpha_c^{-1}$  versus  $J/t_{\parallel}$ . A linha de Néel escala como  $T_N \sim |g|^{\psi}$  com  $\psi \approx 0.5$ . Concluimos que, no modelo colar de Kondo quase-tridimensional a linha de Néel existe e vai a zero como  $T_N \propto \sqrt{|g|}$ . Um comportamento típico de campo médio, desde que a aproximação Gaussiana é basicamente uma aproximação de campo médio, porém, dependente da dimensão do sistema.

### 5.5.3 Caso $\xi \gg 1$

Visando dar continuidade a nossa análise, devemos também considerar o caso  $\xi \rightarrow \infty$ , neste caso o acoplamento entre planos é grande ( $t_{\perp} \gg t_{\parallel}$ ). Usamos um procedimento similar ao da sub-seção anterior 5.5.1, porém onde a razão  $\xi = t_{\perp}/t_{\parallel}$  é considerada como um parâmetro muito grande. Assim, vemos que considerando  $\xi \rightarrow \infty$  na Eq. (5.15) a integral diverge, reafirmando que não existe ordem de longo alcance a temperatura finita no modelo colar de Kondo unidimensional [23].

Em conclusão, mostramos que um tratamento analítico conduz a uma relação entre a dimensão e a linha de Néel, que pode ser usada para entender melhor o papel da dimensão em sistemas eletrônicos fortemente correlacionados.

Em resumo, neste capítulo consideramos o modelo colar de Kondo com um parâmetro de anisotropia geométrica, a temperatura baixa e nula. Nossa motivação para este estudo foi determinar se existe uma região de “crossover” onde o parâmetro de anisotropia  $\xi = t_{\perp}/t_{\parallel}$  varia de  $\xi = 0$ , em duas dimensões, para  $\xi = 1$ , em três dimensões. Obtivemos a linha de Néel ligando o hopping entre planos  $t_{\perp}$  embora, em geral, a anisotropia geométrica seja um mecanismo muito frágil para desacoplar planos de spins e sempre será vencida pelas flutuações térmicas ou quânticas. No caso  $\xi \ll 1$ , encontramos um fenômeno reentrante no diagrama de fases. Este foi explicado com base na competição entre os estados singlete e tripleto. Nosso trabalho foi também motivado por sistemas de férmions pesados. Esses, são sistemas muito mais complexos que os isolantes de Kondo, considerando a aproximação Gaussiana utilizada aqui.

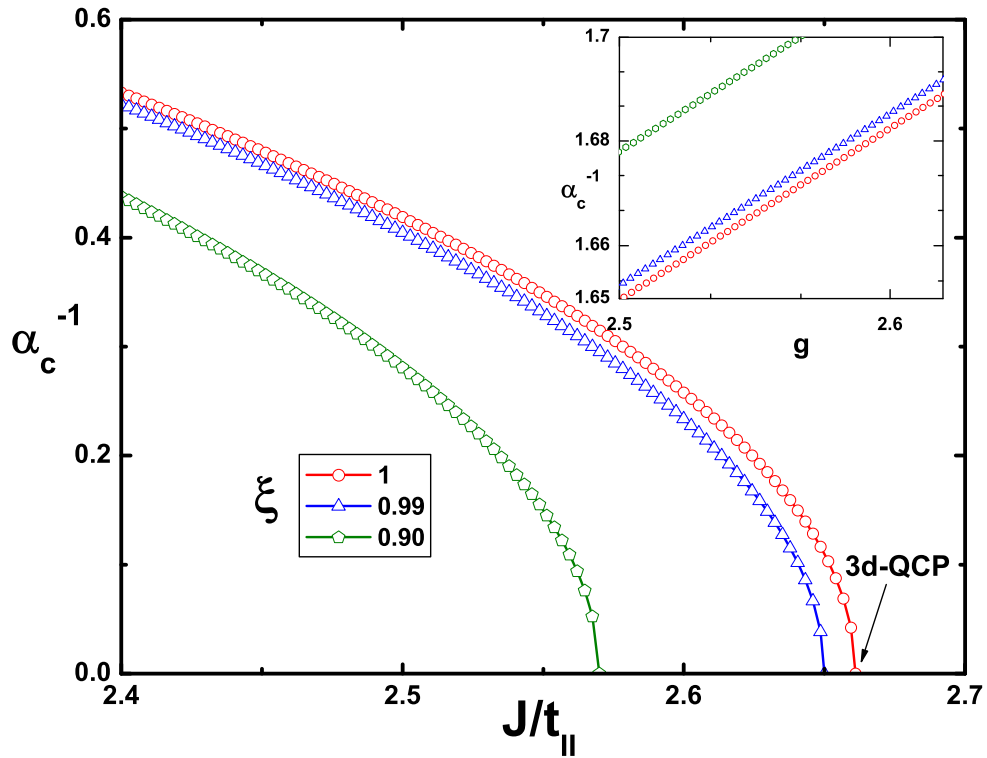


Figura 5.4: Diagrama de fases entre a temperatura como  $\alpha_c^{-1}4k_B T_N/\omega_0$  versus  $J/t_{||}$  para o parâmetro de anisotropia  $\xi \approx 1$ . Mostra-se também o ponto crítico quântico em três dimensões (3d-QCP) quando  $\xi = 1$ . Observamos que a linha de Néel somente é renormalizada quando o hopping entre planos é equivalente ao hopping entre planos,  $t_{\perp} \sim t_{||}$ . O desenho no interior mostra a figura log-log de  $\alpha_c^{-1}$  versus  $g$ . A linha de Néel escala como  $T_N \sim |g|^{\psi}$  com  $\psi \approx 0.5$  próximo do 3d-QCP. Figura reproduzida da referência [115].



# Capítulo 6

## Condensação Bose-Einstein de magnons

### 6.1 Introdução

No início da década de 1920, Satyendra Nath Bose estudando a nova idéia (nova naquela época) de que a luz não era senão pequenos pacotes discretos de energia (agora chamados “fótons”), assumiu certas regras para decidir quando os fótons deveriam ser contados como idênticos ou diferentes [219]. Estas regras foram chamadas de “Estatística de Bose”, desde que os fótons sejam tratados como partículas idênticas. Diante da impossibilidade de publicar este estudo, Bose apresentou a Einstein seu trabalho. Einstein generalizou a idéia para átomos e moléculas e predissera a existência de uma temperatura crítica, abaixo da qual todas as partículas estavam no estado fundamental, ou de mais baixa energia<sup>1</sup> [220]. Estes átomos idênticos juntando-se e formando um *super-átomo*, nos estados de mais baixa energia, foram

---

<sup>1</sup>O que as equações de Einstein predisseram foi que a temperatura ambiente os átomos estariam em muitos níveis diferentes. Porém, a temperaturas muito baixas, uma porção dos átomos repentinamente se lançaria na direção do nível de energia mais baixo.

chamados de condensado de Bose-Einstein<sup>2</sup>. Assim, a realização experimental deste novo comportamento da matéria promoveu um grande impulso, desde que a manifestação macroscópica da chamada natureza quântica da matéria<sup>3</sup> sempre foi um alvo dos físicos após o *nascimento* da mecânica quântica.

Em 1938, Kapitsa e colaboradores descobriram que o *Hélio-4* ( ${}^4\text{He}$ ) se transformava em um novo tipo de fluido, hoje conhecido como um superfluido, a temperaturas inferiores a 2.17 kelvin (K) (ponto lambda)<sup>4</sup>. Rapidamente percebeu-se que esta natureza superfluida era devida à Condensação Bose-Einstein (BEC, do inglês “Bose-Einstein Condensation”) dos átomos de  ${}^4\text{He}$ , que são bósons. No entanto, o superfluido  ${}^4\text{He}$  não é normalmente referido como um condensado de Bose-Einstein por ser líquido ao invés de gasoso, o que significa que as interações entre os átomos são relativamente fortes. A teoria original da condensação Bose-Einstein [221] teria que ser profundamente modificada para descrever este comportamento<sup>5</sup>.

O primeiro “verdadeiro” condensado de Bose-Einstein foi criado por Eric Cornell, Carl Wieman e colegas no JILA (Universidade de Colorado) em 5 de Junho de 1995 [8]. Isto foi conseguido resfriando um vapor diluído de aproximadamente 2000 átomos de *Rubídio-87* ( ${}^{87}\text{Rb}$ ), até atingir temperaturas menores que 170 nK (nanokelvin). Para isto, usaram uma combinação de resfriamento a laser (uma técnica que valeu aos seus inventores Steven Chu, Claude Cohen-Tannoudji, e William D. Phillips o Prêmio Nobel de Física em 1997) e resfriamento por evaporação magnética.

Quatro meses depois, um projeto independente conduzido por Wolfgang Ketterle no MIT (Massachusetts Institute of Technology) criou um condensado formado por *Sódio-23*, ( ${}^{23}\text{Na}$ ) [222]. O condensado de Ketterle era constituído por trezentas vezes

---

<sup>2</sup>Sendo que o condensado é para um gás ordinário aquilo que o laser é para a luz comum.

<sup>3</sup>Outras manifestações desta natureza são a supercondutividade e a superfluidêz do *Hélio-4*.

<sup>4</sup>Por esse trabalho os físicos Pyotr Kapitsa, John Allen e Don Misener ganharam o Prêmio Nobel de Física em 1978.

<sup>5</sup>Até nossos dias, as propriedades associadas com a fase superfluida do  ${}^4\text{He}$  não conseguiram ainda suporte teórico completo. Isto devido ao fato de que se trata de um problema de muitos corpos, sendo considerado um problema em aberto dentro da Física.

mais átomos, o que lhe permitiu obter vários resultados importantes, entre eles, a observação de interferência quantum-mecânica entre dois condensados diferentes. Cornell, Wieman e Ketterle ganharam o Prêmio Nobel de Física em 2001 por este trabalho.

No entanto, a condensação Bose-Einstein também foi introduzida para estudar quase-partículas em materiais sólidos. Em 1930, Bloch aplicou os mesmos conceitos desenvolvidos por Bose e Einstein para excitações em sólidos [223]. Em 1956, Matsubara e Matsuda assinalaram a correspondência entre um antiferromagneto quântico e uma rede gasosa de Bose [224]. Dessa maneira, a natureza bosônica (por obedecer à estatística de Bose) das quase-partículas em sólidos permitia pensar na possibilidade de condensação Bose-Einstein das excitações destas quase-partículas. Isto foi estudado teoricamente para vários antiferromagnetos quânticos [9, 107, 225, 226, 227, 228, 229, 230, 231, 232, 233]. Nestes sistemas de spins quânticos a densidade destas excitações pode ser controlada por um campo magnético externo, que desempenha o papel de “potencial químico” da excitação. Esta técnica permite o acesso a uma ampla faixa de densidades de bósons, desde o limite de um gás de Bose diluído até o de líquido de Bose fortemente correlacionado.

Este capítulo envolve assim, um estudo teórico de sistemas que possam apresentar BEC de excitações de spin (magnons) quando submetidos a um campo magnético a baixas temperaturas. Após termos descrito a teoria, fazemos uma análise de escala dos dados de magnetização do composto orgânico  $NiCl_2-4SC(NH_2)_2$ . Isto mostra excelente concordância com nossa análise usando teoria de escala, mostrando inequivocamente que este composto apresenta BEC induzido por um campo magnético externo aplicado na direção- $z$ .

## 6.2 Condensação Bose-Einstein de magnons induzida por campo magnético

A analogia entre spins e bósons é útil em antiferromagnetos onde pares de spins, cada um com spin-1/2, formam dímeros com um estado fundamental singlete (com spin total  $S = 0$ ) e com excitações bosônicas tripletos (com spin total  $S = 1$ ), chamadas na literatura de *triplons*<sup>6</sup>. Em 1999 a condensação Bose-Einstein das excitações tripletos foi predita nestes sistemas de dímeros [230]. Esta condensação foi observada experimentalmente no composto isolante  $TlCuCl_3$  [9, 234] a temperaturas tão altas quanto 14 K. Dessa maneira, começou uma busca incessante por novos compostos que apresentem este comportamento<sup>7</sup>.

É importante ressaltar que a BEC requer que a ordem de longo alcance seja formada no plano perpendicular ao campo magnético aplicado [235]. Uma consequência direta desta simetria é a existência de modos de Goldstone (magnons) na fase ordenada. Medidas de Espalhamento Inelástico de Nêutrons (INS, do inglês “Inelastic Neutron Scattering”), no composto  $TlCuCl_3$ , foram realizadas e mostraram a presença deste modo de Goldstone na fase ordenada [234]. No entanto, medidas de Ressonância de Spin Eletrônica (ESR, do inglês “Electron Spin Resonance”) revelaram um desvio significativo com respeito à simetria axial [236].

Outros exemplos de condensação de excitações elementares foi encontrado em filmes finos magnéticos [237], microcavidades semicondutoras [238],  $^3He$  [239, 240] e modelos para ferromagnetos [10, 241].

A Fig.(6.1) mostra um diagrama de fases esquemático, temperatura  $T_c(K)$  versus campo magnético como  $\mu H(T)$  (Teslas), para um sistema que apresenta condensação

<sup>6</sup>Um triplon é uma quase-partícula tripleto residindo no sítio de uma rede. Estes são similares às excitações magnéticas de um antiferromagneto, os chamados magnons, desde que ambos têm os mesmos números quânticos. O passo à fase ordenada é dado pelo vetor de onda no qual o gap desaparece e estes triplons condensam.

<sup>7</sup>Os bósons que condensam não são átomos senão graus de liberdade de spin do  $Cu$  ou  $Ni$ .

Bose-Einstein de magnons induzida por campo magnético. Mostra-se a fase paramagnética quântica, a fase antiferromagnética -XY que apresenta condensação das excitações tripletos (magnons), e a fase paramagnética saturada. As propriedades físicas na vizinhança dos campos magnéticos críticos  $H_{c1}$  e  $H_{c2}$  são as responsáveis pelo surgimento de excitações coletivas, os magnons.

Uma parte deste trabalho consiste em estudar mediante a teoria de escala, os expoentes críticos que governam a transição de fase, próximo do campo magnético de saturação  $H_{c2}$ , a temperatura nula. Como será descrito depois, a lei de escala que descreve a relação entre a temperatura de ordenamento ( $T_N$ ) na proximidade do ponto crítico quântico (QCP),  $H_{c2}$ , e a distância do QCP ( $H - H_{c2}$ ) segue o comportamento universal como lei de potência  $T_N \propto (H - H_{c2})^{2/3}$  em três dimensões.

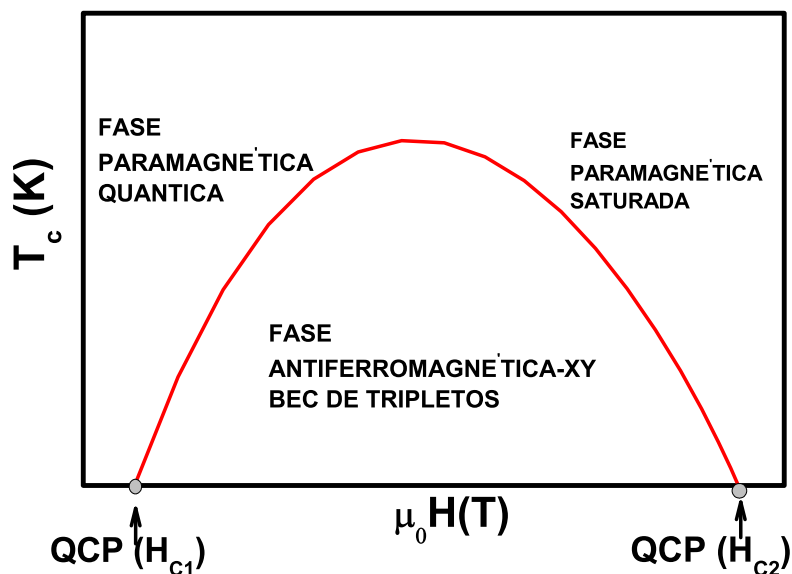


Figura 6.1: Diagrama de fases esquemático, temperatura como  $T_c(K)$  versus campo magnético como  $\mu H(T)$ , para um sistema que apresenta condensação Bose-Einstein de magnons induzida por campo magnético. Mostra-se a fase paramagnética quântica, a fase antiferromagnética-XY que apresenta condensação das excitações tripletos (magnons), e a fase paramagnética saturada. Mostra-se também, os pontos críticos quânticos  $QCP(H_{c1})$  e  $QCP(H_{c2})$  que limitam a fase antiferromagnética a temperatura nula.

### 6.2.1 O composto orgânico $NiCl_2-4SC(NH_2)_2$ (DTN)

Em 1991, Ian Affleck prediz que a condensação Bose-Einstein poderia acontecer em sistemas magnéticos quânticos, i.e., redes cristalinas contendo spins [229]. Experimentalmente, alguns sistemas de spins foram reportados como apresentando uma condensação Bose-Einstein de magnons. Entre estes sistemas temos,  $TlCuCl_3$  [9, 242, 243, 244, 245, 246, 247, 248, 249, 250, 251],  $BaCuSi_2O_6$  [252, 253, 254, 255],  $KCuCl_3$  [256, 257, 258],  $Cu_2(C_5H_{12}N_2)_2Cl_4$  [259, 260, 261],  $Cs_2CuCl_4$  [262, 263],  $Sr_2Cu(BO_3)_2$  [264], e  $NiCl_2-4SC(NH_2)_2$  [235, 265]. Nesta sub-seção estudaremos este último, o composto orgânico  $NiCl_2-4SC(NH_2)_2$  (dichloro-tetrakis thiourea-nickel (II), conhecido como DTN), desde que usaremos seus dados experimentais de magnetização para verificar nossos resultados teóricos. Este composto é um cristal tetragonal, pertencente ao grupo espacial  $I4$ , com duas moléculas por célula unitária. A estrutura cristalina básica do DTN é mostrada na Fig. (6.2). Medidas de INS a campo magnético nulo [235], indicam que o acoplamento antiferromagnético é muito forte ao longo da cadeia de spins  $Ni - Cl - Cl - Ni$ , no eixo tetragonal- $c$  (equivalente ao eixo- $z$ ). O parâmetro de troca neste caso é  $J_c = 1.74(3)$  K. No entanto, o acoplamento ao longo dos eixos  $a$  e  $b$  ( $a = b$ ), (equivalente aos eixos  $x$  e  $y$ , respectivamente),  $J_a = J_b = 0.17(1)$  K, é muito menor. Assim, a estrutura do composto DTN consiste de cadeias quase-unidimensionais de átomos de  $Ni$  que se ordenam tridimensionalmente entre os campos magnéticos  $H_{c1} = 2.1$  T e  $H_{c2} = 12.6$  T, para temperaturas inferiores a 1.2 K [235].

Inicialmente, foi estudada a susceptibilidade magnética do composto DTN, até um campo magnético de 7 T [267]. Este composto, sofre uma transição induzida por campo magnético, desde uma fase não magnética para uma fase antiferromagnética (AF) tipo-XY [268, 269]. Esta transição pode ser vista como uma condensação Bose-

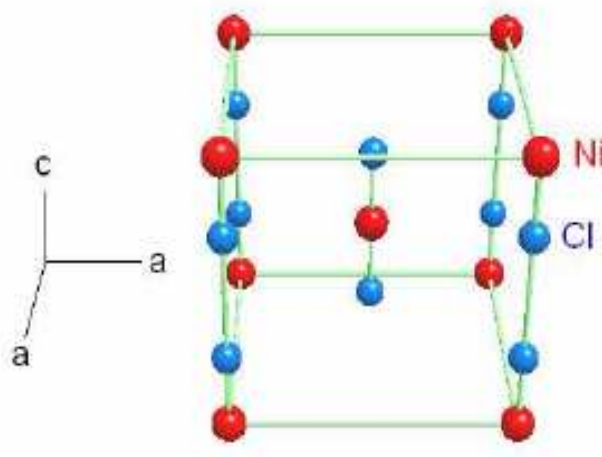


Figura 6.2: Célula unitária do composto orgânico tetragonal DTN, mostrando átomos de *Ni* (cor vermelho) e *Cl* (cor azul). Demais átomos foram omitidos para ter melhor clareza dos graus de liberdade relevantes. Figura reproduzida da referência [266].

Einstein de magnons associados com o grau de liberdade de spin-1 do *Niquel* (*Ni*)<sup>8</sup>, desde que a Hamiltoniana que descreva o sistema tenha simetria axial com respeito ao campo magnético aplicado [270]. De fato, a estrutura cristalina tetragonal deste composto, satisfaz a simetria axial requerida para a BEC acontecer.

Diversos trabalhos foram conduzidos visando corroborar a condensação Bose-Einstein de magnons neste composto, mediante varias técnicas experimentais. O calor específico e o efeito magnetocalórico foram computados usando a técnica de INS. O diagrama de fases resultante mostrou uma fase ordenada acontecendo entre os campos magnéticos  $H_{c1} \sim 2.1$  T e  $H_{c2} \sim 12.6$  T, com uma temperatura crítica máxima de  $T_c = 1.2$  K [235]. O diagrama de fases resultante é mostrado na Fig. (6.3).

Medidas experimentais da magnetização a diferentes temperaturas e campos magnéticos foram também coletados [269]. A curva magnetização versus campo

<sup>8</sup>O fato de que o composto orgânico DTN obedeça a estatística de Bose não é devido ao spin-1 do *Ni*. De fato, BEC foi predita teoricamente em sistemas de spin-1/2 [9], mas principalmente porque somente os graus de liberdade spin são os relevantes para explicar o magnetismo, enquanto que os átomos são confinados nos sítios da rede.

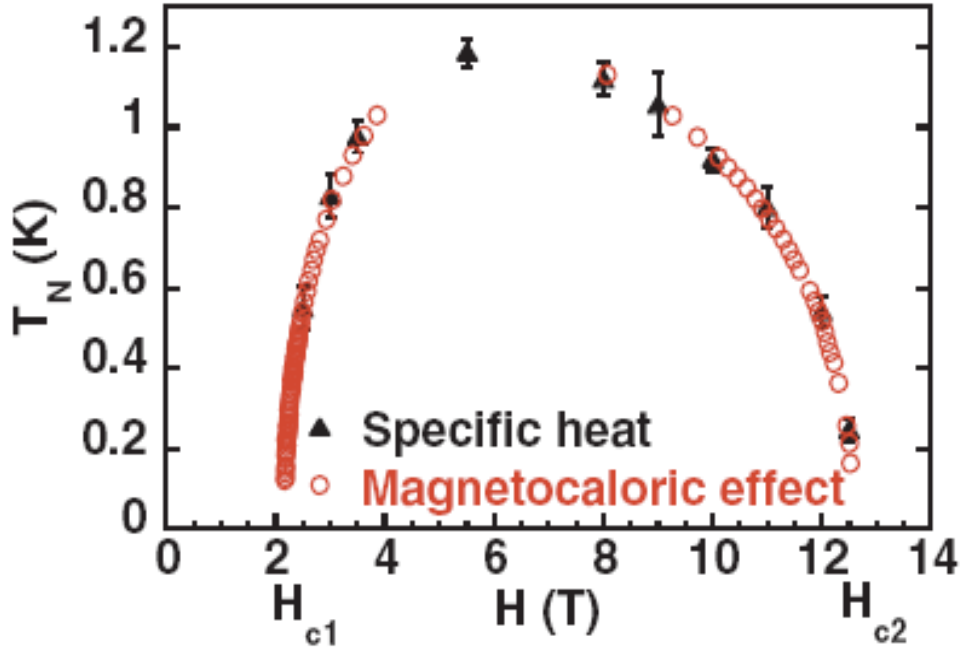


Figura 6.3: Diagrama de fases temperatura  $T_N$  (K) versus campo magnético  $H$  (T) para o composto orgânico  $NiCl_2-4SC(NH_2)_2$  (DTN) em três dimensões. Mostra-se dados coletados para o calor específico e o efeito magnetocalórico, sendo que estes descrevem a fronteira da fase antiferromagnética tipo-XY situada entre os campos magnéticos críticos  $H_{c1} \sim 2.1$  T e  $H_{c2} \sim 12.6$  T com uma temperatura crítica máxima de  $T_c = 1.2$  K. Nesta fase, uma condensação Bose-Einstein das excitações tripleto (magnons) do  $Ni$  com spin-1 acontece. Figura reproduzida da referência [235].

magnético para temperaturas  $T = 0.016, 0.60, 0.94$  K é esboçada na Fig. (6.5). Esta figura determina os campos magnéticos críticos  $H_{c1} \sim 2.1$  T e  $H_{c2} \sim 12.11$  T mediante a diferenciação numérica dos dados de magnetização, e são consistentes com os encontrados mediante INS. Para um campo magnético aplicado perpendicular ao eixo tetragonal,  $H \perp c$ , nenhuma transição é observada até  $H = 15$  T. Isto porque o campo magnético mistura o estado  $S_z = 0$  com uma combinação linear dos estados  $S_z = \pm 1$ , produzindo uma repulsão efetiva entre os níveis de energia.

O espectro de excitação no DTN foi estudado usando ESR a campos magnéticos até 25 T [265]. A magnetostricção foi também estudada neste composto para cam-



pos magnéticos até 18 T [266]. O diagrama de fases temperatura versus campo magnético obtida mediante estas medidas de efeito magnetocalórico é mostrado na Fig. (6.4).

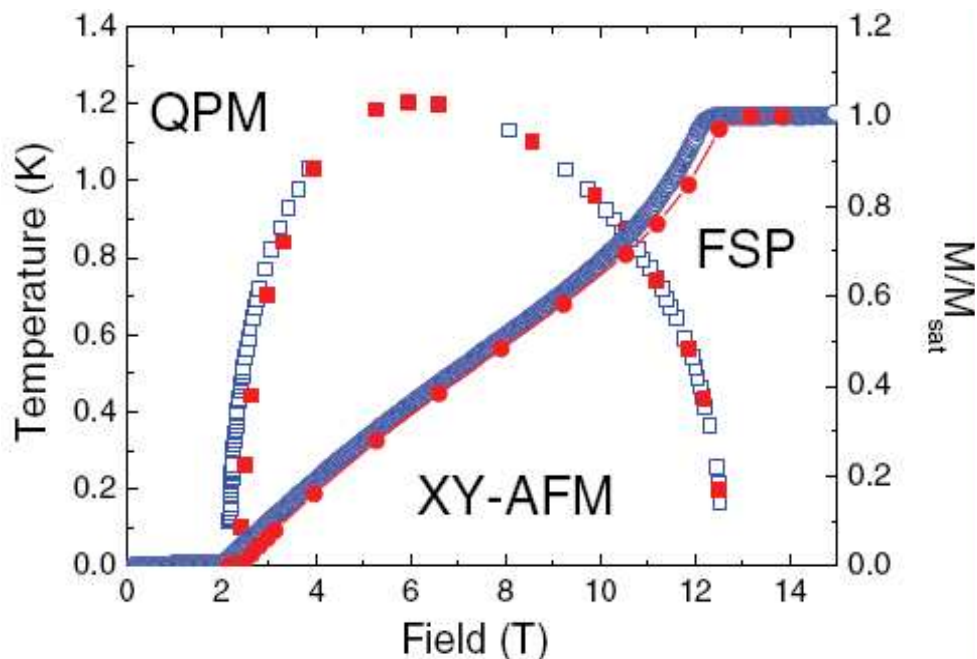


Figura 6.4: Diagrama de fases temperatura versus campo magnético do composto DTN, obtida mediante medidas de efeito magnetocalórico (como quadrados abertos). Mostra-se também medidas de magnetização como círculos separados cheios. Os dados foram coletados à temperatura  $T = 0.016$  K e com campo magnético  $H \parallel z$ . O diagrama de fases como resultado de cálculos usando a técnica de Monte-Carlo Quântico (QMC, do inglês “Quantum Monte-Carlo”) e a curva de magnetização dada pela referência [265] são esboçados como quadrados e círculos juntos cheios, respectivamente. QPM indica a fase paramagnética quântica, XY-AFM, a fase antiferromagnética tipo-XY e FSP, a fase paramagnética saturada. Figura reproduzida da referência [265].

Em resumo, estes trabalhos baseados no DTN, mostraram experimentalmente a existência de condensação Bose-Einstein das excitações elementares dos spins-1 do  $Ni$ .

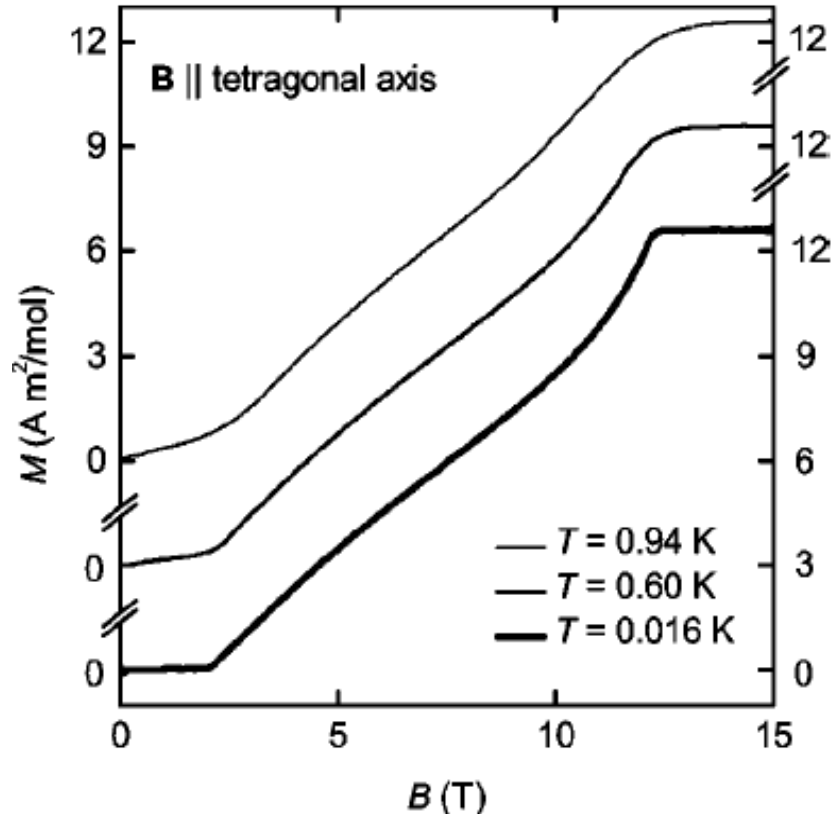


Figura 6.5: Figura da magnetização como  $M(Am^2/mol)$  versus campo magnético como  $B$  (T) do composto orgânico DTN para temperaturas  $T = 0.016, 0.60$  e  $0.94$  K. Esta figura determina os campos magnéticos críticos  $H_{c1} \sim 2.1$  T e  $H_{c2} \sim 12.11$  T mediante a diferenciação numérica dos dados de magnetização, e são similares aos encontrados mediante INS. Figura reproduzida da referência [269].

### 6.2.2 Níveis de energia do composto DTN

A temperatura nula, os níveis de energia deste composto DTN, com spin-1 do  $Ni$ , difere dos sistemas de  $Cu$  com spin-1/2 [9, 225]. No entanto, em ambos os casos existe um gap de spin finito na fase desordenada tipo líquido de spin. A anisotropia presente no íon  $D \sim 8$  K [267] desdobra os autoestados do spin-1 do  $Ni$  em um estado fundamental  $S_z = 0$  e nos estados excitados  $S_z = \pm 1$ . Estes níveis são separados por um acoplamento AF,  $J > 0$ , i.e., os spins podem tomar

diferentes valores de energia dependendo da orientação relativa de um em relação ao outro. Quando um campo magnético  $H$  na direção- $z$  é aplicado, a energia do gap de spin é diminuída e a energia Zeeman do estado tripleto  $S_z = 1$  é reduzida. Quando o campo magnético atinge um valor crítico,  $H = H_{c1}$ , este estado tripleto torna-se degenerado, com um estado fundamental  $S_z = 0$  e gap de spin nulo. Neste campo magnético crítico, as interações antiferromagnéticas dão origem a uma fase ordenada de longo alcance, e onde o estado fundamental de campo médio torna-se uma combinação linear dos três níveis de energia [103, 271, 272].

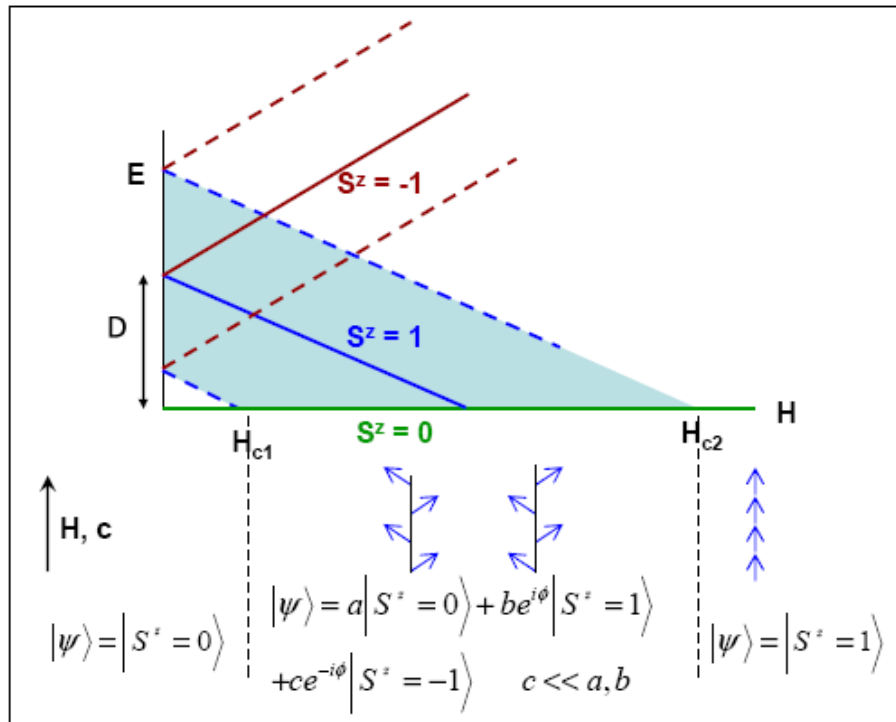


Figura 6.6: Diagrama dos níveis de energia do composto DTN. Os estados  $S_z = \pm 1$  são mostrados como separados devido à dispersão antiferromagnética. Para  $H < H_{c1}$ , os spins formam uma fase desordenada tipo líquido de spin com  $S_z = 0$ . Após  $H = H_{c1}$  e até o campo magnético  $H = H_{c2}$  os spins formam uma ordem antiferromagnética no plano perpendicular ao campo magnético aplicado ( $H \parallel c$ ). Finalmente, para campos magnéticos superiores a  $H_{c2}$  os spins se polarizam na direção do campo magnético aplicado. A função de onda do estado fundamental  $|\psi\rangle$  nessas três regiões é também indicada. Figura reproduzida da referência [266].

Experimentalmente, a magnetização  $M$  a temperaturas muito baixas começa a aumentar para campos superiores a um campo magnético crítico,  $H_{c1}$ , e eventualmente satura para campos superiores a um campo magnético chamado de saturação,  $H_{c2}$ . Isto pode ser visto na Fig. (6.5). Naturalmente, quando  $H_{c1} < H < H_{c2}$ , o sistema também sofre uma transição de fase a temperatura finita, no entanto, esta é qualitativamente diferente da transição de fase quântica (QPT). Na transição a temperatura finita, a ordem de longo alcance é suprimida pelas *flutuações de fase* do parâmetro de ordem, e o ponto crítico correspondente pertence a uma classe de universalidade tipo- $XY$ , em três dimensões. Por outro lado, para a QPT induzida por um campo magnético a temperatura nula, a ordem magnética é suprimida diminuindo a *amplitude* do parâmetro de ordem, e o respectivo QCP pertence à classe de universalidade do gás de bósons diluído, com dimensão efetiva  $d_{eff} = d + z$  [2]. Para campos magnéticos superiores a  $H_{c2}$  o sistema está na fase paramagnética polarizada, i.e., com todos os spins apontando na direção do campo magnético. O espectro de excitação é formado por magnons com um gap de spin finito e o estado fundamental corresponde ao nível de energia  $S_z = 1$  [235]. Esta transição será motivo de estudo na próxima seção 6.3.

### 6.3 Condensação Bose-Einstein de magnons próximo do campo magnético de saturação

A transição de fase em  $H_{c1}$  foi intensamente estudada, experimentalmente [9, 205, 235, 262, 268, 269] e teoricamente [100, 103, 273, 274, 275, 276], mostrando que esta transição é geralmente associada com uma condensação Bose-Einstein de magnons. A lei de escala que descreve a relação entre a temperatura de ordenamento ( $T_N$ ), na proximidade do ponto crítico quântico QCP- $H_{c1}$ , e a distância ao QCP ( $H - H_{c1}$ ), segue o comportamento universal em lei de potência  $T_N \propto (H - H_{c1})^\psi$ . No entanto, a classe de universalidade a que esta transição pertence ainda é um ponto controverso, com o expoente  $\psi$  encontrado experimentalmente entre 1.5 e 2 [233].

Estudos experimentais indicam que o valor de  $\psi$  depende do material, assim como das técnicas de medição [277]. Numericamente, esta controvérsia foi sinalizada em sistemas de spin-1/2 usando simulação Monte-Carlo Quântico [233]. Nesse estudo, o expoente  $\psi$  tem uma dependência com a temperatura, e o valor  $\psi = 2/3$ , em três dimensões, é obtido só assintoticamente [278]. Do lado teórico, uma ação efetiva para um gás diluído de bósons [270, 279] é suficiente para descrever as propriedades de alguns sistemas antiferromagnéticos a temperaturas próximas do zero absoluto. No entanto, outras propriedades necessitam considerar a segunda derivada temporal na ação efetiva que representa o sistema magnético [280]. Portanto, conjecturamos que exista um “crossover” a temperatura finita de uma classe de universalidade  $z = 1$  para outra com  $z = 2$  quando a temperatura é diminuída na vizinhança do ponto crítico quântico  $H_{c1}$ . O estudo deste crossover está em andamento [281].

A transição de fase induzida por campo magnético a temperatura  $T \rightarrow 0$ , como pertencendo a uma classe de universalidade com expoente dinâmico  $z = 1$ , está também em preparação [282]. Esta transição é desde uma fase paramagnética tipo líquido de spin para uma fase antiferromagnética tipo-XY. Em três dimensões,

este futuro estudo não pode excluir a possibilidade de correções logarítmicas nas propriedades físicas, próprias da dimensão crítica superior  $d_{uc} = d_{eff} = d + z = 4$ . A teoria quântica de campos será necessária para clarificar este ponto [178].

Por outro lado, a transição de fase em  $H_{c2}$ , vindo da fase paramagnética saturada para a fase antiferromagnética foi menos estudada [231, 233]. O composto orgânico DTN é um sistema ideal para investigar esta última transição, desde que as curvas de magnetização podem ser obtidas próximas do campo magnético de saturação  $H_{c2}$ . Ao contrário do composto DTN outros sistemas que apresentam condensação Bose-Einstein de magnons, como  $BaCuSi_2O_6$  e  $TlCuCl_3$ , foram extensamente estudados. Estes apresentam campos magnéticos de saturação de 49 T e 83 T, respectivamente, e são difíceis de serem alcançados por outro método que não seja usando campos magnéticos pulsados. A vantagem neste sistema DTN, são as excelentes curvas de magnetização versus campo magnético obtidas usando bobinas supercondutoras. Estas curvas serão essenciais para a análise de escala apresentada posteriormente.

Assim, nas próximas sub-seções estudamos e damos uma teoria microscópica para esta transição de fase quântica no campo de saturação  $H_{c2}$ . Uma aproximação Gaussiana é desenvolvida começando da fase paramagnética (PARA) saturada. Diminuímos a intensidade do campo magnético externo a temperatura nula até o valor crítico  $H_{c2}$  onde a componente transversal da magnetização condensa. Uma teoria de escala para esta transição foi proposta na referência [284]. Usamos esta teoria para identificar o tipo de universalidade ao qual pertence esta transição.

### 6.3.1 A Hamiltoniana

Por um longo tempo, o estado magneticamente ordenado e as excitações de baixa energia do modelo de Heisenberg quântico foram estudadas usando a aproximação de ondas de spin (ver [285] e referências). Isto é executado geralmente, representando as componentes dos operadores de spin situados nos sítios de uma rede em termos de operadores bosônicos canônicos,  $b_i^\dagger$  e  $b_i$ , usando a transformação de Holstein-Primakoff (H-P) [286], a transformação de Dyson-Maleev (D-M) [287, 288], ou a transformação de Schwinger (ST) [289]. Aqui, introduzimos uma aproximação Gaussiana, i.e., uma aproximação de campo médio dependente da dimensão do sistema, usando os operadores de enlace [16] estudados na seção 3.4. Usamos esta abordagem para estudar redes hiper-cúbicas de Heisenberg de spin-1 com uma anisotropia por íon, próximas do campo magnético de saturação,  $H_{c2}$ . Este método proporciona o diagrama de fases e o comportamento termodinâmico do modelo próximo de  $H_{c2}$ . Considerando o sistema tridimensional, ele dá uma exata descrição desta transição desde que a dimensão efetiva  $d_{eff} = d + z = 5$ , associada com o ponto crítico quântico, é maior que a dimensão crítica superior  $d_{uc} = 4$ , acima da qual a teoria Gaussiana é exata. A Hamiltoniana descrevendo o sistema magnético é

$$\mathcal{H} = \frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) + D \sum_i (S_i^z)^2 - H \sum_i S_i^z, \quad (6.1)$$

onde a soma é sobre todos os vizinhos mais próximos de uma rede hiper-cúbica  $d$ -dimensional com  $N$  sítios ocupados por spins-1.  $J > 0$  é o acoplamento de troca AF,  $D$  é a anisotropia por íon, e  $H$  o campo magnético aplicado na direção- $z$  ( $g\mu_B = 1$ ).

Em uma dimensão, a Hamiltoniana dada pela Eq. (6.1) foi estudada em conexão com a conjectura de Haldane [290, 291, 292]. Para  $D_{c1} (\sim -0.29) < D < D_{c2} (\sim 0.93)$ , o sistema está na fase de Haldane. Enquanto que, para  $D > D_{c3} (\sim 1.01)$  o sistema está na fase  $D$ -grande [293, 294], com um estado fundamental desordenado e um

gap de spin finito. A diferença entre esta fase  $D$ -grande e a fase de Haldane pode ser explicada devido a considerações de simetria [295]. A ordem de longo alcance, induzida por um campo magnético, em uma cadeia antiferromagnética de spin-1 foi estudada usando diagonalização exata [296].

Em dimensões maiores o sistema foi menos estudado. No caso de  $D = 0$ , o sistema está na fase de Néel [297] e quando  $J = 0$ , o sistema está na fase  $D$ -grande. Existe ainda um valor crítico  $D_c$  que representa a transição desde a fase  $D$ -grande para uma fase de Néel. Também, usando expansão de *cluster* acoplados, Wong *et al.* [298] obtiveram pontos críticos  $D_c$  em várias redes. Assim, este estudo proporciona uma contribuição importante para sistemas que sejam representadas pela Hamiltoniana (6.1), já que os parâmetros  $D$  e  $J$  são mostrados em nossos cálculos, e poderiam ser computados quantitativamente por técnicas numéricas ou por comparação com medidas experimentais.

### 6.3.2 Operadores de enlace para spin-1, próximo de $H_{c2}$

Partindo da representação em operadores de enlace para dois spins-1/2 [16], Wang e colaboradores obtiveram uma representação dos operadores de spin-1 da Hamiltoniana dada pela Eq. (6.1). Esta representação vem dada por [103, 122, 273],

$$\begin{aligned} S^+ &= \sqrt{2}(u^\dagger t_z + t_z^\dagger d), \\ S^- &= \sqrt{2}(t_z^\dagger u + d^\dagger t_z), \\ S^z &= u^\dagger u - d^\dagger d, \end{aligned} \tag{6.2}$$

onde os três operadores bosônicos,  $u$ ,  $d$ , e  $t_z$  correspondem aos três autoestados  $|\uparrow\uparrow\rangle = u^\dagger|0\rangle$ ,  $|\downarrow\downarrow\rangle = d^\dagger|0\rangle$ , e  $|\uparrow\downarrow\rangle = t_z^\dagger|0\rangle$ , respectivamente. Isto foi estudado na seção 3.4. Substituindo a representação dada pela Eq. (6.2) na Eq. (6.1) obtemos:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_3 + \mathcal{H}_4$$



onde,

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_0 &= D \sum_i \left( u_i^\dagger u_i - d_i^\dagger d_i \right)^2, \\
 \mathcal{H}_1 &= -H \sum_i \left( u_i^\dagger u_i - d_i^\dagger d_i \right), \\
 \mathcal{H}_2 &= - \sum_i \mu_i \left( u_i^\dagger u_i + d_i^\dagger d_i + t_{i,z}^\dagger t_{i,z} \right), \\
 \mathcal{H}_3 &= \frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left( u_i^\dagger u_i - d_i^\dagger d_i \right) \left( u_j^\dagger u_j - d_j^\dagger d_j \right), \\
 \mathcal{H}_4 &= \frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left( d_i^\dagger d_j t_{i,z} t_{j,z}^\dagger + d_i^\dagger u_j^\dagger t_{i,z} t_{j,z} + t_{i,z}^\dagger t_{j,z} u_i u_j^\dagger + t_{i,z}^\dagger t_{j,z}^\dagger u_i d_j + h.c. \right), \quad (6.3)
 \end{aligned}$$

onde introduzimos o potencial químico em cada sítio,  $\mu_i$ , para impor a condição de ocupação única. Resolvendo a Hamiltoniana dada pela Eq. (6.3) poderíamos obter a energia livre em qualquer região do diagrama de fases do sistema. Porém, por ser um problema de muitos corpos, é difícil obter uma expressão analítica para isto. Portanto, algumas aproximações serão necessárias de acordo com a região do diagrama de fases que desejamos estudar.

A temperatura nula e próximo do campo magnético de saturação,  $H_{c2}$ , a maioria dos bósons estão no estado  $u^\dagger|0\rangle$ . A componente de spin perpendicular ao campo magnético pode ser excluída e a componente paralela *condensa*, tal que  $u_i = u_i^\dagger = \bar{u}$ . Este mapeamento é exato para  $H > H_{c2}$  e a temperatura nula. Assim, a probabilidade do estado contrário à direção do campo magnético,  $d^\dagger|0\rangle$ , é estritamente zero. Dessa maneira, os spins estão totalmente alinhados com o campo magnético e apontando na direção- $z$ . Neste caso, a representação em operadores de enlace pode ser expressa como [299],

$$S^+ = \sqrt{2}\bar{u}t_z, \quad S^- = \sqrt{2}\bar{u}t_z^\dagger, \quad S^z = 1 - t_z^\dagger t_z, \quad (6.4)$$

onde usamos a restrição  $u_i^\dagger u_i + t_{i,z}^\dagger t_{i,z} = 1$ . O ordenamento magnético a partir de  $H = H_{c2}$  pode ser identificado como uma condensação Bose-Einstein da componente transversal dos spins, que dá origem a excitações coletivas chamadas de magnons.

### 6.3.3 Aproximação Gaussiana

Substituindo a Eq. (6.4) em Eq. (6.1) com  $S^\pm = S^x \pm iS^y$  e trocando de coordenadas atômicas para o espaço de momentos, i.e., tomando  $t_{i,z}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ik \cdot r_i} b_k^\dagger$  temos,

$$\mathcal{H}_{mf} = \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k + E_g, \quad (6.5)$$

onde,

$$E_g = N \left( \frac{JZ}{2} + D\bar{u}^2 - H - \mu\bar{u}^2 + \mu \right) \quad (6.6)$$

é a energia do estado fundamental do sistema próximo do campo magnético de saturação,  $H_{c2}$ . Aqui desconsideramos termos com operadores quárticos [106, 226]. Estes termos serão relevantes quando calcularmos a linha crítica de Néel, desde que estes termos representam a interação entre magnons, a qual é considerada como *perigosamente* irrelevante próxima da instabilidade magnética<sup>9</sup>.

A relação de dispersão das excitações para  $H > H_{c2}$  é dada por,

$$\omega_k = H - (D + \mu) - JZ(1 - \bar{u}^2 \gamma_k), \quad (6.7)$$

com  $\gamma_k = d^{-1} \sum_{\nu=1}^d \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\nu)$  e  $Z$  o número de vizinhos mais próximos. Por simplicidade, consideramos as condições de fronteira em uma rede hiper-cúbica  $d$ -dimensional com vetor de rede primitiva  $\mathbf{a}_\nu$  e espaçamento de rede  $a = |\mathbf{a}_\nu| = 1$ . O potencial químico  $\mu$ , juntamente com o outro parâmetro adimensional  $\bar{u}$ , podem ser calculados resolvendo equações auto-consistentes acopladas [103].

Para um campo magnético  $H$  ou uma temperatura  $T$  fixa, as quantidades termodinâmicas podem ser obtidas da energia interna  $U$ . Esta é dada como [112, 114],

$$U = \sum_k \omega_k \langle b_k^\dagger b_k \rangle + E_g, \quad (6.8)$$

---

<sup>9</sup>O conceito de variável perigosamente irrelevante é basicamente extraída da análise dos expoentes críticos próximo de uma instabilidade magnética, usando teoria de Grupo de Renormalização (GR). Uma revisão disto pode ser encontrada nas referências [300, 301].

onde  $n_k = \langle b_k^\dagger b_k \rangle = \frac{1}{2} (\coth \frac{\beta \omega_k}{2} - 1)$  é o fator de Bose, e  $E_g$  a energia do estado fundamental dada pela Eq. (6.6).

A sinal negativo de  $J$  na Eq. (6.7) leva em conta explicitamente a natureza antiferromagnética da interação de troca. Para redes hiper-cúbicas, o mínimo do espectro de onda de spin acontece em  $Q = (\pi/a, \pi/a, \pi/a)$  em três dimensões ( $3d$ ). Avaliando o espectro de excitação dado pela Eq. (6.7) para  $k = Q$  obtemos,

$$\omega_Q = H - (D + \mu) - JZ(\bar{u}^2 + 1). \quad (6.9)$$

Por outro lado, a condição  $\omega_Q \equiv 0$  define o campo magnético de saturação como,

$$H_{c2} = D + \mu + JZ(\bar{u}^2 + 1). \quad (6.10)$$

Para campos magnéticos inferiores ao campo magnético da Eq. (6.10), a energia da onda de spin torna-se negativa, sinalizando a entrada do sistema na fase AF.

Escrevendo  $k = Q + q$  e expandindo para pequenos valores de  $q$ , a relação de dispersão da onda de spin pode ser mostrada como,

$$\omega_q = (H - H_{c2}) + \mathcal{D}q^2, \quad (6.11)$$

onde a constante de rigidez (stiffness) da onda de spin a  $T = 0$  é dada por  $\mathcal{D} = J\bar{u}^2$ . Assim, a transição de fase quântica em  $H_{c2}$  tem um expoente dinâmico  $z = 2$  devido à relação de dispersão dos magnons tipo ferromagnética, apesar do caráter antiferromagnético das interações [284].

### 6.3.4 Propriedades físicas na trajetória crítica quântica ( $H = H_{c2}$ , $T \rightarrow 0$ )

Nesta sub-seção calculamos analiticamente as propriedades físicas do sistema, como magnetização, calor específico e susceptibilidade, na trajetória crítica quântica. Geralmente, as transições induzidas por um campo magnético estão associadas com modos moles. Assim, no QCP, onde o gap de excitação desaparece, as propriedades físicas tem uma dependência com a temperatura tipo lei de potência, quando  $T \rightarrow 0$ . Esta dependência é determinada pelos expoentes críticos quânticos. Nosso objetivo nesta sub-seção é obter este comportamento como lei de potência com respeito à temperatura. Isto foi explorado para sistemas que apresentam ordem induzida por um campo magnético externo, usando uma expansão dos acoplamentos entre spins [94, 302, 303]. Esta estratégia também foi explorada no estudo de materiais férmions pesados, neste caso, fixando a pressão em seu valor crítico para o desaparecimento de ordem magnética [33]. A aproximação é particularmente útil para materiais isolantes nos quais os magnons, que se tornam moles no QCP, descrevem o comportamento termodinâmico a baixas temperaturas. Em metais, ainda quando temos uma transição induzida por um campo magnético, temos que considerar também a contribuição das excitações provenientes do grau de liberdade de carga [65, 78, 304, 305, 306, 307]. Os modos moles acoplam-se a estas excitações e ambos devem estar fortemente renormalizados.

*Magnetização:* Próximo do campo magnético de saturação,  $H_{c2}$ , a dependência da magnetização com a temperatura deve seguir uma lei de potência [300]. Definimos a variação de magnetização por volume  $V$  como,

$$\Delta M = \frac{(M_{sat} - M)}{V} = \sum_k \langle b_k^\dagger b_k \rangle \quad (6.12)$$

onde  $M_{sat}$  é a magnetização de saturação. Considerando o espectro de excitação

dado pela Eq. (6.11) na Eq. (6.12), no limite termodinâmico obtemos,

$$\Delta M = \frac{S_d}{4\pi^d \mathcal{D}^{d/2}} (k_B T)^{d/2} \int_y^\infty dx (x-y)^{\frac{d}{2}-1} \left( \coth \frac{x}{2} - 1 \right), \quad (6.13)$$

onde  $x = \beta\omega_q = y + \beta^2 \mathcal{D}q^2$ ,  $y = \beta\delta$ ,  $S_d$  o ângulo sólido,  $\beta = 1/k_B T$ ,  $k_B$  a constante de Boltzman e  $\delta = |H - H_{c2}|$  mede a distância ao QCP.

Consideremos agora qual região do diagrama de fases, dada pela Fig (6.7), estamos interessados estudar. Como queremos calcular a magnetização na trajetória crítica quântica ( $H = H_{c2}$ ,  $T \rightarrow 0$ ), consideramos a região II na Fig. (6.7), onde  $k_B T \gg \delta$  e conseqüentemente  $y \ll 1$ . Calculando a integral da Eq. (6.13) em três dimensões obtemos,

$$\Delta M_{3d} = \frac{\text{polylog}\left(\frac{3}{2}, e^{-y}\right) (k_B T)^{3/2}}{\pi^{3/2} \mathcal{D}^{3/2}}, \quad (6.14)$$

onde  $\text{polylog}(a, z) = \sum_{n=1}^\infty z^n / n^a$  é a função geral *polylogarithm* de índice  $a$  no ponto  $z$ . Ao longo da trajetória crítica quântica,  $H = H_{c2}$ ,  $T \rightarrow 0$ , encontramos

$$\Delta M_{3d}(\delta = 0) = \frac{g\mu_B \zeta(3/2) (k_B T)^{3/2}}{\pi^{3/2} \mathcal{D}^{3/2}}, \quad (6.15)$$

onde  $\zeta(n) = \sum_i^\infty \frac{1}{i^n}$  é a função Zeta de Riemann de índice  $n$ .

*Calor específico* : Considerando a energia interna  $U$  dada pela Eq. (6.8) e usando a relação termodinâmica,  $C_V = \partial U / \partial T$  conseguimos,

$$C_V = \frac{k_B S_d (k_B T)^{d/2}}{2\pi^d \mathcal{D}^{d/2}} \int_y^\infty dx x^2 (x-y)^{\frac{d}{2}-1} \sinh^{-2} \left( \frac{x}{2} \right). \quad (6.16)$$

Novamente consideramos  $y \ll 1$  e ao longo da trajetória crítica quântica em  $3d$ , encontramos,

$$C_V(\delta = 0) = \frac{15k_B (\sqrt{1+4\pi} - 1) (k_B T)^{3/2}}{8\pi^{3/2} \mathcal{D}^{3/2}}. \quad (6.17)$$

*Susceptibilidade*: Usamos a relação  $\chi = \partial M / \partial H$ , onde  $M$  é a magnetização. Tomando a derivada da Eq. (6.13) com respeito a  $H$ , logo fazendo uma mudança de variáveis e avaliando em  $H = H_{c2}$  temos,

$$\chi = \frac{S_d}{8\pi^d \mathcal{D}^{d/2}} (k_B T)^{\frac{d}{2}-1} \int_0^\infty dx x^{\frac{d}{2}-1} \sinh^{-2} \left( \frac{x}{2} \right). \quad (6.18)$$

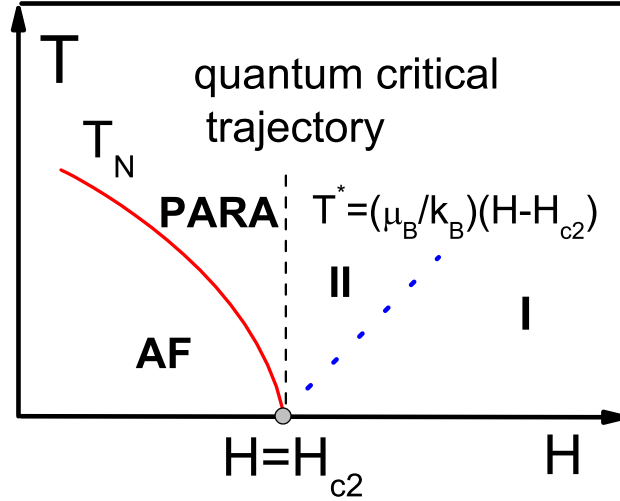


Figura 6.7: Diagrama de fases esquemático de um antiferromagneto anisotrópico com um campo magnético externo na direção- $z$ . As duas fases, antiferromagnética e paramagnética saturada, e o QCP ( $H = H_{c2}$ ,  $T = 0$ ) são mostrados. A linha pontilhada é a linha de crossover dividindo a região paramagnética em dois regimes I e II, respectivamente.

Para  $3d$  a susceptibilidade longitudinal acima do campo magnético de saturação,  $H_{c2}$ , é dada por,

$$\chi(\delta = 0) = \frac{(k_B T)^{1/2}}{(\pi - 1)\sqrt{\pi} \mathcal{D}^{3/2}}. \quad (6.19)$$

A dependência com a temperatura das propriedades físicas, magnetização, calor específico e susceptibilidade, calculadas acima em  $3d$ , podem ser facilmente obtidas do fato que o QCP em  $H_{c2}$  é governado por expoentes *Gaussianos*. Na teoria de escala a energia livre vem dada por [300],

$$f \propto |\delta|^{2-\alpha} F\left(\frac{T}{|\delta|^{\nu z}}\right), \quad (6.20)$$

onde  $\delta = (H - H_{c2})$  como definido anteriormente. A natureza Gaussiana dos expoentes é uma consequência da dimensão efetiva  $d_{eff} = d + z = 5$ , a qual é maior que a dimensão crítica superior [13],  $d_{uc} = 4$ .

### 6.3.5 Linha crítica de Néel

A linha crítica que separa a fase paramagnética saturada da fase antiferromagnética, com magnetização *staggered* diferente de zero, pode ser escrita na vizinhança do QCP como  $T_N(H) \propto |H_{c2} - H|^\psi$ . Teorias para um gás de Bose em  $3d$  [230, 233] e tratamentos de campo médio [9] dão um valor universal,  $\psi = 2/3$ . A teoria de escala mostra que embora  $d_{eff} > d$  em três dimensões, a interação magnon-magnon é perigosamente irrelevante e deve ser considerada [39, 300]. Assim, esperamos que a correção quártica na Hamiltoniana efetiva dada pela Eq. (6.5) seja agora importante. Com a representação H-P para os operadores de spin, a Hamiltoniana efetiva incluindo a interação dinâmica das ondas de spin é dada por,

$$\mathcal{H}'_{mf} = \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k + \sum_{k,k'} \left( \frac{JZ}{2} + D \right) b_k^\dagger b_k b_{k'}^\dagger b_{k'} + E_g, \quad (6.21)$$

onde o termo  $(\frac{JZ}{2} + D)$  pode ser considerado como uma repulsão efetiva entre os magnons. A dispersão  $\omega_k$  é dada pela Eq. (6.7) e  $E_g$  pela Eq. (6.6). A interação entre ondas de spin é desacoplada como,  $b_k^\dagger b_k b_{k'}^\dagger b_{k'} \approx b_k^\dagger b_k \langle b_{k'}^\dagger b_{k'} \rangle$ . Desse modo, obtemos a energia interna com a contribuição magnon-magnon como,

$$U' = \sum_q \omega'_q \langle b_q^\dagger b_q \rangle + E_g, \quad (6.22)$$

onde fizemos as mesmas aproximações,  $k = q + Q$  e  $H \rightarrow H_{c2}$ , próprias do fato do sistema estar na proximidade de uma instabilidade magnética. O espectro de excitações levando em conta a interação magnon-magnon é,

$$\omega'_q = (H - H_{c2}) + \left( \frac{JZ}{2} + D \right) \langle b_k^\dagger b_k \rangle + \mathcal{D}q^2. \quad (6.23)$$

Estabelecemos uma equação para a linha crítica com a aproximação Gaussiana onde os efeitos das flutuações magnon-magnon são incluídos de uma maneira auto-consistente. A temperatura crítica  $T_N(H)$  é determinada pela condição  $\delta(H, T_N) = 0$

onde,

$$\delta(H, T_N) = (H - H_{c2}) + \left(\frac{JZ}{2} + D\right) \frac{S_d}{4\pi^2} \left(\frac{k_B T_N}{\mathcal{D}}\right)^{d/2} \int_0^\infty dx x^{\frac{d}{2}-1} \left(\coth \frac{x}{2} - 1\right). \quad (6.24)$$

Em duas dimensões a integral da Eq. (6.24) diverge, como esperado por argumentos gerais [23]. No entanto, em três dimensões temos,

$$k_B T_N = \left(\frac{1}{\zeta(3/2)(JZ/2 + D)}\right)^{2/3} \pi \mathcal{D} (H_{c2} - H)^{2/3}. \quad (6.25)$$

Observe que o termo de interação efetiva magnon-magnon  $(JZ/2 + D)$  determina a temperatura de transição, apesar dos expoentes *Gaussianos*, como esperamos da natureza perigosamente irrelevante das interações magnon-magnon.

Se escrevemos a equação para a linha crítica,  $\delta(H, T_N) = 0$  na forma,

$$H_{c2}(T) = H_{c2}(0) - v_0 T_N^{1/\psi}, \quad (6.26)$$

com  $v_0$  relacionado com a interação entre ondas de spin, identificamos o expoente de deslocamento,  $\psi = z/(d + z - 2) = 2/3$ , em concordância com resultados usando a teoria de grupo de renormalização [39].

A dependência com a temperatura de  $\delta$  surgindo das interações de onda de spin pode modificar a dependência em temperatura das propriedades físicas  $\Delta M$ ,  $C_V$  e  $\chi$  no ponto crítico quântico  $H = H_{c2}$ . No limite  $T \rightarrow 0$  podemos ver que o resultado puramente Gaussiano para  $\Delta M$  e  $C_V$  calculados na sub-seção 6.3.4 são dominantes. Entretanto, para a susceptibilidade longitudinal a interação magnon-magnon modifica o resultado puramente Gaussiano. Neste caso, mostra-se que para  $H = H_{c2}$ ,  $T \rightarrow 0$ , a parte dominante é  $\chi \propto T^{1/4}$  [300], ao invés de  $\chi \propto T^{1/2}$ .



### 6.3.6 Análise de escala da magnetização

Começamos pela densidade de energia livre que, próxima da transição de fase quântica tem a forma de escala dada pela Eq. (6.20). Os expoentes críticos a temperatura nula  $\alpha$ ,  $\nu$  e o expoente dinâmico  $z$  são relacionados com a dimensão  $d$  do sistema, usando a relação de hiper-escala quântica,  $2 - \alpha = \nu(d + z)$  [13]. Em geral, para  $d_{eff} = d + z > 4$ , i.e., acima da dimensão crítica superior  $d_{uc} = 4$ , os expoentes associados com o QCP em  $\delta = 0$  tomam valores Gaussianos. Em particular, o expoente de comprimento de correlação é  $\nu = 1/2$ . O fato que isto seja o caso na presente teoria pode ser imediatamente verificado escrevendo as funções termodinâmicas em uma forma de escala e identificando os expoentes relevantes. Além do mais, a Eq. (6.11) produz o expoente dinâmico  $z = 2$ . Usando a relação  $\Delta M \propto \partial f / \partial H$  e considerando a Eq. (6.20) conseguimos,

$$\Delta M \propto |\delta|^{1-\alpha} R \left( \frac{T}{|\delta|^{\nu z}} \right), \quad (6.27)$$

onde  $\Delta M = M_{sat}(T, H_{sat}) - M(T, H)$  e  $M_{sat}$  é medido em campos magnéticos superiores a 15 T. Usando a relação de hiper-escala para  $3d$  obtemos  $1 - \alpha = \nu(3 + z) - 1 = (1/2)(3 + 2) - 1 = 3/2$ .

A Fig. (6.8) mostra a análise de escala dos dados de magnetização do composto DTN obtida para campos magnéticos até 17 T e temperaturas  $T = 0.60, 0.64, 0.72, 0.94$  K. Observe-se que utilizamos, para colapsar os dados experimentais, os expoentes apropriados para três dimensões. Podemos perceber que para  $H \rightarrow H_{c2}$ , a função de escala  $R(t \rightarrow \infty) \sim t^{3/2}$ , tal que, neste limite  $\Delta M_{3d} \propto T^{3/2}$  em concordância com a teoria. O ramo inferior (superior) corresponde aos dados para campos magnéticos superiores (inferiores) ao campo magnético crítico  $H_{c2}(0) = 12.3$  T. Este campo magnético crítico foi obtido usando o critério de melhor colapso dos dados e está em boa concordância com o encontrado por Paduan-Filho *et al.* [269] usando diferenciação numérica dos dados da magnetização.

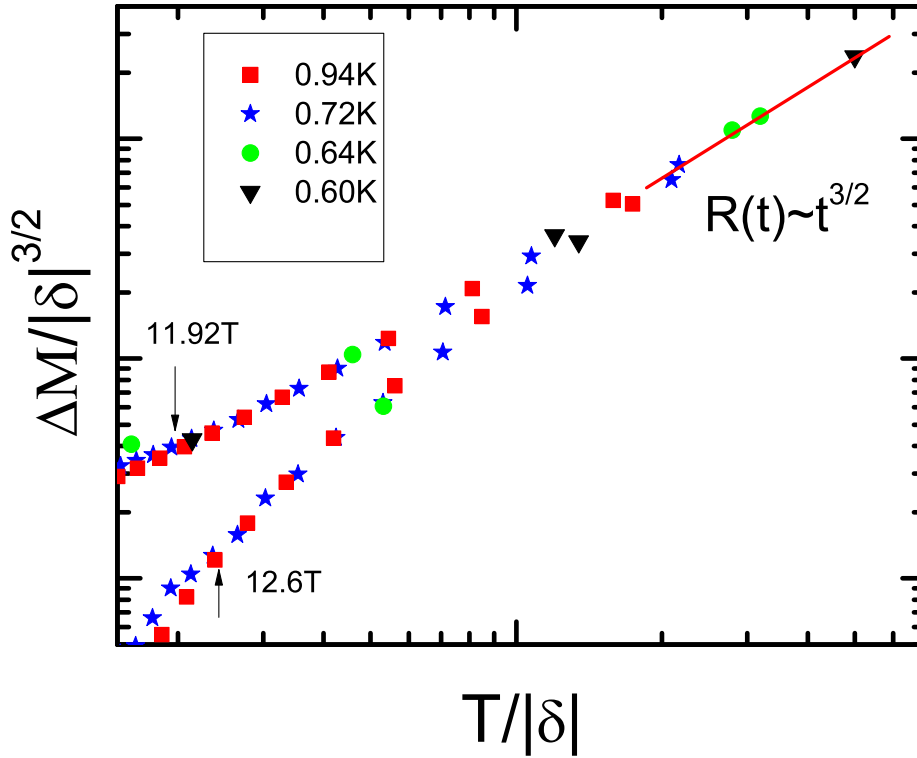


Figura 6.8: Análise de escala log-log dos dados experimentais de magnetização para o composto orgânico DTN obtido para campos magnéticos até 17 T e temperaturas  $T = 0.60, 0.64, 0.72$  e  $0.94$  K. A linha sólida mostra o comportamento assintótico da função de escala  $R(t) \sim t^{3/2}$  em Eq. (6.27), para  $H \rightarrow H_{c2}$ . As setas indicam a região de validade da análise de escala. Figura reproduzida da referência [106].

Finalmente, ressaltamos que a análise de escala é observada para campos magnéticos suficientemente próximos do campo magnético de saturação, i.e., para  $11.92 \text{ T} < H_{c2} < 12.6 \text{ T}$ . Assim, o composto DTN é o primeiro sistema quântico de spins contendo  $Ni$  exibindo condensação Bose-Einstein de magnons, diferentemente de outros sistemas que contêm dímeros de  $Cu$ .

Em resumo, neste capítulo obtivemos o diagrama de fases e as propriedades termodinâmicas, magnetização, calor específico, e susceptibilidade ao redor do campo magnético de saturação,  $H_{c2}$ . Como mostramos, o composto orgânico  $NiCl_2 - 4SC(NH_2)_2$  (DTN) é ideal para estudar esta transição, desde que curvas de magnetização são obtidas próximas de  $H_{c2}$  e a temperaturas muito baixas. Calculamos

também a linha crítica de Néel levando em conta as interações magnon-magnon. Finalmente, usando nossas previsões teóricas fizemos uma análise de escala dos dados de magnetização do composto DTN. A boa concordância entre os resultados experimentais e teóricos dá a evidência inequívoca de que a transição de fase quântica em  $H_{c2}$  é uma condensação Bose-Einstein de magnons.

# Capítulo 7

## Conclusões e Perspectivas

O objetivo desta tese foi o estudo das transições de fase quânticas em sistemas correlacionados. Estudamos dois sistemas que apresentam este tipo de transição. O primeiro foram os sistemas férmions pesados, e entre eles os chamados isolantes de Kondo. O segundo foram sistemas antiferromagnéticos de spin-1, que apresentam condensação Bose-Einstein de suas excitações coletivas quando um campo magnético muito forte aplicado na direção- $z$  é reduzido.

No capítulo 1, fizemos basicamente uma breve introdução aos conceitos e métodos envolvidos nesta tese. Descrevemos o que é uma transição de fase quântica e as diferenças com respeito às transições de fase a temperatura finita. Também descrevemos a teoria de escala para as transições de fase quânticas.

No capítulo 2, apresentamos uma breve revisão das características experimentais, assim como a física das interações envolvidas nos férmions pesados próxima de uma instabilidade magnética.

No capítulo 3, desenvolvemos uma nova representação de operadores de spin, os chamados operadores de enlace, propostos por Sachdev e Batht. Obtivemos esta representação para operadores de spin-1/2 e spin-1. Também, obtivemos esta representação em operadores de enlace para spin-1 e spin-1/2 quando um campo magnético na direção- $z$  é aplicado no sistema. Este estudo dos operadores de enlace

para spin-1/2 e spin-1, com e sem campo magnético aplicado na direção- $z$  foi usado nos capítulos 4, 5, e 6.

No capítulo 4, estudamos o modelo colar de Kondo a temperatura nula e finita. Estudamos os efeitos de um parâmetro de anisotropia tipo Ising e um campo magnético aplicado na direção- $z$ , no modelo. Para isto resolvemos o modelo a baixas temperaturas em uma aproximação Gaussiana utilizando o método das funções de Green. Dos pólos dos propagadores obtivemos as excitações elementares do sistema. Em ambos casos usamos o teorema do salto para obter a energia interna do sistema. Utilizando as relações termodinâmicas para um sistema de bósons, calculamos a energia livre do sistema. Das relações obtidas, minimizando a energia livre com respeito aos parâmetros introduzidos, obtemos os diagramas de fases tanto no estado fundamental como a baixas temperaturas. Damos agora as conclusões de cada estudo.

No primeiro caso, examinamos o diagrama de fases do modelo colar de Kondo em presença de um parâmetro de anisotropia tipo Ising a temperatura nula e baixa. A temperatura nula, derivamos e resolvemos equações auto-consistentes na fase desordenada tipo líquido de spin para valores de anisotropia entre  $0 \leq \varsigma \leq 1$ . Isto permite calcular a dependência do gap de spin com o parâmetro de anisotropia, para  $d = 1, 2, 3$ . Em uma dimensão, a energia do gap cai linearmente para pequenos valores de  $(J/t)^{-1}$  e desvia-se consideravelmente do comportamento linear à medida que  $(J/t)^{-1}$  aumenta. Assim, a energia do gap de spin sempre será finita para qualquer valor do parâmetro de anisotropia tipo Ising  $\varsigma$ , entre  $0 \leq \varsigma \leq 1$ , próprio da fase desordenada em redes de Kondo unidimensionais [110, 136]. Na referência [175], utilizando-se uma aproximação de ondas de spin no modelo colar de Kondo anisotrópico unidimensional, foi encontrada uma transição de fase quântica em um valor crítico  $\varsigma_c$ . Nosso estudo não encontra nenhum valor crítico finito de  $(J/t)^{-1}$ . Acreditamos que nossos resultados sejam corretos, e os da referência [175]

uma consequência das aproximações usadas. Isto porque, o estado fundamental de redes de Kondo unidimensionais está sempre em uma fase desordenada tipo líquido de spin [110, 111], no limite de acoplamento forte,  $J/t \rightarrow \infty$ , usado aqui. No entanto, em  $d = 2, 3$  encontramos que o parâmetro de anisotropia, entre  $0 < \varsigma \leq 1$ , varia o valor crítico  $(J/t)_c^{-1}$  até que em  $\varsigma = 0$  os espectros de excitação transversais coincidem  $\omega_x = \omega_y$ , o que corresponde ao modelo colar de Kondo isotrópico [114]. Dessa maneira, encontramos o ponto crítico quântico (QCP) do modelo colar de Kondo isotrópico em duas e três dimensões. Assim, concluímos que em  $d = 2, 3$ , para valores de anisotropia entre  $0 \leq \varsigma \leq 1$ , existe um valor crítico  $(J/t)_c^{-1}$  no qual o gap de spin desaparece como  $\Delta/J \propto |(J/t)_c^{-1} - (J/t)^{-1}|^{\nu z}$ , com expoente  $\nu z \approx 0.5$  em duas dimensões, e  $\nu z \approx 1$  em três dimensões. Em particular, em três dimensões, o expoente  $\nu z \approx 0.5$  é consistente com o expoente dinâmico  $z = 1$  e com o comprimento de correlação  $\nu = 1/2$ , este último em concordância com a aproximação Gaussiana usada para resolver a Hamiltoniana.

Obtivemos também a dependência da linha de Néel com a distância ao QCP  $g = |(J/t)_c - (J/t)|$ , na presença de um parâmetro de anisotropia  $\varsigma \ll 1$ . Em duas dimensões, e para  $\varsigma \ll 1$ , encontramos que não existe linha de transição a temperatura finita. No entanto, para  $d \geq 3$  a lei de potência da linha de Néel na presença de um parâmetro de anisotropia  $\varsigma \ll 1$  é a mesma que no modelo colar de Kondo isotrópico,  $\varsigma = 0$ . Isto implica que os expoentes críticos controlando a transição próximo do QCP, para  $\varsigma \ll 1$  são os mesmos que no caso isotrópico. No caso anisotrópico,  $\varsigma = 1$ , ou para valores próximos deste caso,  $\varsigma \approx 1$ , acreditamos que deve existir uma linha de transição em duas dimensões a temperatura finita. No entanto, encontrar analiticamente este resultado é ainda mais complicado que para o caso anterior,  $0 \leq \varsigma \ll 1$ . Um tratamento numérico deverá ser feito para encontrar esta linha de transição, como nas redes de Kondo anisotrópicas unidimensionais [171].

Obtivemos também o comportamento termodinâmico do calor específico ao longo

da chamada trajetória crítica quântica,  $J/t = (J/t)_c$ ,  $T \rightarrow 0$ . Este tem uma dependência com a temperatura tipo lei de potência como  $C_V \propto T^d$ . Isto é consistente com a teoria de escala e com o expoente dinâmico assumindo o valor de  $z = 1$ . Consequentemente, a presente aproximação Gaussiana produz a descrição correta do QCP em redes de Kondo para  $d \geq 3$ , embora em  $3d$  não reproduza as correções logarítmicas próprias de sistemas com dimensão efetiva  $d_{eff}$  igual à dimensão crítica superior  $d_{uc}$ ,  $d_{eff} = d_{uc}$ . Portanto, as características mais essenciais das redes de Kondo, i.e., a competição entre a fase antiferromagnética e a fase desordenada tipo líquido de spin é claramente retida no modelo colar de Kondo para  $0 \leq \varsigma \leq 1$ . As características qualitativas considerando a estabilidade de fase antiferromagnética são bem entendidas no modelo. Isso permite uma interpretação física simples do diagrama de fases em redes de Kondo anisotrópicas.

No segundo caso, investigamos brevemente os efeitos de um campo magnético aplicado na direção- $z$  no modelo colar de Kondo a temperatura nula. Começamos da fase desordenada tipo líquido de spin, assim ressaltamos que qualquer ordem antiferromagnética é induzida pelo campo magnético. De nossos resultados analíticos obtemos as seguintes conclusões: (i) Para  $J/t > (J/t)_c$  as excitações magnéticas para campos magnéticos inferiores ao campo crítico  $H_{c1}$ , são somente desdobradas pelo termo de Zeeman. Assim, as excitações não são alteradas pelo campo magnético para  $H < H_{c1}$ . (ii) Para  $H = H_{c1} = \Delta$ , o gap de spin fecha e o campo magnético dá origem a uma fase antiferromagnética de longo alcance. (iii) Em campos magnéticos superiores ao campo de saturação  $H \geq H_{c2}$ , o estado fundamental se torna um condensado dos tripletos de mais baixa energia.

Discutimos agora o fato de ter estudado os isolantes de Kondo utilizando o modelo colar de Kondo. No capítulo 4 usamos a Hamiltoniana do modelo colar de Kondo para interpretar a desestabilização da ordem magnética em isolantes de Kondo. Neste modelo existe somente um único parâmetro,  $J/t$ , do qual dependem

as duas escalas de energia relevantes nesta descrição: a energia de Kondo  $K_B T_K$ , que descreve a blindagem dos momentos magnéticos localizados, e a energia relacionada com a ordem magnética de longo alcance,  $k_B T_{RKKY}$ . A competição destas duas escalas de energia resulta em um diagrama de fases, conhecido como o “diagrama de Doniach”. Este diagrama descreve corretamente alguns diagramas de fases encontrados experimentalmente [308, 309]. Isto levando em conta três grandezas físicas relevantes: a susceptibilidade magnética, o calor específico e a resistividade elétrica, que aportam a informação básica para a determinação das fases existentes e seus limites. A partir destas grandezas avaliam-se outras propriedades como a energia interna magnética, a entropia ou a energia livre. No entanto, como relatamos no capítulo 2, na região onde se produz a instabilidade magnética, outros efeitos que não são levados em conta por esta Hamiltoniana adquirem maior relevância. Estes efeitos podem conduzir à aparição de novas fases e fenômenos físicos, como coexistência entre supercondutividade e magnetismo ou comportamento “Não-líquido de Fermi”. Devemos dizer também que na comparação entre diagramas de fases experimentais e modelos como o de Doniach, costuma-se considerar de forma implícita uma relação unívoca entre o parâmetro de controle empregado, por exemplo a concentração ou a pressão hidrostática aplicada, e o parâmetro  $J/t$ . Esta relação pode ser justificada em alguns casos particulares, nos quais o volume de informação sobre o sistema em questão é suficiente. No entanto, em geral deve-se considerar a possibilidade de que mudanças no parâmetro de controle não resultem em variações (lineares) do parâmetro  $J/t$ .

No capítulo 5, consideramos o modelo colar de Kondo com um parâmetro de anisotropia geométrica a temperatura nula e finita. Nossa motivação foi determinar se existe uma região de “crossover” onde o parâmetro adimensional de anisotropia geométrica  $\xi = t_{\perp}/t_{\parallel}$ , muda o comportamento do sistema de  $(2d)$  para  $(3d)$ . Encontramos que de fato, a linha de Néel existe se ligamos o hopping entre planos  $t_{\perp}$ ,



por menor que este seja. Este estudo foi motivado por sistemas intermetálicos chamados férmions pesados. Nestes sistemas, muitos resultados na região “Não-líquido de Fermi” podem ser explicados usando teorias quase-bidimensionais e encontrando, por exemplo,  $C/T \propto \ln T$  [11, 40, 36], tendo assim um comportamento mais complexo que os sistemas isolantes de Kondo, em uma banda semi-cheia, que estudamos aqui. No entanto, acreditamos que nossos resultados no modelo colar de Kondo quase-bidimensional são interessantes para estudar o comportamento das grandezas físicas como calor específico, susceptibilidade e resistividade na trajetória crítica quântica,  $J/t = (J/t)_c$ ,  $T \rightarrow 0$ . Isto porque encontramos um fenômeno reentrante no diagrama de fases do modelo colar de Kondo quase-bidimensional, ao menos como indicado usando a aproximação Gaussiana, com uma representação dos operadores de spin em operadores de enlace. O estudo destas grandezas na trajetória crítica quântica será deixado para um estudo posterior. Este fenômeno reentrante pode ser explicado como devido à competição entre os estados singletos e tripletos. De fato, a energia interna no caso antiferromagnético provém da contribuição dos condensados singlete e tripleto. Entretanto, a contribuição para a entropia a baixas temperaturas é essencialmente devida aos tripletos. Começando da fase desordenada com temperaturas  $T > T_N$ , as flutuações descorrelacionadas i.e., os singletos, são as que determinam a termodinâmica e a entropia do modelo. Quando a temperatura é diminuída e próxima de  $T_N$ , a energia livre e a entropia competem, e as flutuações correlacionadas afetam significativamente o domínio da fase paramagnética e antiferromagnética. Se a temperatura é diminuída mais ainda, a entropia, que é devida aos tripletos é mínima comparada com a energia livre composta somente de condensados singletos. Assim, o sistema passa de novo à fase desordenada com um estado fundamental como produto de singletos.

Portanto, acreditamos que nosso mecanismo para a aparição da linha de Néel no sistema quase-bidimensional, mediante um parâmetro de anisotropia geométrico,

será útil em caso de sistemas correlacionados mais complicados. Isto enfatiza a necessidade de considerar os efeitos da dimensão em modelos mais realistas que o amplamente usado modelo de Doniach. Concluímos que o acoplamento entre planos é essencial para manter a ordem tridimensional a temperatura finita.

No capítulo 6, estudamos a condensação Bose-Einstein de magnons induzida por um campo magnético. Apesar da grande literatura sobre isto, o diagrama de fases e as propriedades termodinâmicas próximos do campo magnético de saturação  $H_{c2}$  não foram, ainda, completamente examinados. Isto porque, em geral, campos magnéticos altos são necessários para alcançar  $H_{c2}$ . Consequentemente, trabalhos teóricos são muito mais escassos nesta região do diagrama de fases. Como indicamos, o composto orgânico  $NiCl_2-4SC(NH_2)_2$  (DTN) é ideal para este estudo, desde que curvas detalhadas de magnetização possam ser obtidas para temperaturas muito baixas próximo de  $H_{c2}$ . Com esta motivação introduzimos a aproximação Gaussiana com a representação de spins em operadores de enlace, para estudar teoricamente esta transição. Obtivemos o comportamento dominante, a baixa temperatura, da magnetização ( $\Delta M \propto T^{3/2}$ ), calor específico ( $C_V \propto T^{3/2}$ ) e susceptibilidade ( $\chi \propto T^{1/4}$ ) na trajetória crítica quântica. Determinamos também o expoente de deslocamento  $\psi = 2/3$  da linha de Néel. Ressaltamos que, embora as interações magnon-magnon sejam irrelevantes no sentido da teoria de grupo de renormalização próximo de  $H_{c2}$ , elas devem ser levadas em conta ao determinar a dependência em temperatura da linha crítica de Néel e da susceptibilidade. Nossa aproximação Gaussiana é justificada devido ao fato de que a dimensão efetiva para a transição no QCP está acima da dimensão crítica superior. Finalmente, usando nossas previsões teóricas fizemos uma análise de escala dos dados de magnetização do DTN. A boa concordância entre nossos resultados teóricos e os experimentais fornecem a evidência inequívoca de que a transição em  $H_{c2}$  dá origem a uma condensação Bose-Einstein de magnons.

Para finalizar, deixamos questões abertas a serem estudadas no futuro.

- Como discutimos no capítulo 5, muitos resultados na região “Não-líquido de Fermi” podem ser explicados usando teorias quase-bidimensionais. Assim, continuando com nosso estudo de redes de Kondo com uma anisotropia geométrica, num futuro estudo veremos se nossos resultados têm alguma relevância para este fato. Isto é interessante, considerando que em redes de Kondo quase-bidimensionais encontramos uma linha crítica de Néel que próxima do ponto crítico quântico apresenta um fenômeno reentrante.
- Como ressaltamos no capítulo 6, a existência de um crossover próximo da transição em  $H_{c1}$  e temperatura  $T \rightarrow 0$  foi sinalizado em estudos experimentais e numéricos. Portanto, conjecturamos que existe um “crossover” a temperatura finita de uma classe de universalidade  $z = 1$  para outra com  $z = 2$  quando a temperatura é diminuída na vizinhança do ponto crítico quântico  $H_{c1}$ . O estudo deste crossover está em andamento [281].
- Um outro estudo é a transição de fase em  $H_{c1}$  induzida por campo magnético a temperatura  $T \rightarrow 0$ , como pertencendo a uma classe de universalidade com expoente dinâmico  $z = 1$  [282]. Esta transição é desde uma fase paramagnética tipo líquido de spin para uma fase antiferromagnética tipo-XY. Em três dimensões, este futuro estudo não pode excluir a possibilidade de correções logarítmicas nas propriedades físicas, próprias da dimensão crítica superior  $d_{uc} = d_{eff} = d + z = 4$ . A teoria quântica de campos será necessária para clarificar este ponto.

# Artigos publicados em revistas internacionais

1. D. Reyes e M. A. Continentino, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **320**, 461 (2008).
2. D. Reyes, A. Paduan-Filho e M. A. Continentino, *Phys. Rev. B* **77**, 052405 (2008).
3. D. Reyes e M. A. Continentino, *Physica B* **403**, 829 (2008).
4. D. Reyes e M. A. Continentino, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 406203 (2007).
5. D. Reyes e M. A. Continentino, *Phys. Rev. B* **76**, 075114 (2007).
6. D. Reyes, M. A. Continentino, A. Troper, e A. Saguia, *Physica B* **359**, 714 (2005).

# Publicações em andamento

1. D. Reyes e M. A. Continentino, Thermodynamic quantum critical behavior in the anisotropic Kondo necklace model (Submetido ao Journal of Magnetism and Magnetic Materials), (2008).
2. D. Reyes e M. A. Continentino, Field induced magnetic ordering in magnetic systems: marginal case. (Submetido ao Physica B), (2008).

# Bibliografia

- [1] *Nature Physics*, Focus Vol. 4 No.3 March 2008.
- [2] S. Sachdev, *Quantum phase transitions*, Cambridge Univ. Press, New York, (1999).
- [3] H. von Löhneysen, *J. Phys. Condens. Matter* **8**, 9689 (1996).
- [4] E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
- [5] M. B. Maple, *J. Magn. Magn. Mater.* **177**, 18 (1998).
- [6] J. Orenstein e A. J. Millis, *Science* **288**, 475 (2000).
- [7] S. Sachdev, *Science* **288**, 475 (2000).
- [8] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Mathews, C. E. Wieman, e E. A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995).
- [9] T. Nikuni, M. Oshikawa, A. Oosawa, H. Tanaka, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5868 (2000).
- [10] F. S. Nogueira e K. H. Bennemann, *Europhys. Lett.* **67**, 620 (2004).
- [11] J. A. Hertz, *Phys. Rev. B* **14**, 1165 (1976).
- [12] M. A. Continentino, *Quantum Scaling in Many Body Systems*, Physics Reports, HOLANDA, v. **239**, n. 3, p. 179 (1994).

- [13] M. A. Continentino, *Quantum Scaling in Many-Body Systems*, Ed. World Scientific (2001).
- [14] S. Chakravarty, B. I. Halperin, e D. R. Nelson, *Phys. Rev. B* **39**, 2344 (1989).
- [15] Thierry Giamarchi, Christian Rüegg, e Oleg Tchernyshyov, *Nature Phys.* **4**, 198-204 (2008).
- [16] S. Sachdev e N. R. Bhatt, *Phys. Rev. B* **41**, 9323 (1990).
- [17] D. N. Zubarev, *Usp. Fiz. Nauk.* **71**, 71 (1960).
- [18] A. Troper, *Notas sobre funções de Green*, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas-CBPF.
- [19] M. E. Fisher, *Critical Phenomena*, Editora Springer-Verlag (1982).
- [20] S. Ma e S.-K. Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Perseus Books Group; 1<sup>ra</sup> edição (2000).
- [21] J. Cardy *et al.*, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics* (Cambridge Lecture Notes in Physics), Cambridge University Press (1996).
- [22] N. F. Mott, *Metal-Insulator Transitions* (London: Taylor e Francis) (1990).
- [23] N. D. Mermin e H Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [24] S. Chakravarty, B. I. Halperin, e D. R. Nelson, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1057 (1998).
- [25] S. Chakravarty, B. I. Halperin, e D. R. Nelson, *Phys. Rev. B* **39**, 2344 (1989).
- [26] Mathias Vojta, *Rep. Prog. Phys.* **66**, 2069 (2003).
- [27] L. P. Kadanoff *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 395 (1967).
- [28] Philipp Gegenwart, Qimiao Si, e Frank Steglich, *Nature Physics* **4**, 186 (2008).

- [29] H. v. Löhneysen, A. Rosch, M. Vojta, e P. Wölfle, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 1015 (2007).
- [30] P. Coleman e A. J. Schofield, *Nature* **433**, 226-229 (2005).
- [31] M. A. Continentino, *Phys. Rev. B* **47**, 11587 (1993).
- [32] M. A. Continentino, G. M. Japiassu, e A. Troper, *Phys. Rev. B* **39**, 9734 (1989).
- [33] G. R. Stewart, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 797 (2001).
- [34] G. R. Stewart, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 743 (2006).
- [35] S. Doniach, *Physica B* **91**, 231 (1977).
- [36] Q. Si, S. Rabello, K. Ingersent, e J. L. Smith, *Nature* **413**, 804 (2001).
- [37] P. Coleman, C. Pépin, Q. Si, e R. Ramazashvili, *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, R723 (2001).
- [38] T. Senthil, M. Vojta, e S. Sachdev, *Phys. Rev. B* **69**, 035111 (2004).
- [39] J. A. Millis, *Phys. Rev. B* **48**, 7183 (1993).
- [40] T. Moriya e T. Takimoto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **64**, 960 (1995).
- [41] F. Steglich *et al.*, *J. Low. Temp. Phys.* **99**, 267 (1995).
- [42] F. Steglich *et al.*, *J. Phys. Chem. Solids* **59**, 2190 (1998).
- [43] J. Flouquet, cond-mat/0501602 (2005).
- [44] K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975).
- [45] M. A. Continentino, *J. de Physique I* **1**, 693 (1991).
- [46] J. Kondo, *Prog. Theor. Phys.* **32**, 37 (1964).



- [47] J. Kondo, *Solid State Physics* **23**, 183 (1969).
- [48] M. A. Ruderman e C. Kittel, *Phys. Rev.* **96**, 99 (1954).
- [49] T. Kasuya, *Prog. Theor. Phys.* **16**, 45 (1956).
- [50] K. Yosida, *Phys. Rev.* **106**, 895 (1957).
- [51] E. M. Lifshitz e L. P. Pitaevskii, *Statistical Physics-Part 2: Theory of the Condensed State*, Butterworth-Heinemann, (1995).
- [52] O. O. Bernal, D. E. MacLaughlin, H. G. Lukefahr, e B. Andraka, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2023 (1995).
- [53] E. Miranda, V. Dobrosavljević, e G. Kotliar, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 290 (1997).
- [54] A. H. Castro Neto, G. Castilla, e B. A. Jones, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3531 (1978).
- [55] P. Nozières e A. Blandin, *J. Physique* **41**, 193 (1980).
- [56] D. L. Cox, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1240 (1987).
- [57] A. M. Tsvelik e M. Reizer, *Phys. Rev. B* **48**, 9887 (1993).
- [58] A. Schröder, G. Aeppli, E. Bucher, R. Ramazashvili, e P. Coleman, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5693 (1998).
- [59] D. E. MacLaughlin, O. O. Bernal, e H. G. Lukefahr, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 9855 (1996).
- [60] E. Miranda, V. Dobrosavljević, e G. Kotliar, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 9871 (1996).
- [61] E. Miranda e V. Dobrosavljević, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 264 (2001).
- [62] E. Miranda e V. Dobrosavljević, *J. Magn. Magn. Mat* **226-230**, 110 (2001).

- [63] D. L. Cox e M. Jarrell, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 9825 (1996).
- [64] D. L. Cox e A. Zawadowski, *Adv. Phys.* **47**, 599 (1998).
- [65] J. Custers *et al.*, *Nature* **424**, 524 (2003).
- [66] F. Steglich *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1892 (1979).
- [67] S. Raymond e D. Jaccard, *Phys. Rev. B* **61**, 8679 (2000).
- [68] A. Schröder *et al.*, *Nature* **407**, 351 (2000).
- [69] G. Aeppli e Z. Fisk, *Comments Cond. Mat. Phys.* **16**, 155 (1992).
- [70] G. R. Stewart, Z. Fisk, J. O. Willis, e J. L. Smith, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 679 (1984).
- [71] H. R. Ott, H. Rudigier, Z. Fisk, e J. L. Smith, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1595 (1983).
- [72] P. Gegenwart *et al.*, *Physica C* **408-410**, 157 (2004).
- [73] H. Q. Yuan *et al.*, *Science* **302**, 2104 (2003).
- [74] D. Jaccard, K. Behnia, e J. Sierro, *Phys. Lett. A* **163**, 475 (1992).
- [75] W. Schlabitz *et al.*, *Z. Phys. B* **62**, 171 (1986).
- [76] T. Park, *et al.*, *Nature* **440**, 65-68 (2006).
- [77] G. Knebel, D. Aoki, D. Braithwaite, B. Salce, e J. Flouquet, *Phys. Rev. B* **74**, 020501 (2006).
- [78] J. Paglione *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 246405 (2003).
- [79] A. Bianchi, R. Movshovich, I. Vekhter, P. G. Pagliuso, e J. L. Sarrao, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 257001 (2003).

- [80] S. Singh *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 057001 (2007).
- [81] N. D. Mathur *et al.*, *Nature* **394**, 39 (1998).
- [82] P. W. Anderson, *Science* **316**, 1705-1707 (2007).
- [83] P. Monthoux, G. G. Lonzarich, e D. Pines, *Nature* **450**, 1177-1183 (2007).
- [84] M. F. Hundley *et al.*, *Phys. Rev. B* **42**, 6842 (1990).
- [85] P. Riseborough, *Phys. Rev. B* **45**, 13984 (1992).
- [86] P. Coleman, arXiv:cond-mat/0612006 (2007).
- [87] G. R. Stewart, *Rev. Mod. Phys.* **56**, 755 (1984).
- [88] M. P. Gelfand, R. R. Singh, e D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **40**, 10801 (1989).
- [89] T. M. Rice, S. Gopalan, e M. Sigrist, *Europhys. Lett.* **23**, 445 (1993).
- [90] S. Gopalan, T. M. Rice, e M. Sigrist *Phys. Rev. B* **49**, 8901 (1994).
- [91] J. Piekarewicz e J. R. Shepard, *Phys. Rev. B* **60**, 9456 (1999).
- [92] V. N. Kotov, O. Sushkov, Z. Weihong, e J. Oitmaa, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5790 (1998).
- [93] V. N. Kotov, J. Oitmaa, O. Sushkov, e Zheng Weihong, *Phil. Mag. B* **80**, 1483 (2000).
- [94] Y. Matsushita, M. P. Gelfand, e C. Ishii, *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 247 (1999).
- [95] K. Totsuka, S. Miyahara, e K. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 520 (2001).
- [96] D. Carpentier e L. Balents, *Phys. Rev. B* **65**, 024427 (2002).

- [97] R. Eder, A. Dorneich, M. G. Zacher, W. Hanke, e S. C. Zhang, *Phys. Rev. B* **59**, 561 (1999).
- [98] A. Furusaki e S. C. Zhang, *Phys. Rev. B* **60**, 1175 (1999).
- [99] E. Demler e S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3895 (1999).
- [100] T. Sommer, M. Vojta, e K. W. Becker, *Eur. Phys. J. B* **23**, 329 (2001).
- [101] S. Sachdev e K. Park, *Phys. Rev. B* **64**, 184510 (2001).
- [102] Kwon Park, *Phys. Rev. B* **67**, 094513 (2003).
- [103] Hang-Ting Wang e Yupeng Wang, *Phys. Rev. B* **71**, 104429 (2005).
- [104] Haruhiko Kuroe *et al.* *Phys. Rev. B* **77**, 41956887 (2008).
- [105] Bao Xu, Han-Ting Wang, e Yupeng Wang, *Phys. Rev. B* **77**, 014401 (2008).
- [106] D. Reyes, A. Paduan-Filho, e M. A. Continentino *Phys. Rev. B*, **77** 052405 (2008).
- [107] Masashige Matsumoto, B. Normand, T. M. Rice, e Manfred Sigrist, *Phys. Rev. B* **69**, 054423 (2004).
- [108] M. Matsumoto, B. Normand, T. M. Rice, e M. Sigrist, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 077203 (2002).
- [109] Kwai-Kong Ng e Ting-Kuo Lee, *Phys. Rev. B* **73**, 014433 (2006).
- [110] G. M. Zhang, Q. Gu, e L. Yu, *Phys. Rev. B* **62**, 76 (2000).
- [111] C. Jurecka e W. Brenig, *Phys. Rev. B* **64**, 092406 (2001).
- [112] D. Reyes *et al.*, *Physica B* **359**, 714 (2005).
- [113] A. Langari e P. Thalmeier, *Phys. Rev. B* **74**, 024431 (2006).

- [114] D. Reyes e M. A. Continentino, *Phys. Rev. B*, **76** 075114 (2007).
- [115] D. Reyes e M. A. Continentino, *J. Phys.:Condens. Matter* **19**, 714 (2007).
- [116] P. Thalmeier e A. Langari *Phys. Rev. B* **75**, 174426 (2007).
- [117] H. Rezania, A. Langari, e P. Thalmeier, *Phys. Rev. B* **77**, 094438 (2008).
- [118] Rakesh Kumar e Brijesh Kumar, *Phys. Rev. B* **77**, 144413 (2008).
- [119] Takahiro Yamamoto, Rumi Manago, Yoshihiro Mori, e Chikara Ishii, *J. Phys. Soc. Jp.* **72**, 3204 (2003).
- [120] B. Normand, *Acta Phys. Polonica B* **31**, 3005 (2000).
- [121] Steven R. White, *Phys. Rev. B* **53**, 52 (1996).
- [122] Hang-Ting Wang *et al.*, *Phys. Rev. B* **56**, 14435 (1997).
- [123] H. T. Wang, H. Q. Lin e J. L. Shen, *Phys. Rev. B* **61**, 4019 (2000).
- [124] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, Cambridge Studies in Magnetism (Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom), (1997).
- [125] M. A. Continentino, G. M. Japiassú, e A. Troper, *Phys. Rev. B* **49**, 4432 (1994).
- [126] M. V. Tovar Costa, N. A. de Oliveira, G. M. Japiassú, e M. A. Continentino, *J. Mag. Mat. Mag* **177**, 331 (1998).
- [127] M. V. Tovar Costa, A. Troper, N. A. de Oliveira, G. M. Japiassú, e M. A. Continentino, *Phys. Rev. B* **57**, 6949 (1998).
- [128] N. A. de Oliveira, Marcus V. Tovar Costa, A. Troper, Gloria M. Japiassú, e M. A. Continentino, *Phys. Rev. B* **60**, 1444 (1999).

- [129] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- [130] C. Sanchez-Castro, K. S. Bedell, e B. R. Cooper, *Phys. Rev. B* **47**, 6879 (1993).
- [131] Tatiana Rappoport, *Correlações antiferromagnéticas de curto alcance em isolantes Kondo* Dissertação de Mestrado, Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense (1999).
- [132] J. R. Schrieffer e P. A. Wolff, *Phys. Rev.* **149**, 491 (1966).
- [133] P. Sinjukow e W. Nolting, *Phys. Rev. B* **65**, 212303 (2002).
- [134] P. Riseborough, *Adv. Phys.* **49**, 257 (2000).
- [135] E. Dagotto *et al.*, *Phys. Rev. B* **58**, 6414 (1998).
- [136] Tsunetsugu Hirokazu, Manfred Sigrist, e Ueda Kazuo *Rev. Mod. Phys.* **69**, 809 (1997).
- [137] N. Shibata, T. Nishino, K. Ueda, e C. Ishii, *Phys. Rev. B* **53**, R8828 (1996).
- [138] C. Lacroix e M. Cyrot, *Phys. Rev. B* **20**, 1969 (1979).
- [139] Z. P. Shi, R. R. Singh, M. P. Gelfand, e Z. Wang, *Phys. Rev. B* **51**, 15630 (1995).
- [140] Z. Wang, X. P. Li, e D. H. Lee, *Physica B* **199-200**, 463 (1984).
- [141] F. F. Assaad, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 796 (1999).
- [142] S. Capponi e F. F. Assaad, *Phys. Rev. B* **63**, 155114 (2001).
- [143] M. Vekic, J. W. Cannon, D. J. Scalapino, R. T. Scalettar, e R. L. Sugar, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 2367 (1995).
- [144] M. Jarrel, *Phys. Rev. B* **51**, 7429 (1995).

- [145] Weihong Zheng e J. Oitmaa, *Phys. Rev. B* **67**, 214406 (2003).
- [146] Yasuhiro Saito, Akihisa Koga, e Norio Kawakami, *J.Phys. Soc. Jpn.* **72**, 1208 (2003).
- [147] A. Luther e I. Peschel, *Phys. Rev. B* **12**, 3908 (1975).
- [148] A. Saguia e M. S. Sarandy, *quant-ph* 0208133, (2004).
- [149] P. Fazekas e Hae-Young Lee, *Mod. Phys. Lett. B* **6**, 1681 (1992).
- [150] P. Fazekas e Hae-Young Lee, *Phys. Rev. B* **48**, 7274 (1993).
- [151] S. P. Strong e A. J. Millis, *Phys. Rev. B* **50**, 9911 (1994).
- [152] V. L. Líbero e D. L. Cox, *Phys. Rev. B* **48**, 3783 (1993).
- [153] C. Godart, L. C. Gupta, C. V. Tomy, J. D. Thompson, e R. Vijayaraghavan, *Europhys. Lett.* **8**, 375 (1989).
- [154] R. T. Scalettar, D. J. Scalapino., e R. J. Sugar, *Phys. Rev. B* **31**, 7316 (1985).
- [155] M. A. Continentino e T. G. Rappoport, *J.Phys. A: Math. Gen.* **34**, 10829 (2001).
- [156] A. L. Cornelius e J. S. Schilling, *Phys. Rev. B* **49**, 3955 (1994).
- [157] Y. Matsushita, M. P. Gelfand, e C. Ishii, *J. Phys. Soc. Jpn.* **66**, 3648 (1997).
- [158] R. Jullien, J. N. Fields, e S. Doniach, *Phys. Rev. B* **16**, 4889 (1977).
- [159] R. Jullien, P. Pfeuty, A. K. Batthacharjee, e Coqblin, *J. Appl. Phys.* **50**, 7555 (1979).
- [160] W. Hanke e J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **25**, 6748 (1982).

- [161] T. G. Rappoport, A. Saguia, B. Boechat, e M. A. Continentino, *Europhys. Lett.* **61** (6), 831 (2003).
- [162] T. G. Rappoport, A. Saguia, B. Boechat, e M. A. Continentino, *Phys. Rev. B* **64**, 140402(R) (2001).
- [163] P. Santini e J. Solyom, *Phys. Rev. B* **46**, 7422 (1992).
- [164] S. Moukouri, L. G. Caron, C. Bourbonnais, e L. Hubert, *Phys. Rev. B* **51**, 15920 (1995).
- [165] H. Otsuka e T. Nishino, *Phys. Rev. B* **52**, 15066 (1995).
- [166] M. N. Kiselev, D. N. Aristov, e K. Kikoin *Phys. Rev. B* **71**, 092404 (2005).
- [167] Takahiro Yamamoto, Masanari Asano, e Chikara Ishii, *J. Phys. Soc. Jp.* **70**, 3678 (2001).
- [168] Takahiro Yamamoto, Kôichirô Ide, e Chikara Ishii, *Phys. Rev. B* **66**, 104408 (2002).
- [169] P. Santini e J. Sólyom *Phys. Rev. B* **46**, 7422 (1992).
- [170] Wolfram Brenig, *Phys. Rev. B* **73**, 104450 (2006).
- [171] A. Saguia, T. G. Rappoport, B. Boeachat, e M. A. Continentino, *Physica A* **344**, 644 (2004).
- [172] B. Normand e T. M. Rice *Phys. Rev. B* **54**, 7180 (1996).
- [173] D. Reyes, *Diagrama de fases do modelo colar de Kondo a baixas temperaturas* Disertação de Mestrado, CBPF (2005).
- [174] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics, Second Edition*, Elsevier Ltd., (1996).



- [175] S. Mahmoudian e A. Langari *Phys. Rev. B* **77**, 024420 (2008).
- [176] D. Reyes, M. A. Continentino, e Han-Ting Wang, arXiv:0801.2792 (2008).
- [177] Alan Jeffrey, *Table of Integrals*.
- [178] S. Sachdev, *Phys. Rev. B* **55**, 142 (1997).
- [179] S. K. Malik, Latika Menon, V. K. Pecharsky, e K. A. Gschneidner, *Phys. Rev. B* **55**, 11471 (1997).
- [180] T. Caldwell *et al.*, *Phys. Rev. B* **75**, 075106 (2007).
- [181] T. Takabatake *et al.*, *Phys. Rev. B* **45**, 5740 (1992).
- [182] Takuma Ohashi, Akihisa Koga, Sei-ichiro Suga, e Norio Kawakami, *Phys. Rev. B* **70**, 245104 (2004).
- [183] Takuma Ohashi, Sei-ichiro Suga, e Norio Kawakami, *J. Phys.:Condens. Matter* **17**, 4547 (2005).
- [184] K. S. Beach, Patrick A. Lee, e P. Monthoux, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 026401 (2004).
- [185] K. Sugiyama *et al.*, *J. Phys. Soc. Jp.* **57**, 3946 (1988).
- [186] M. F. Hundley, P. C. Canfield, J. D. Thompson, Z. Fisk, e J. M. Laurence, *Phys. Rev. B* **42**, 4862 (1990).
- [187] M. Jaime *et al.*, *Nature* **405**, 160 (2000).
- [188] A. Menth, E. Buehler, e T. H. Geballe, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 295 (1969).
- [189] J. C. Cooley *et al.*, *J. Supercond.* **12**, 171 (1999).

- [190] A. Jayaraman, V. Narayanamurthi, E. Bucher, e R. G. Maines, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 1430 (1970).
- [191] P. Haen, F. Lapierre, J. M. Mignot, R. Tournier, e F. Holtzberg, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 304 (1979).
- [192] T. Takabatake *et al.*, *Phys. Rev. B* **41**, 9607 (1990).
- [193] G. S. Boebinger *et al.*, *Physica B* **211**, 227 (1995).
- [194] J. C. Cooley, M. C. Aronson, Z. Fisk, e P. C. Canfield, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1629 (1995).
- [195] J. C. Cooley, M. C. Aronson, A. Lacerda, Z. Fisk, P. C. Canfield, e R. P. Guertin, *Phys. Rev. B* **52**, 7322 (1995).
- [196] S. Yeo *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 046401 (2003).
- [197] Igor Milat, Fakher Assaad, e Manfred Sigrist, *Eur. Phys. J. B* **38**, 571 (2004).
- [198] D. Reyes e M. A. Continentino, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **320**, 461 (2008).
- [199] B. Normand e T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **56**, 8760 (1997).
- [200] F. Mila, *Eur. Phys. J. B* **6**, 201 (1998).
- [201] C. R. Rotundu e B. Andraka, *Phys. Rev. B* **73**, 144429 (2006).
- [202] H. Sugawara *et al.*, *Phys. Rev. B* **71**, 125127 (2005).
- [203] C. D. Batista *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 257201 (2007).
- [204] W. Knafo *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 137206 (2007).
- [205] S. E. Sebastian *et al.*, *Nature* **441**, 617 (2006).

- [206] Marianna Maltseva e Piers Coleman, *Phys. Rev. B* **72**, 174415 (2005).
- [207] Yong-Jun Wang, Mei-Rong Li e Chang-De Gong, *Phys. Rev. B* **46**, 12034 (1992).
- [208] Stockert, H. von Lohneysen, H. Rosch, N. Pyka, e M. Loewenhaupt, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5627 (1998).
- [209] T. Senthil, A. Vishwanth, L. Balents, S. Sachdev, e M. P. A. Fisher, *Science* **303**, 1490 (2004).
- [210] C. D. Batista e Z. Nussinov, *Phys. Rev. B* **72**, 045137 (2005).
- [211] C. Xu e J. E. Moore, *Phys. Rev. B* **72**, 064455 (2005).
- [212] J. G. Fertig e M. B. Maple, *Solid State Commun.* **15**, 453 (1974).
- [213] E. Simanek, *Phys. Rev. B.* **23**, 5762 (1981).
- [214] P. E. Cladis, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 48 (1975).
- [215] N. H. Tinh, F. Hardouin, e C. Destrade, *J. Physique* **43**, 1127 (1982).
- [216] O. J. Indekeu e A. N. Berker, *Phys. Rev. A.* **33**, 1158 (1986).
- [217] A. M. Manheimer, S. M. Bhagat, e H. S. Chem, *Phys. Rev. B.* **26**, 456 (1982).
- [218] R. J. Vasconcelos dos Santos, F. C. Sa Barreto, e S. Coutinho, *J. Phys. A: Math. Gen* **23**, 2563 (1990).
- [219] S. N. Bose, *Z. Phys.* **26**, 178 (1924).
- [220] A. Einstein, *Sitzber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss.*, pg. 261, (1924); e pg. 3, (1925).
- [221] M. Randeria, *Bose-Einstein Condensation*, ed. by A. Griffin, D. W. Snoke e S. Stringari (Cambridge University Press, N. Y. 1995).

- [222] K. Davis, M. Mewes, M. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durtee, D. M. Kurn, e W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
- [223] F. Bloch, *Z. Physik* **61**, 206 (1930).
- [224] T. Matsubara e H. Matsuda, *Prog. Theor. Phys.* **16**, 569 (1956).
- [225] Grégoire Misguich e Masaki Oshikawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **73**, 3429 (2004).
- [226] Han-Ting Wang e Yupeng Wang, *J. Phys.:Condens. Matter* **18**, 4719 (2006).
- [227] É. G. Batyev e L. S. Braginskii, *Sov. Phys. JETP* **60**, 781 (1984).
- [228] É. G. Batyev e L. S. Braginskii, *Sov. Phys. JETP* **62**, 173 (1985).
- [229] I. Affleck, *Phys. Rev. B* **41**, 6697 (1990).
- [230] T. Giamarchi e A. Tsevlik, *Phys. Rev. B* **59**, 11398 (1999).
- [231] Stefan Wessel *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 206407 (2001).
- [232] T. M. Rice, *Science* **298**, 760 (2002).
- [233] Omid Nohadani *et al.*, *Phys. Rev. B* **69**, 220402(R) (2004).
- [234] C. Rüegg, *et al.*, *Nature* **423**, 62 (2003).
- [235] V. S. Zapf *et al.*, *Phys. Rev. Lett* **96**, 077204 (2006).
- [236] V. N. Glazkov, A. I. Smirnov, H. Tanaka, e A. Oosawa, *Phys. Rev. B* **69**, 184410 (2004).
- [237] S. O. Demokritov, *et al.* *Nature* **443**, 430 (2006).
- [238] J. Kasprzak, *et al.* *Nature* **443**, 409 (2006).
- [239] Y. M. Bunkov e G. E. Volovik, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 265302 (2007).

- [240] G. E. Volovik, Preprint at <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0701180> (2007).
- [241] A. V. Syromyatnikov, *Phys. Rev. B* **75**, 134421 (2007).
- [242] Fumiko Yamada *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 013701 (2008).
- [243] A. Oosawa, H. Ishii, e H. Tanaka, *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, 265 (1999).
- [244] A. Oosawa, H. Aruga Katori, e H. Tanaka, *Phys. Rev. B* **63**, 134416 (2001).
- [245] N. Cavadini *et al.*, *Phys. Rev. B* **63**, 172414 (2001).
- [246] N. Cavadini *et al.*, *Phys. Rev. B* **65**, 132415 (2002).
- [247] C. Rüegg *et al.*, *Nature* **423**, 62 (2003).
- [248] E. Ya. Sherman, P. Lemmens, B. Busse, A. Oosawa, e H. Tanaka, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 057201 (2003).
- [249] C. Rüegg *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 247201 (2004).
- [250] O. Vyaselev, M. Takigawa, A. Vasiliev, A. Oosawa, e H. Tanaka, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 207202 (2004).
- [251] C. Rüegg *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 267201 (2005).
- [252] M. Jaime *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 087203 (2004).
- [253] S. E. Sebastian, *et al.*, *Phys. Rev. B* **72**, 100404(R) (2005).
- [254] Y. Sasago, K. Uchinokura, A. Zheludev, e G. Shirane, *Phys. Rev. B* **55**, 8357 (1997).
- [255] C. Rüegg *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 017202 (2007).
- [256] W. Shiramura *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **66**, 1900 (1997).

- [257] T. Kato *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 752 (1998).
- [258] A. Oosawa *et al.* *Phys. Rev. B* **66**, 104405 (2002).
- [259] G. Chaboussant *et al.*, *Phys. Rev. B* **55**, 3046 (1997).
- [260] M. B. Stone *et al.*, *Phys. Rev. B* **65**, 064423 (2002).
- [261] M. Mito *et al.*, *Phys. Rev. B* **65**, 104405 (2002).
- [262] T. Radu *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 127202 (2005).
- [263] S. E. Sebastian, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 189703 (2006).
- [264] S. E. Sebastian, *et al.*, *Phys. Rev. B* **71**, 212405 (2005).
- [265] S. A. Zvyagin *et al.*, *Phys. Rev. Lett* **98**, 047205 (2007).
- [266] V. S. Zapf *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **101**, 09E106 (2007).
- [267] A. Paduan-Filho, R. D. Chirico, K. O. Joung, e R. L. Carlin, *J. Chem. Phys.* **74**, 4103 (1981).
- [268] A. Paduan-Filho *et al.*, *J. Appl. Phys.* **95**, 7537 (2004).
- [269] A. Paduan-Filho *et al.*, *Phys. Rev. B* **69**, 020405(R) (2004).
- [270] I. Affleck, *Phys. Rev. B* **43**, 3215 (1991).
- [271] J. E. Hirsch e S. Tang, *Phys. Rev. B* **39**, 2850 (1989).
- [272] S. Sarker, C. Jayaprakash, H. R. Krishnamurthy, e M. Ma, *Phys. Rev. B* **40**, 5028 (1989).
- [273] Hang-Ting Wang *et al.*, *Phys. Rev. B* **61**, 4019 (2000).
- [274] M. Troyer e S. Sachdev, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5418 (1998).

- [275] Hang-Ting Wang e Yupeng Wang, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 386227 (2007).
- [276] Bao Xu, Hang-Ting Wang, e Yupeng Wang, *Phys. Rev. B* **77**, 014401 (2008).
- [277] D. Reyes e A. Paduan-Filho, comunicação privada.
- [278] D. Reyes e Stefan Wessel, comunicação privada.
- [279] S. Sachdev *et al.*, *Phys. Rev. B* **50**, 258 (1994),
- [280] M. Crisan, I. Tifrea, D. Bodea, e I. Grosu, *Phys. Rev. B* **72**, 184414 (2005).
- [281] D. Reyes e M. A. Continentino, não publicado.
- [282] D. Reyes e M. A. Continentino, em preparação.
- [283] B. Normand *et al.*, *J. Phys.:Condens. Matter* **16**, S867 (2004).
- [284] M. A. Continentino, *Phys. Rev. B* **73**, 132406 (2006).
- [285] F. Keffer em *Handbuch der Physik*, Springer-Verlag, Berlin, (1966), Vol. XVIII/2.
- [286] T. Holstein e H. Primakoff, *Phys. Rev.* **58**, 1098 (1940).
- [287] F. J. Dyson, *Phys. Rev.* **102**, 1217 (1956).
- [288] S. V. Maleev, *Zh. Éksp. Theor. Fiz.* **30**, 1010 (1957).
- [289] D. C. Mattis, *Theory of Magnetism I*, Springer-Verlag, Berlin, (1981).
- [290] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1153 (1983).
- [291] F. D. M. Haldane, *Phys. Lett. A* **93**, 464 (1983).
- [292] F. D. M. Haldane, *J. Appl. Phys.* **57**, 3359 (1985).

- [293] R. Botet, R. Jullien, e M. Kolb, *Phys. Rev. B* **28**, 3914 (1983).
- [294] T. Sakai e M. Takahashi, *Phys. Rev. B* **42**, 4537 (1990).
- [295] Y. Hatsugai e M. Kohmoto, *Phys. Rev. B* **44**, 11789 (1991).
- [296] T. Sakai, *Phys. Rev. B* **62**, R9240 (2000).
- [297] H. Q. Lin e V. J. Emery, *Phys. Rev. B* **40**, 2730 (1989).
- [298] W. H. Wong, C. F. Lo, e Y. L. Wang, *Phys. Rev. B* **50**, 6126 (1994).
- [299] D. Reyes e Hang-Ting Wang, comunicação privada.
- [300] M. A. Continentino, *J. Phys.:Condens. Matter* **18**, 8395 (2006).
- [301] E. Miranda, *Notas sobre Transições de fase e o grupo de renormalização* (2005).
- [302] W. Zheng, *Phys. Rev. B* **55**, 12267 (1997).
- [303] Q. Gu, D-K Yu, e J-L Shen, *Phys. Rev. B* **60**, 3009 (1999).
- [304] A. McCollam *et al.*, *Physica B* **359**, 1 (2005).
- [305] F. Ronning *et al.*, *Phys. Rev. B* **71**, 104528 (2005).
- [306] S. L. Bud'ko, E. Morosan, e P. C. Canfield, *Phys. Rev. B* **69**, 014415 (2004).
- [307] P. G. Niklowitz, G. Knebel, J. Flouquet, S. L. Bud'ko, e P. C. Canfield, Preprint cond-mat/0507211 (2005).
- [308] J. G. Sereni *et al.*, *Phys. Rev. B* **48**, 3747 (1993).
- [309] H. Wilhelm e D. Jaccard, *Phys. Rev. B* **66**, 064428 (2002).